СПЛАЙНЫ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ
(Вычислительные системы)

1986 год Выпуск 115

УДК 518.5:681.3

О ГАРАНТИРОВАННОЙ ДВУСТОРОННЕЙ АППРОКСИМАЦИИ ВЕЩЕСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ЛИНЕЙНЫМИ СПЛАЙНАМИ НА ЭВМ

С.А. Югай

В некоторых математических задачах и приложениях решающим фактором является получение гарантированного результата за доступное время с помощью реальной ЭВМ. Поскольку непосредственная оценка вычислительных погрешностей обычно оказывается сложной и неавтоматизируемой, то для получения гарантированных результатов часто используется интервальный анализ (см. обзор в [1] и как конкретный пример [2]), а также вычисления на ЭВМ с направленным округлением [3].

Применительно к скалярным функциям непосредственное применение интервального анализа соответствует кусочно-постоянной аппроксимации. В [4,5] было предложено производить двусторонние приближения кусочно-линейными функциями (соответствует аппроксимации сплайнами первой степени). В данной работе вводится необходимая для практического построения таких приближений на ЭВМ функционально-интервальная арифметика, а также описаны реализующий ее пакет программ для ЭВМ серии ЕС и полученные с его помощью результаты.

Интервальное число определяется парой вещественных чисел, являющихся его границами: $[a,b] = \{x \mid a \le x \le b\}$. Величина $W([a,b]) = b - a$ называется шириной интервального числа.

Интервальная арифметика вводится следующим образом:

$$[a,b] * [c,d] = \{x * y \mid a \le x \le b,\ c \le y \le d\},$$

где $*$ - любая из операций $+,-,\cdot,/$. Свойства интервальных операций приведены в [1,6].

Пусть $f(x)$ - вещественная рациональная функция с областью определения $x \in X$, $[f](X)$ - интервальное выражение относительно X, полученное из f заменой x на X и арифметических операций на ин -

тервальные операции (естественное интервальное расширение), $\{f(x) \mid x \in X\} \subset [f](X)$. Заметим, что значение естественного интервального расширения, и тем самым результаты аппроксимации при конкретных вычислениях, очевидно, зависят от способа записи функции.

Пусть, например, $f_1(x) = x$, $f_2(x) = 2x - x$, $x \in [a,b]$. Тогда $[f_1](X) \equiv X = [a,b]$, $W([f_1]) = b - a$.

С другой стороны,

$[f_2](X) \equiv 2X - X = [2a-b, 2b-a]$, $W([f_2]) = 3(b-a)$.

Если $f(x)$ определена на интервале $[a,b]$, X_i – некоторое разбиение $[a,b]$, то

$$f(x) \in [F] \equiv \bigcup_{i=1}^{n} [f](X_i), \quad x \in [a,b] .$$

Здесь $[F]$ – о б л а с т н о е р а с ш и р е н и е ф у н к ц и и f.

Таким образом, непосредственное применение интервальной арифметики без дополнительных построений и оценок дает возможность по-получать гарантированную двустороннюю аппроксимацию вещественных функций в виде кусочно-постоянных полос (рис.I).

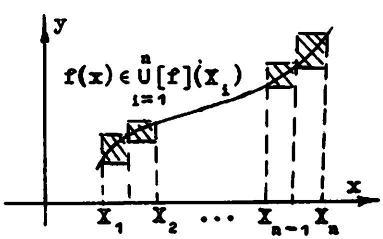

Рис. I

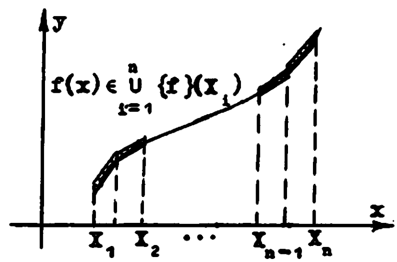

Рис. 2

I. Функционально-интервальная арифметика. Как было замечено выше, применение интервальной арифметики к вычислению границ вещественных функций соответствует кусочно-постоянной аппроксимации. Очевидно, кусочно-линейная аппроксимация вещественных функций должна быть значительно точнее (рис.2).

