Анатолій Яровенко, Максим Мазур, Юрій Люлько

МОДИФІКАЦІЯ ОДНОГО МЕТОДУ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ

Анотація. *В роботі представлено модифікацію класичного методу Ромберга чисельного інтегрування з підвищеною та наперед заданою точністю. Для програмної реалізації алгоритму методу розроблено кросплатформний застосунок в середовищі Microsoft VisualStudio2017 на мові C++.*

Ключові слова: *чисельний метод, інтеграл, наближене значення, похибка, залишковий член, апріорна оцінка, апостеріорна оцінка, інтерполяція, екстраполяція, порядок точності, алгебраїчна точність.*

Актуальність теми роботи полягає в тому, що при розв'язуванні широкого кола математичних, інженерних, фізичних задач виникає потреба в обчисленні визначених інтегралів, але лише в небагатьох випадках для їх обчислення можна скористатися відомою функцією Ньютона-Лейбніца оскільки клас функцій, первісна яких виражається через елементарні функції, є дуже вузьким. Крім цього, цією формулою важко і навіть практично неможливо скористатися тоді, коли підінтегральну функцію задано таблично або графічно і її аналітичний вираз невідомий а саме поняття первісної втрачає зміст а також, коли аналітичний вираз первісної досить складний і незручний для обчислень.

У цих випадках треба використовувати чисельні методи і будувати формули для наближеного обчислення визначених інтегралів.

Обчислення визначеного інтегралу застосовується в самих різноманітних задачах науки і техніки, далеко не вичерпний перелік яких наведено нижче:

– обчислення довжини дуги кривої, площ плоских фігур, площ поверхні та об'ємів тіл (в тому числі і тіл обертання), маси витисненої рідини;

– обчислення статичних моментів і центра ваги кривої;

– обчислення довжини пройденого шляху при прямолінійному русі за відомою швидкістю $v(t)$ протягом часу від моменту t_1 до t_2;

– обчислення кількості продукції виготовленої за проміжок часу $(t_0; t_1)$ при заданій залежності продуктивності праці від часу $a(t)$;

– подання коефіцієнтів тригонометричного ряду за формулами Фур'є;

– обробка результатів чисельного експерименту для збільшення їх точності і надійності;

– визначення переміщень в пружній системі (теоретична механіка) за допомогою множення епюр (інтеграл Мора).

Завдяки розвитку комп'ютерної техніки та програмування чисельні методи взагалі та методи чисельного інтегрування зокрема сьогодні стали ефективним інструментом розв'язання широкого кола задач у самих різноманітних сферах науки і техніки.

Аналіз останніх досліджень і публікацій.

Методам чисельного інтегрування присвячена велика кількість публікацій – монографій, підручників та навчально-методичних посібників, далеко не повний перелік яких наведений в списку використаних джерел.

Фундаментальні основи чисельного інтегрування детально розглянуті в працях [1-6], які, не зважаючи на рік видання, залишаються актуальними і сьогодні. Результати опрацювання та аналізу саме цих праць стали основою всіх досліджень, виконаних авторами цієї роботи, і саме на ці праці неявно посилаються автори в подальшому викладенні матеріалу свого дослідження.

Окремо слід відзначити роботу [7], яка містить огляд результатів наукових досліджень з теорії квадратур дніпровської школи і наукового семінару під керівництвом акад. М.П. Корнійчука і налічує 59 джерел.

Роботи [8-10] є найновішими публікаціями з даної теми і свідчать про продовження наукових досліджень в цьому напрямку, а отже підтверджують актуальність теми.

Об'єктом дослідження в роботі є методи чисельного інтегрування (наближеного обчислення визначених інтегралів).

Предметом дослідження є методи наближеного обчислення визначених інтегралів з підвищеною та наперед заданою точністю.

Метою роботи є модифікація методу Ромберга наближеного обчислення визначених інтегралів з підвищеною та наперед заданою точністю.

При виконанні роботи використані методи досліджень: методи системного, технічного та фундаментального аналізу; чисельні методи; методи інтерполяції та екстраполяції; методи чисельного інтегрування; методи інформаційного, математичного та комп'ютерного моделювання; методи прийняття рішень.

Виклад основного матеріалу.

Задачу обчислення визначеного інтегралу

$$I = \int_a^b f(x)dx \qquad (1)$$

Девід Каханер назвав однією з двох фундаментальних задач математичного аналізу.

