

Оптимальна схема реалізації кубатурних формул для обчислення кратних інтегралів

Лазурчак І.І., Лазурчак Л.В., Мельник М.Б.

email: informatyka@drohobych.net

кафедра інформатики та обчислювальної математики

Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка,
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100

У статті розглядаються оптимізаційні алгоритми для реалізації кубатурної формули Симпсона із застосуванням принципу подвійного перерахунку при обчисленні багатократних інтегралів. Приводиться порівняння запропонованого алгоритму з вбудованими засобами комп'ютерної математики на тестовому прикладі обчислення інтегралів Френеля. Розширені функціональні можливості використання СКМ *Mathematica* та *Maple*.

Ключові слова: алгоритм, кубатурні формули, оптимізація обчислень, принцип подвійного перерахунку, системи комп'ютерної математики.

ВСТУП

Оптимізація процесу обчислень є однією з ключових проблем сучасного інформаційного суспільства. При цьому основними факторами є не тільки економія оперативної пам'яті ПК, а й оптимізація процесорного часу за рахунок суттєвого зменшення кількості арифметико-логічних операцій, оптимізації необхідної оперативної пам'яті, навантаження адресних шин, обмін із зовнішніми периферійними пристроями тощо.

Аналіз останніх досліджень та публікацій показав, що теоретичний розробці класичних чисельних методів інтегрування та їх модифікацій присвячено багато робіт [1]-[3]. Зокрема, у роботі [2] розглядаються підходи, пов'язані з принципом подвійного та кратного перерахунку при застосуванні квадратурних формул Ньютона-Котеса. В роботі [3] продемонстровані перші спроби оптимізації квадратурних, але, на жаль, вони не були узагальнені для багатократних інтегралів.

Мета статті якраз і полягає у виправленні цього недоліку, а також у розробці оптимізаційної схеми та структурограми представлення алгоритму для подальшої програмної реалізації незалежно від комп'ютерної платформи, а також операційного та програмного середовища.

ОПИС МОДЕЛІ, ОБ'ЄКТІВ ТА МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

При застосуванні функціонально-дискретного (*FD*-) методу для розв'язування крайової задачі у випадку рівнянь еліптичного типу [4] виникає проблема обчислення багатократного інтегралу. Обмежимося двовимірним випадком, в зв'язку з чим розглянемо задачу Діріхле для рівняння Гельмгольца виду

$$\Delta u(\vec{x}) - q(\vec{x})u(\vec{x}) = -f(\vec{x}), \quad \vec{x} = (x_1, x_2) \in \Omega, \quad (1)$$

$$u(\vec{x}) = 0, \quad \vec{x} \in \tilde{\Gamma},$$

де $\Omega = \{(x_1, x_2) : 0 < x_i < 1, i = 1, 2\}$ – одиничний квадрат з межею Γ ;

$$\Delta \equiv \Delta_{x_1, x_2} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \quad \text{— оператор Лапласа.}$$

Надалі для спрощення викладок значок вектора " $\vec{x}$ " будемо опускати.

Згідно ідеї *FD*-методу розв'язок задачі (1) може бути отриманий через розв'язок більш загальної задачі вигляду

$$\Delta U(x, \lambda) - \omega(x, \lambda)U(x, \lambda) = -f(x), \quad (2)$$

$$x \in \Omega, \quad U(x, \lambda)|_{x \in \tilde{\Gamma}} = 0, \quad \lambda \in [0, 1],$$

де $\omega(x, \lambda) = \bar{q}(x) + \lambda[q(x) - \bar{q}(x)]$, а $\bar{q}(x)$ – деяка кусково-стала функція, що апроксимує $q(x)$ знизу, тобто $q(x) \geq \bar{q}(x), \forall x \in \Omega$.

Очевидно, що розв'язок задачі (1) тотожний розв'язку задачі (2) при $\lambda = 1$, тобто $u(x) \equiv U(x, 1)$. Тоді шуканий розв'язок задачі (1) можна представити як розклад в ряд Тейлора функції $U(x, \lambda)$ в околі точки $\lambda = 0$, тобто

$$U(x, 1) = U(x, 0) + \frac{\partial U(x, 0)}{\partial \lambda} + \dots + \frac{1}{p!} \frac{\partial^p U(x, 0)}{\partial \lambda^p} + r_{p+1}(x), \quad (3)$$

де $r_{p+1}(x)$ – залишковий член, виражений в інтегральній формі.