В связи с этим введем следующее

ОПРЕДЕЛЕНИЕ I. Функциональным интервалом P на отрезке $[a,b]$ будем называть множество всех вещественных функций $\{y(x)\}$, ограниченное линейными функциями $y_1(x), y_2(x)$ $(y_1(x) \le y_2(x), x \in [a,b])$, т.е.

$$P = \{y(x) \mid y_1(x) \le y(x) \le y_2(x)\}, \quad x \in [a,b] .$$

Обозначив $A = [y_1(a), y_2(a)]$, $B = [y_1(b), y_2(b)]$, можно дать эквивалентное определение функционального интервала через два обычных интервала A и B: $P = \{A, B\}$. Это обстоятельство позволяет представлять функциональный интервал в памяти ЭВМ в виде цельного объекта, определяемого двумя интервалами.

Под шириной функционального интервала $P = \{A, B\}$ будем понимать ширину "среднего интервала" $W(P) = W((A + B)/2)$.

Прежде чем определить функционально-интервальную арифметику, введем сначала арифметические операции над функциональными множествами (в отличие от функциональных интервалов у них граничные функции не обязательно линейные):

$$P = \{p(x) \mid p_1(x) \le p(x) \le p_2(x)\},$$
$$Q = \{q(x) \mid q_1(x) \le q(x) \le q_2(x)\}.$$

Функционально-множественную арифметику введем следующим образом:

$$P * Q = \{p(x) * q(x) \mid p(x) \in P,\ q(x) \in Q\}, \tag{1}$$

где $* \in \{+, -, \cdot, /\}$. Если $*$ означает деление, то требуется, чтобы для любого элемента $q \in Q$ имело место условие $q(x) \ne 0$. Всюду в дальнейшем это условие предполагается выполненным.

Нетрудно видеть, что функционально-множественная арифметика хотя и замкнута, но не конструктивна, т.е. для произвольных P и Q нельзя задать алгоритм вычисления соответствующей операции над ними.

Пусть теперь, в частности, P и Q - функциональные интервалы, т.е. граничные функции $p_i(x), q_i(x)$ $(i = 1,2)$ в их определении - линейные. Тогда из определения I следует, что они однозначно определены через граничные интервалы: $P = \{A, B\}$, $Q = \{C, D\}$, и непосредственно из теоретико-множественного определения (I) получаем формулу для операций сложения и вычитания

$$P \pm Q = \{A \pm C,\ B \pm D\}. \tag{2}$$

Очевидно, правая часть (2) является функциональным интервалом.

В случае операции умножения или деления над функциональными интервалами P и Q в правой части (I) получается, вообще говоря, функциональное множество, ограниченное криволинейными границами

$$P*Q = \{y(x) \mid \min_{i,j=1,2} [p_i(x)*q_j(x)] \le y(x) \le \max_{i,j=1,2} [p_i(x)*q_j(x)]\}. \quad (3)$$

Поэтому простое использование функционально-множественной арифметики для выполнения операций с функциональными интервалами не позволяет построить замкнутую функционально-интервальную арифметику.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Функционально-интервальной арифметикой будем называть набор правил, дающий по двум заданным P и Q функциональный интервал Y, удовлетворяющий условиям:

1) если $p(x)\in P$, $q(x)\in Q$, то $p(x)*q(x)\in Y$;

2) если некоторый функциональный интервал Y_1, отличный от Y, удовлетворяет первому свойству, то не может быть $Y_1 \subseteq Y$.

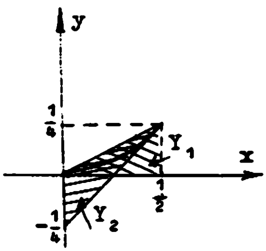

Рис. 3

Пусть $y(x) = x^2$, $x\in[0,0.5]$. Тогда можно задать (рис.3):

1) $y(x) \in \{[0,0],[0,0.25]\} \equiv Y_1$;

2) $y(x) \in \{[-0.25,0],[0.25,0.25]\} \equiv Y_2$.

Оба этих функциональных интервала нельзя сузить и $Y_1 \not\subseteq Y_2$, $Y_2 \not\subseteq Y_1$. Предпочтительнее выбрать первый способ, поскольку $y(x) \equiv x^2 > 0$.

2. Операции умножения и деления. В качестве критерия оптимальности формул, задающих результаты операций умножения и деления, накладываются условия "наибольшей суженности" в средней точке функционального множества - результата (3). Для задания формул этих операций, а также построения соответствующих расширений некоторых математических функций нам понадобится следующий результат.