Якщо функція $f(x)$ є неперервною на сегменті $[a, b]$ і відома її первісна $F(x)$, то для обчислення визначеного інтегралу (1) можна використати формулу Ньютона-Лейбніца:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) \qquad (2)$$

Однак ця формула мало придатна для практики, бо клас функцій $f(x)$, первісна яких виражається через елементарні функції є дуже вузьким. Наприклад, для інтегралів $\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$, $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$, первісну F не можна виразити в елементарних функціях. Крім цього, цією формулою важко і навіть практично неможливо скористатися тоді, коли підінтегральну функцію f задано таблично або графічно і її аналітичний вираз невідомий, а саме поняття первісної втрачає зміст, а також, коли аналітичний вираз первісної F досить складний і незручний для обчислень.

В таких випадках треба використовувати методи чисельного інтегрування – методи обчислення (як правило, наближеного) визначених інтегралів.

В загальному випадку задача обчислення визначеного інтегралу формулюється наступним чином.

Необхідно обчислити значення визначеного інтегралу

$$I = \int_a^b p(x)f(x)dx, \qquad (3)$$

де $p(x)$ – так звана вагова функція (ваговий множник), яка вбирає в себе всі особливості функції $f(x)$ на проміжку інтегрування $[a, b]$, а функція $f(x)$ – довільна достатньо гладка функція деякого класу. Без обмеження загальності але для спрощення викладення надалі вважається $p(x) \equiv 1$.

Основна ідея більшості методів чисельного інтегрування базується на використанні геометричного змісту визначеного інтегралу та закладена в самому його означенні. Виходячи з означення Рімана визначеного інтегралу як границі інтегральної суми (1.3), за наближене значення інтегралу (3) можна прийняти скінчену суму

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \tag{4}$$

де

$$\sigma = \{x_i\}_0^n : a \le x_0 \le x_1 \le \cdots \le x_n \le b \tag{5}$$

розбиття інтервалу інтегрування $[a, b]$ або сітка, A_i – сталі.

Формула (4) називається n-точковою квадратурною формулою або квадратурою, точки x_k – вузлами або абсцисами квадратурної формули, а сталі A_i – коефіцієнтами або вагами квадратурної формули.

Різниця

$$R_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \tag{6}$$

називається залишковим членом або похибкою квадратурної формули.

Сума

$$\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \tag{7}$$

називається квадратурною сумою або квадратурним правилом [3, с.170].

Квадратурні формули Ньютона–Котеса (Isaac Newton, Roger Cotes) будуються на основі інтерполяції підінтегральної функції поліномом Лагранжа степені n (відомо, що існує єдиний поліном степені $\le n$, який проходить через n+1 точку) по рівномірній сітці з n+1 вузлами, включаючи кінці інтервалу інтегрування.

Квадратурну формулу (4) можна переписати у вигляді:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx I_h = (b-a)\sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i), \tag{8}$$

де

$$H_i = \frac{1}{n}\frac{(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!}\int_0^n \frac{q^{[n+1]}}{q-i}dq \tag{9}$$

сталі, що називаються коефіцієнтами Котеса.

Формули (8)–(9) визначають сімейство квадратурних формул Ньютона–Котеса. Параметром цього сімейства є число n – степінь інтерполяційного многочлена, яким замінюється підінтегральна функція. На практиці найчастіше використовуються формули Ньютона-Котеса при n=0, 1, 2, 3. Ці формули відповідно мають назви: формула прямокутників, формула трапецій, формула Сімпсона (парабол), формула 3/8 (Ньютона).

З формул залишкових членів квадратурних формул слідує, що похибка формул лівих і правих прямокутників є величиною порядку $O(h)$. Похибки квадратурних формул середніх прямокутників і трапецій є величиною порядку $O(h^2)$, а похибка квадратурних формул Сімпсона та 3/8 (Ньютона) мають порядок $O(h^4)$.

За допомогою квадратурних формул визначений інтеграл обчислюється наближено, тобто

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx I^* + \Delta, \tag{10}$$

де I^* – наближене значення інтегралу, а Δ – загальна похибка чисельного інтегрування, яка складається з декілька видів похибок.