Спочатку розглянемо питання про функціональне наближення (рядом Вольтерра) функції Гріна для двомірного рівняння Гельмгольца, тобто функції $G(x_1, \xi_1, x_2, \xi_2, q(\cdot, \cdot))$, що є розв'язком крайової задачі

$$\begin{aligned} \{\Delta - q(x_1, x_2)\}G(x_1, \xi_1, x_2, \xi_2, q(\cdot, \cdot)) &= \\ &= -\delta(x_1 - \xi_1)\delta(x_2 - \xi_2), \quad x \in \Omega, \\ G(x_1, \xi_1, x_2, \xi_2, q(\cdot, \cdot)) &= 0, \quad x \in \Gamma, \end{aligned}$$

де $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Введемо позначення

$$\tilde{q}(x) = q(x) - \bar{q}(x) \quad (4)$$

та представимо наближення p -рангу через

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_{\Omega} \{G(x, \xi, \bar{q}(\cdot)) + \\ &+ \sum_{n=1}^p (-1)^n \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \prod_{i=1}^{n+1} G(z^{i-1}, z^i, \bar{q}(\cdot)) \times \\ &\times \prod_{i=1}^n \tilde{q}(z^i) dz^1 \dots dz^n\} f(\xi) d\xi, \quad p = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5)$$

На підставі твердження роботи [4] справедлива наступна теорема.

Теорема. Нехай $q(x) \in L_2(\Omega)$, причому $q(x) \geq \bar{q}(x) \geq 0$ і

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2^{3/2}} \|\tilde{q}\|_{0,2,\Omega} = \\ &= \frac{1}{2^{3/2}} \sqrt{\int_0^1 \int_0^1 [q(z_1, z_2) - \bar{q}(z_1, z_2)]^2 dz_1 dz_2} < 1. \end{aligned} \quad (6)$$

Тоді для розв'язку задачі (1) матиме місце двостороння оцінка

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \prod_{i=1}^{2p+1} G(z^{i-1}, z^i, \bar{q}(\cdot)) \prod_{i=1}^{2p} \tilde{q}(z^i) dz^1 \dots dz^{2p} f^-(\xi) d\xi \\ \leq u(x) - u(x) \leq \\ \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \prod_{i=1}^{2p+1} G(z^{i-1}, z^i, \bar{q}(\cdot)) \prod_{i=1}^{2p} \tilde{q}(z^i) dz^1 \dots dz^{2p} f^+(\xi) d\xi, \end{aligned} \quad (7)$$

де введені позначення

$$z^0 = x, z^{2p+1} = \xi, f^- = \frac{f - |f|}{2}, f^+ = \frac{f + |f|}{2}.$$

Крім цього буде мати місце оцінка

$$\begin{aligned} \left| (x) - u(x) - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \prod_{i=1}^{2p+1} G(z^{i-1}, z^i, \bar{q}(\cdot)) \times \right. \\ \left. \times \prod_{i=1}^{2p} \tilde{q}(z^i) dz^1 \dots dz^{2p} f(\xi) d\xi \right| \leq \frac{1}{2^{5/2}} \alpha^{2p} \|f\|_{0,2,\Omega}. \end{aligned} \quad (8)$$

Якщо $q(x)$, $f(x)$ належать класу функцій, який дозволяє точно обчислювати наближення $u(x)$ (в цьому випадку FD – метод точно реалізується), то за допомогою засобів комп'ютерної математики *Mathematica* та *Maple* [5] можна ефективно знаходити двосторонні аналітичні наближення. У протилежному випадку для оцінки норм $\|\tilde{q}\|_{0,2,\Omega}$ з (6) та $\|f\|_{0,2,\Omega}$ з (8) в просторі Лебега $L_2(\Omega)$ треба обчислити відповідні подвійні інтеграли Рімана. Для цього застосовують або ж кубатурні формули Ньютона-Котеса, Гауса, або ж інформаційно-статистичні методи типу Монте-Карло. При цьому для апостеріорної оцінки похибки застосовують принцип подвійного перерахунку, який, в свою чергу, вимагає на кожному кроці збільшення в 4 рази об'єму обчислювальних затрат.

У роботі запропоновано алгоритм, який оптимальним чином (без повторного перерахунку в раніш обчислених точках схеми) проводить обчислення за кубатурною формулою Симпсона, починаючи з найменш можливого розбиття. При цьому, в процесі реалізації одразу проводиться оцінка точності обчисленого подвійного інтегралу.

Наведемо короткі викладки для реалізації економічної схеми у випадку квадратурної формули Симпсона.

Для представлення наближеного значення інтеграла на всьому проміжку його попередньо ділять на парну кількість інтервалів $n = 2m$, після чого на кожній парі сусідніх інтервалів роблять заміну підінтегральної функції інтерполяційним поліномом Лагранжа другого порядку (квадратичною параболою)

$$\begin{aligned} \int_a^b y(x) dx &= \int_{x_0}^{x_2} y(x) dx + \dots + \int_{x_{2m-2}}^{x_{2m}} y(x) dx \approx \\ &\approx \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2 + \dots + y_{2m-2} + 4y_{2m-1} + y_{2m}) = \\ &= \frac{h}{3} (\sigma_0 + 4\sigma_1 + 2\sigma_2), \end{aligned}$$

де прийняті позначення

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= (y_0 + y_{2m}), \quad \sigma_1 = \sum_{i=1}^m y_{2i-1}, \quad \sigma_2 = \sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}, \\ y_i &= y(x_i), \quad x_i = a + ih, \quad h = \frac{b-a}{2m}, \quad i = 0, \dots, 2m. \end{aligned}$$

Так як у формулах для σ_1 і σ_2 беруть участь різна кількість внутрішніх вузлів (непарних та парних), то використання одного циклу для одночасного обчислення цих сум вимагає окремого виділення останнього доданку в сумі σ_1 .