ЛЕММА. Если для дважды непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ вторая производная $f''(x)$ знакопостоянна на $[a,b]$, то

$$f(x) \in \{[f(a),\ f(x^*) - Lf'(x^*)],\ [f(b),\ f(x^*) + Lf'(x^*)]\},$$

где $[p,q] = [\min(p,q),\max(p,q)]$ - представление внешним интервалом [I], $x^* = (a+b)/2$, $L = (b-a)/2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Предположим, для определенности, что $f''(x) > 0$ на $[a,b]$ (рис.4). Тогда, очевидно, график $f(x)$ заключен в линейной полосе, ограниченной отрезком с концами $(a,f(a)),(b,f(b))$ и касательной к $f(x)$ в средней точке $x^* = (a+b)/2$. Таким образом,

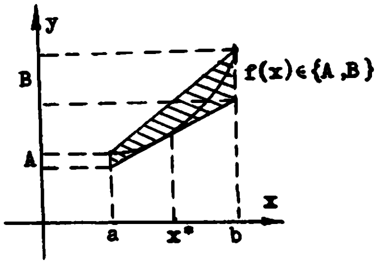

Рис. 4

в этом случае имеем включение
$f(x)\in\{[f(a), f(x^*)-Lf'(x^*)]\ ,\ [f(x^*)+Lf'(x^*), f(b)]\}$,
из которого следует утверждение леммы.

Обозначим $f_{ij}(x) = p_i(x) * q_j(x)$ $(i,j = 1,2)$, где $*$ – символ одной из арифметических операций – умножение или деление; $p_i(x)$, $q_j(x)$ – линейные граничные функции в определении функциональных интервалов операндов. Очевидно, $f''_{ij}(x)$ не меняет знак на $[a,b]$ и, следовательно, в силу леммы для каждой пары i,j имеют место включения

$$f_{ij}(x) \in \{[f_{ij}(a),\ f_{ij}(x^*) - Lf'_{ij}(x^*)],\ [f_{ij}(b),\ f_{ij}(x^*) + Lf'_{ij}(x^*)]\}. \qquad (4)$$

Обозначим левый и правый интервалы соответственно через A_{ij} и B_{ij}. Используя (4), получаем

$$P * Q = \{y(x) \mid \min_{i,j=1,2}[f_{ij}(x)] \le y(x) \le \max_{i,j=1,2}[f_{ij}(x)]\} \subseteq$$
$$\subseteq \{\ \bar{\bigcup_{i,j=1,2}} A_{ij},\ \bar{\bigcup_{i,j=1,2}} B_{ij}\ \} \equiv Y\ . \qquad (5)$$

Здесь $\bar{\cup}$ – интервальная операция внешнего представления объединения.

Из (5) видно, что по вышеописанному алгоритму заведомо происходит "загрубление" результата операции умножения или деления, но вместе с тем сохраняется важное свойство: монотонность по включению этих операций. Таким образом, мы ввели функционально-интервальную арифметику, замкнутую относительно арифметических операций.

3. Функционально-интервальные расширения. Учитывая определение 2, введем

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Для заданной скалярной функции f скалярного аргумента будем называть Q функционально-интервальным расширением, если для любого интервала $X = [x_-, x_+]$ график сужения функции $f(x)|_{x\in X}$ принадлежит функциональному интервалу $Q(X)$.

Будем обозначать такие расширения через $\{f\}$. В частности, для $f(x) \equiv x$ имеем $\{f\}(X) \equiv \{X\} = \{[x_-, x_-], [x_+, x_+]\}$.

Если $f(x)$ определена на интервале $[a,b]$, X_i – некоторое разбиение $[a,b]$, то имеет место следующее свойство функционально-интервальной арифметики (см. рис.2):

$$f(x) \in \bigcup_{i=1}^{n} \{f\}(X_i), \quad x \in [a,b].$$

Пусть $f_1(x) = x$, $x \in [a,b]$. Тогда легко видеть, что

$$f_1(x) \in \{y(x) \mid x \le y(x) \le x\} = \{[a,a], [b,b]\} \equiv P_1$$

и, следовательно, $W(P_1) = 0$.