Таким чином, основною похибкою чисельного інтегрування є похибка вибраного методу (квадратурної формули). Обчисливши або оцінивши значення залишкового члена квадратурної формули, отримаємо апріорну оцінку похибки квадратурної формули до початку розв’язання задачі.

Ні квадратурні формули Ньютона-Котеса, ні квадратурні формули найвищої алгебраїчної міри точності (квадратури Гауса, Веддля, 3/8 Ньютона, Буля, Лобатто, Ейлера-Маклорена), в тому числі, які базуються на використанні ортогональних багаточленів (багаточлени Якобі, Лежандра, Ерміта, Лагера, Чебишева та інші) не дають розв’язку задачі обчислення визначеного інтегралу з наперед заданою точністю.

Це пов’язано з тим, що у більшості випадків оцінити залишковий член квадратурної формули дуже важко або й неможливо, наприклад тоді, коли функцію задано графічно або таблично і аналітичний вираз її невідомий, або коли функцію задано складним аналітичним виразом і її похідні важко оцінити. Але саме залишковий член квадратурної формули є апріорною оцінкою її похибки.

У зв’язку з цим широкого застосування набули методи апостеріорної оцінки похибки обчислення визначеного інтегралу і її використання для подальшого уточнення наближеного значення цього інтегралу. Найбільш поширеними є методи Карла Рунге (1856–1927), Льюіса Фрая Річардсона (1881 – 1953) та Вернера Ромберга (1909–2003).

Метод Рунге апостеріорного оцінювання похибки обчислення визначеного інтегралу називають правилом (принципом) Рунге або методом подвійного (повторного) перерахунку [1, с.144; 8, с.63]. Правило Рунге дозволяє отримати апостеріорну оцінку похибки обчислення визначеного інтегралу і використати її для подальшого уточнення наближеного значення цього інтегралу, тобто отримати більш високий порядок точності обчислень. Для застосування правила Рунге достатньо знати тільки порядок p точності наближеної формули. Друга формула Рунге дозволяє на основі відомої наближеної формули з відомим порядком точності отримати нову наближену формулу вищого порядку точності.

Таким чином, ідея методу Рунге полягає в тому, щоб організувати обчислення значення інтеграла на декількох множинах вузлів а потім порівнявши результати обчислень, отримати оцінку похибки і прийняти рішення щодо продовження чи припинення обчислень. Найпоширеніше обчислення інтеграла двічі – з кроками h та $h/2$ відповідно з кількістю вузлів n та $2n$.

Якщо $I = \int_a^b f(x)dx$ – точне значення інтеграла, I_h – його наближене значення, обчислене з кроком h, а $I_{h/2}$ – його наближене значення, обчислене з кроком $h/2$, і похибки (залишкові члени) кожної квадратурної формули із кроком h і $h/2$ можна записати відповідно у вигляді

$$R_h = Ch^p,\ R_h = C\left(\frac{h}{2}\right)^p, \tag{11}$$

де p – порядок точності формул, а константа $C\neq0$ і не залежить від h, то

$$I_{h/2} - I_h = C\left(\frac{h}{2}\right)^p - Ch^p = C\left(\frac{h}{2}\right)^p(2^p - 1) \tag{12}$$

Таким чином, отримуємо апостеріорну оцінку похибки за першою формулою Рунге:

$$\left|R_{h/2}\right| = \frac{\left|I_{h/2} - I_h\right|}{2^p - 1}. \tag{13}$$

Крім оцінки похибки за правилом Рунге можна також уточнити наближене значення інтеграла за другою формулою Рунге:

$$I^* = I_{h/2} + R_{h/2} = \frac{2^p I_{h/2} - I_h}{2^p - 1}. \tag{14}$$

Формулу (14) називають формулою екстраполяції за Річардсоном, а отримане значення інтеграла I^* – уточненим (або екстрапольованим) за Річардсоном значенням обчислювального інтеграла. Похибка уточненого значення обчислювального інтеграла має вищий порядок точності відносно h і рівна $(p+1)$.

Відзначимо, що для формул прямокутників і трапецій $\left|R_{h/2}\right| = \frac{|I_{h/2}-I_h|}{3}$, а для формули Сімпсона $\left|R_{h/2}\right| = \frac{|I_{h/2}-I_h|}{15}$.