Пусть далее $f_2(x) = 2x-x$, $x \in [a,b]$. Имеем $f_2(x) \in \{y(x) \mid 2x-x \le$ $\le y(x) \le 2x-x\} = \{[a,a],[b,b]\} \equiv P_2$. Очевидно, $W(P_2) = 0$.

Таким образом, уже для простейших функций значения их функционально-интервальных расширений значительно точнее, чем значения соответствующих интервальных расширений.

В качестве нетривиального примера возьмем функцию $f(x) =$ $= x^2 - x^4$, $x \in [-0.3, 0.5]$. Применяя интервальные операции, находим

$$[f](X) \equiv X^2 - X^4 = [-0.2125, 0.2875]. \tag{6}$$

Используя лемму, имеем $f(x) \in \{[f(0.1) - 0.4 \cdot f'(0.1), f(-0.3)],$ $[f(0.1) + 0.4 \cdot f'(0.1), f(0.5)]\} \equiv \{f\}(X)$. Учитывая, что $f(0.1) =$ $= 0.0099$, $f(-0.3) = 0.0819$, $f(0.5) = 0.0625$, $f'(0.1) = 0.196$, получаем $\{f\}(X) = \{[0.0099 - 0.4 \cdot 0.196, 0.0819], [0.0099 +$ $+ 0.4 \cdot 0.196, 0.0625]\} = \{[-0.0685, 0.0081], [0.0883, 0.1875]\}$.

В итоге ширина интервала (6) $W([f]) = 0.5$ уменьшена до величины $W(\{f\}) = 0.00728$.

4. Программная реализация функционально-интервальной арифметики. Для реализации описанных выше арифметических операций над функциональными интервалами нами разработан соответствующий набор программ. Он состоит из модулей, которые реализуют

1) вспомогательные операции: QP(A,B) – формирование функционального интервала, GQL(P) – выделение левого интервала, GQR(P) – выделение правого интервала, QUN(P,Q) – представление внешним функциональным интервалом, IMQ(P,Q) – определение вложения;

2) арифметические операции: QA(P,Q) – сложение, QS(P,Q) – вычитание, QM(P,Q) – умножение, QD(P,Q) – деление, QW(P,K) – возведение в степень;

3) расширения некоторых математических функций: QSQRT(P) – квадратный корень, QEXP(P) – экспонента, QSIN(P) – синус, QCOS(P) – косинус и др. Все модули оформлены как программные единицы типа функции.

Программы формирования и выделения элементов написаны на машинно-ориентированном языке АССЕМБЛЕР. Программные модули других операций реализованы на алгоритмическом языке ФОРТРАН-IУ. Поскольку алгоритмы расширений арифметических операций в функционально-интервальной арифметике предполагают вычисления с обычными интервалами, то нами использован пакет программ интервального анализа для ЕС ЭВМ [7]. С применением последнего осуществляется автоматический учет ошибок округлений при счете на ЭВМ и обеспечивается доказательность вычислений [3] расширений операций с функциональными интервалами.

Машинный функциональный интервал определяется двумя машинными интервалами длиной 8 байт каждый и представляется в памяти ЭВМ цельным объектом. С этой целью используются возможности языка ФОРТРАН-IУ представления комплексного числа удвоенной точности длиной 16 байт, у которого первые 8 байт (действительная часть) соответствуют левой границе машинного функционального интервала, следующие 8 байт (мнимая часть) - правой границе.

5. Применение функционально-интервальной арифметики к некоторым математическим задачам. Приведем здесь некоторые результаты, полученные с использованием построенного пакета программ.

5.1. Вычисление определенных интегралов. Пусть $\{f\}(X)$ - функционально-интервальное расширение непрерывной вещественной функции $f(x)$ заданной на отрезке $[a,b]$. Требуется вычислить значение $\int_a^b f(x)dx$ с некоторой гарантированной точностью.

Поскольку выполнено включение $f(x)\in\{f\}(X_i) \equiv \{A_i, B_i\}$ для всех $x\in X_i$, где $X_i=[x_{i-1}, x_i]$ - подынтервал некоторого разбиения $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ отрезка $[a,b]$, то справедлива формула

$$\int_a^b f(x)dx \in \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(A_i + B_i)W(X_i), \tag{7}$$

где $W(X_i)$ - ширина интервала X_i.

По существу, эта формула является интервальным аналогом классической формулы трапеций, но, в отличие от последней, ее применение позволяет получить оценку погрешности численного интегрирования без привлечения информации о производных функции f. Учет ошибок округлений и погрешности метода ведется автоматически при вычислении функционально-интервального расширения функции f на ЭВМ.

Результаты расчетов контрольно-тестовых примеров показывают хорошую практическую точность формулы (7). Вычислим к примеру $J = \int_0^1 (x^3-x)dx = -1/4$. При выборе шага $h = 0.01$ расчет по методу трапеций дает значение $J \approx -0.24988$. Применение функционально-интервальной арифметики на ЭВМ ЕС-1022 с тем же числом шагов дает гарантированный результат: $J \in [-0.25011, -0.24989]$.

5.2. Задача о покрытиях. Ранее [8] нами была получена с применением интервального анализа оценка сверху 0.27092 ед^2 для площади выпуклой фигуры, покрывающей любую кривую длины 1. Имеет место

ТЕОРЕМА [4]. Всякую кривую длины 1 можно заключить внутри фигуры, ограниченной ломаной $y = k|x|$ ($k = \mathrm{tg}\,\alpha, 30^\circ < \alpha < 45^\circ$) и кривой $y = \max(T_1(|x|), T_2(|x|)), x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$, где

$$T_1(x) = \begin{cases} \sqrt{1-x^2}, \ |x| \le x_0, \quad x_0 = \dfrac{1-k^2}{1+k^2}, \\ -a|x| + b, \ x_0 < |x|, \quad a = \dfrac{1-k^2}{2k}, \ b = \dfrac{1+k^2}{2k}, \end{cases}$$

$$T_2(x) = [\varphi(x) + \sqrt{\varphi^2(x) - c\psi(x)}]/c, \quad c = \frac{k^2}{1+k^2},$$

$$\varphi(x) = k - \frac{k|x|}{1+k^2} - \frac{1}{\sqrt{1+k^2}}, \qquad \psi(x) = \left(\frac{|x|}{\sqrt{1+k^2}} - k\right)^2 - 1.$$

Расчеты на ЭВМ границы этой фигуры и оптимизация ее площади (относительно параметра α) с применением пакета программ функционально-интервальной арифметики, дают доказательную оценку 0.26714 ед^2, что улучшает известные оценки площади "универсальной покрышки" для кривых постоянной длины.

5.3. Дифференциальные уравнения. Опишем применение функционально-интервальной арифметики для построения гарантированных оценок решений дифференциальных уравнений. Для получения таких оценок в [1] применялись методы интервального анализа. В [5] предложен вычислительный алгоритм, для которого не требуется априорного задания области значений искомой функции, вместо чего применяется ее автоматическое апостериорное определение на каждом шаге с использованием следующего результата.

Если функциональный интервал $\{A, B\}$ удовлетворяет условию

$$\{F_1, F_2\} \equiv \{\bar{F}\}\left([x_0, x_1], \{Y_0, Y_0 + (x_1 - x_0)\frac{A+B}{2}\}\right) \subset \{A, B\}, \tag{8}$$

где $\bar{f}$ – функционально-интервальная функция, соответствующая гладкой функции $f(x,y)$, такая, что из $y(x)\in\{U,V\}$, $x\in X=[x_0,x_1]$ следует $f(x,y(x))\in\{\bar{f}\}(X,\{U,V\})$, то решение начальной задачи

$$y'=f(x,y),\quad x\in[x_0,x_1],\quad y(x_0)\in Y_0 \qquad (9)$$

существует и удовлетворяет условию

$$y(x_1)\in Y_0+(x_1-x_0)(F_1+F_2)/2 .$$

Таким образом, получаем следующий алгоритм, определяющий траекторию решения начальной задачи на один шаг.

Берем некоторый функциональный интервал $\{A,B\}$ (на первом шаге можно положить $\{A,B\}\equiv\{f\}(X,\{Y_0\})$) и проверяем условие (8). Если оно выполняется, то имеем:

$$y(x)\in\{Y_0, Y_0+\int_{x_0}^{x} f(s,y(s))ds\},\qquad x\in[x_0,x_1],$$

иначе расширяем $\{A,B\}$ (практически применяется $\{A,B\}=\{F_1,F_2\}$) и опять проверяем выполнение (8).