На практиці для обчислення інтеграла $I = \int_a^b f(x)dx$ із заданою точністю ε вибирається початковий крок інтегрування h (n – відповідне число вузлів розбиття інтервалу $[a,b]$) і обчислюється наближене значення інтеграла I_h. Потім для вдвічі зменшеного кроку $h/2$ (відповідно вдвічі збільшеного числа вузлів $2n$) обчислюється наближене значення інтеграла $I_{h/2}$. Якщо $\left|R_{h/2}\right| \leq \varepsilon$, то з точністю ε покладають $I \approx I_{h/2}$ або більш точно $I \approx I^*$. В противному випадку обчислюють значення $I_{h/4}$ і перевіряють чи $\left|R_{h/4}\right| \leq \varepsilon$ і так далі.

Метод екстраполяції, відомий ще як метод локальної екстраполяції, опублікований англійським математиком Льюісом Фраєм Річардсоном ще на початку XX ст. і названий в його честь. До речі, за даними Вікіпедії японський математик Катахіро Такебе (1664–1739) відкрив метод екстраполяції Річардсона на 200 років раніше самого Річардсона. За словами Ґ. Біркхофа та Ж-К. Рота корисність методу екстраполяції Річардсона «для практичних розрахунків навряд чи можна переоцінити» (Birkhoff, Garrett; Gian-Carlo Rota Ordinary differential equations (3rd ed.). – John Wiley and sons, 1978. – ISBN 0-471-07411-X). Метод екстраполяції Річардсона є узагальненням технології повторного перерахунку за правилом Рунге і достатньо детально описаний в науковій літературі [1, с.150; 8, с.63]. Ідея цього методу полягає в багатократному зменшенні кроку інтегрування, а також в багатократному застосуванні екстраполяційної формули (2.18) для уточнення наближеного значення інтегралу.

Метод, названий в честь Вернера Ромберга (1909-2003), який опублікував метод в 1955 році в праці «Vereinfachte numerische Integration», Det Kongelige Norske Videnskabers Selskab Forhandlinger, Trondheim, 1955, 28 (7), pp. 30–36», полягає в послідовному уточненні наближеного значення інтеграла. Цей метод застосовують коли необхідно обчистити значення визначеного інтеграла із заданою або досить високою точністю.

В основі методу Ромберга лежить обчислення інтегралу за формулою трапецій на регулярній сітці з кроком h і уточнення результату за тією ж формулою з кроком $2h$. Уточнення здійснюється шляхом застосування правила Рунге та екстраполяції Річардсона. Тому цей метод в науковій літературі часто називають методом Ромберга-Рунге-Річардсона [1, с.144, 148; 8, с.103; 9]. Метод Ромберга-Рунге-Річардсона дозволяє отримувати більш високий порядок точності обчислень без значного збільшення числа операцій.

Відомо, що метод Ромберга полягає у використанні квадратурної формули трапецій та подальшого застосування правил Рунге та екстраполяції Річардсона для уточнення значення інтегралу.

Залишковий член квадратурної формули трапецій визначається за формулою

$$R_h^T(f) = \mathrm{M}_2 \frac{(b-a)h^2}{12} = \mathrm{M}_2 \frac{(b-a)^3}{12n^2}, \qquad (15)$$

де $M_2 = max|f''(\xi)|,\ \xi \in [a,b]$.

А залишковий член квадратурної формули Сімпсона – за формулою

$$R(f) = \mathrm{M}_4 \frac{(b-a)h^4}{180} = \mathrm{M}_4 \frac{(b-a)^5}{2880m^4}, \qquad (16)$$

де $M_4 = max\left|f^{(4)}(\xi)\right|, m = \frac{b-a}{2h}, \xi \in [a,b]$.

Звідси слідує, що похибка квадратурної формули трапецій є величиною порядку $O(h^2)$, а похибка квадратурної формули Сімпсона має порядок $O(h^4)$.

Відзначимо також, що квадратурна формула трапецій є точною для поліномів першого степеня, а квадратурна формула Сімпсона – для поліномів третього степеня.

Враховуючи вищезазначене логічно очікувати, що використання квадратурної формули Сімпсона для обчислення значення інтегралу з подальшим уточненням цього значення за схемою Рунге-Річардсона буде більш ефективним за відомий класичний метод Ромберга. В цьому і полягає суть пропонованого модифікованого методу чисельного інтегрування.