В случае одного уравнения возможно параллельное нахождение верхней и нижней границ траекторий решений (9). При таком подходе значительно сужается ширина функциональных интервалов, содержащих решения, а при достаточно малом шаге интегрирования получаются сужающиеся полосы, если интегральные кривые фактически сближаются. Однако это требует дополнительных затрат машинного времени.

Как отмечается многими авторами в работах по интервальному анализу, вычисления на ЭВМ в рамках интервальной арифметики могут давать в результате неприемлемо широкие интервалы. Это происходит по различным причинам:

- из-за недостаточной точности реализуемого интервального метода;

- из-за накопления ошибок округлений, возникающих вследствие усечения разрядов в представлении интервальных чисел в памяти ЭВМ;

- из-за неустранимых ошибок, связанных с субдистрибутивностью, отсутствием обратных операций для сложения и умножения и др.

Первые две причины устранимы с разработкой более точных интервальных и интервально-аналитических методов и созданием "интервальной ЭВМ", в которой аппаратно реализуются интервальные операции.

Последнее неприятное обстоятельство приводит к необходимости его "устранения" различными приемами в каждом конкретном случае. Этим объясняется, по-видимому, появление различных модификаций и "уточнений" интервальной арифметики: "огрубления полиномами" [9], "обобщенной интервальной арифметики" [10], "модифицированной интервальной арифметики" [11] и др.

Описанная в настоящей работе функционально-интервальная арифметика и реализованный пакет программ являются дальнейшим расширением математического обеспечения для доказательных вычислений на ЭВМ, и вместе с тем это - попытка сделать интервальную арифметику более точной в конкретных вычислениях.

Из расчетов контрольно-тестовых примеров с применением функционально-интервальной арифметики можно видеть, что полученные результаты, как правило, на порядок точнее, чем в интервальной арифметике, но при этом более чем вдвое увеличивается время счета на ЭВМ. Однако в тех случаях, когда надо получить гарантированный результат с помощью ЭВМ, такой подход позволяет автоматизировать получение новых математических утверждений и обеспечивает их строгое математическое обоснование.

Литература

1. ШОКИН Ю.И. Интервальный анализ. -Новосибирск: Наука, 1981. - 112 с.

2. БАЯЧОРОВА Б.Д. Применение доказательных вычислений на ЭВМ для получения оценок погрешности сплайн-интерполяции на нерегулярной сетке. -В кн.: Методы сплайн-функций в численном анализе (Вычислительные системы, вып. 98). Новосибирск, 1983, с.134-143.

3. ПАНКОВ П.С. Доказательные вычисления на электронных вычислительных машинах. -Фрунзе: Илим, 1978. - 185 с.

4. ЮГАЙ С.А. Функционально-интервальная арифметика и возможности ее использования. -В кн.: Материалы УП Межреспубликанской научной конференции молодых ученых. Фрунзе, 1985, с. 81-82.

5. ПАНКОВ П.С., ЮГАЙ С.А. Применение функционально-интервальной арифметики для построения гарантированных оценок решений дифференциальных уравнений. -В кн.: Исследования по интегродифференциальным уравнениям. Фрунзе, 1984, с.343-344.

6. MOORE R.E. Interval analysis.-N.Y.: Prentice-Hall, 1966.

7. ПАНКОВА Г.Д. Комплекс программ для доказательных вычислений на ЕС ЭВМ. - Деп. ВИНИТИ, № 2392-80.

8. ПАНКОВ П.С., ЮГАЙ С.А. Об автоматизации доказательства теорем в теории выпуклых фигур на ЭВМ. -В кн.: Математические методы в теории систем. Вып.1. Фрунзе, 1979, с.108-111.

9. ROCKNE J. Reducing the degree of an interval polynomial.- Computing, 1975, v.14, p.5-14.

10. HANSEN E.R. A generalized interval arithmetic.-In: Lecture Notes Comp.Sci., 1975, N 29, p.7-18.

11. КАМИНСКАЯ Э.Л., КАМИНСКИЙ Т.Э. Модифицированная интервальная арифметика и теория погрешностей. -В кн.: Вычислительная математика и математическая физика. -М., 1982, с. 92-105.

Поступила в ред.-изд.отд.
4 апреля 1986 года