Нехай є результати обчислення визначеного інтеграла за квадратурною формулою Сімпсона на сітці з кроком h і на сітці х кроком kh

Тоді за уточнене значення інтегралу приймається

$$I = \int_a^b f(x)dx = I_h^C + \frac{I_h^C - I_{kh}^C}{k^2 - 1} + O(h^5). \qquad (17)$$

Оскільки для формули Сімпсона k=4, то (17) можна переписати у виді

$$I = \int_a^b f(x)dx = I_h^C + \frac{I_h^C - I_{kh}^C}{15} + O(h^5).$$

Обчислення зручно організувати за допомогою рекурентної формули.

Позначимо через

$$I_h^C(0) = \frac{b-a}{6m}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right).$$

квадратурну формулу Сімпсона з кроком $h=(b-a)/(2m)$.

Потім для кожного $j \geq 1$ визначимо $I_h^C(j) = I_h^T(f,h)$ формулу Сімпсона з кроком $h=(b-a)/(2m)^j$.

Тоді справедлива рекурентна формула:

$$I_h^C(j) = \frac{1}{3} I_h^C(j-1) \ + h\left(2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1})\right)$$

де $h=(b-a)/(2m)^{j-1}$ і $x_k=a+kh$.

Очевидно, що похибка має порядок точності $O(h_n^{2m+2})$.

Рекурентна формула (2.33) використовується для програмної реалізації. Процес обчислень завершується, коли різниця двох послідовних наближень буде менше або рівна заданій точності. Якщо підінтегральна функція задана таблично, то обчислення її інтеграла за схемою Сімпсона-Рунге-Річардсона не потребує попереднього згладжування початкових даних, так як саме інтегрування виконує часткове згладжування та «очищує» дані від «шуму».

Для реалізації алгоритму запропонованого методу чисельного інтегрування розроблено кросплатформний застосунок в середовищі Microsoft VisualStudio2017 на мові C++.

Висновки. Представлений метод чисельного інтегрування з підвищеною та наперед заданою точністю, в якому, на відміну від загальновідомого методу Ромберга, в якості базової формули використовується складена квадратурна формула Сімпсона. Результати верифікації і тестування програми підтвердили ефективність методу, його теоретичну і практичну цінність та перспективність застосування як в науково-технічних галузях, так і в навчальному процесі.

Список використаних джерел

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы: Учебное пособие для вузов. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 636 с. ISBN 978-5-94774-815-4.

2. Калиткин Н.Н. Численные методы: Учебное пособие для студентов университетов и высших технических учебных заведений / Под ред. А.А. Самарского. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 592 с. ISBN 978-5-9775-0500-0.

3. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и математическое обеспечение. М.: Мир, 2001. 575 с. ISBN 5-03-003392-0.

4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы: Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1989. 432 с. ISBN 5-02-013996-3.

5. Фельдман Л.П., Петренко А.І., Дмитрієва О.А. Чисельні методи в інформатиці. К.: Видав. група BHV, 2006. 480 с. ISBN 966-552-155-1.

6. Моторный В.П. Исследования днепропетровских математиков по оптимизации квадратурных формул. – Укр. мат. жур., 1990, т. 42, №1. – С.18-33.

7. Пирумов У.Г. Численные методы. – Studme.org, 2018. – 215 с. URL: https://studme.org/180899/mate-matika_himiya_fizik/chislennye_metody.

8. Пригарин С. М. Численный анализ: учеб. пособие. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2018. 90 с.

9. Eric Hung-Lin Liu. Fundamental Methods of Numerical Extrapolation With Applications. URL: http://web.mit.edu/ehliu/Public/Spring2006/18.304/extrapol

10. Howard R. M. Dual Taylor Series, Spline Based Function and Integral Approximation and Applications. *Math. Comput. Appl*. 2019. 24(2). С.2-40. DOI:10.3390/mca24020035.

MODIFICATION OF ONE METHOD OF NUMERICAL INTEGRATION

Abstract. *The paper presents modification classical method of Romberg numerical integration with increased and predetermined accuracy. For programmatic implementation the method algorithm was developed by cross-platform application in a Microsoft VisualStudio2017 environment in C++.*

Keywords: *numerical method, integral, approximate value, error, residual member, a priori estimation, a posteriori estimation, interpolation, extrapolation, order of accuracy, algebraic accuracy.*