Узагальнена формула Симпсона дає наближення величини порядку малості

$$R(h) = \underline{O}(h^4).$$

Звідси можна зробити висновок, що вказана формула є точною для всіх підінтегральних функцій, які представляють собою алгебраїчні поліноми не менше третього степеня.

Серед квадратурних формул дещо вищих порядків точності можна назвати формулу "3/8". Проте її порядок точності також становить величину порядку малості $\underline{O}(h^4)$.

Далі із збільшенням кількості вузлів n інтерполяційної многочлена порядок точності квадратурних формул Ньютона-Котеса зростає через одиницю, тобто залишковий член складає величину порядку $\underline{O}\left(h^{\left[\frac{2n+1}{2}\right]}\right)$, а

тому на сьогоднішній день однією з найефективніших квадратурних формул, побудованих на рівномірній сітці, якраз є формула Симпсона [1].

Економічний алгоритм обчислення за квадратурною формулою Симпсона полягає в наступному.

Вдвічі збільшуючи розмірність сітки та застосовуючи вказану формулу і принцип подвійного перерахунку, ми отримаємо в нових позначеннях

$$\begin{aligned} I_{\text{old}} &= \frac{h}{3} [\sigma_0 + 4\sigma_1 + 2\sigma_2] = \\ &= \frac{h}{3} [\sigma_0 + 2\sigma_1 + 2\sigma_1 + 2\sigma_2] = \\ &= \frac{h}{3} [\sigma_0 + 2\sigma_1 + 2\sigma_3], \quad \sigma_3 = 2\sigma_1 + 2\sigma_2, \\ I_{\text{new}} &= \frac{h}{2 \cdot 3} (\sigma_0 + 2\tilde{\sigma}_1 + 2\tilde{\sigma}_3), \\ \tilde{\sigma}_3 &= \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2, \quad \tilde{\sigma}_2 = \sigma_3. \end{aligned}$$

Так як сума значень функцій у вузлах з парними індексами для нової нумерації повністю співпадає з сумою всіх значень функції у внутрішніх вузлах старої сітки, то для реалізації принципу подвійного перерахунку достатньо обчислити значення функції і їх суми тільки у непарних вузлах нової сітки.

У загальному випадку на k -ітерації ($k=0, 1, 2, \dots$) розрахункові формули набудуть вигляд

$$\begin{aligned} I_k &= \frac{h_k}{3} [\sigma_0 + 2\sigma_1^{(k)} + 2\sigma_3^{(k)}], \quad h_k = \frac{b-a}{2^{k+1}n}, \quad n \in \mathbb{N}^+, \\ \sigma_0 &= [f(a) + f(b)], \quad \sigma_1^{(k)} = \sum_{i=1}^{2^k} f(a + (2i-1)h_k), \\ \sigma_2^{(k)} &= \begin{cases} \sum_{i=1}^{n-1} f(a + 2i h_k), & k=0, \\ \sigma_3^{(k-1)}, & k>1, \end{cases} \quad \sigma_3^{(k)} = \sigma_1^{(k)} + \sigma_2^{(k)}. \end{aligned}$$

Тепер розглянемо двовимірний простір R^2 . Якщо область інтегрування представляє собою, наприклад, прямокутник, то обчислення подвійного інтегралу зводиться до обчислення повторного інтегралу. Це фактично означає послідовне використання квадратурних формул спочатку по одній просторовій змінній x , а потім по другій – y . При цьому порядок слідування змінних інтегрування немає значення.

$$\begin{aligned} \iint_D f(x, y) dx dy &= \int_a^b dx \int_c^d f(x, y) dy, \\ D &= \{(x, y), \quad a \leq x \leq b, \quad c \leq y \leq d\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Якщо ж область інтегрування G довільна, але обмежена і замкнута, то її можна включити як підобласть до деякої класичної плоскої фігури, до визначити підінтегральну функцію в $G \setminus D$ нульовими значеннями і застосувати раніше описаний підхід.

Так, послідовно продовжуючи розбиття по змінній x , зафіксувавши при цьому лише два інтервали по змінній y , ми отримаємо

таку таблицю коефіцієнтів кубатурної формули

1	4	2	4	2	4	...	1
4	16	8	16	8	16	...	4
1	4	2	4	2	4	...	1

Продовжуючи після цього розширення розбиття по змінній y , отримаємо симетричну матрицю коефіцієнтів

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 & 4 & \dots & 4 & 1 \\ 4 & 16 & 8 & 16 & \dots & 16 & 4 \\ 2 & 8 & 4 & 8 & \dots & 8 & 2 \\ \text{-----} & & & & & & \\ 4 & 16 & 8 & 16 & \dots & 16 & 4 \\ 1 & 4 & 2 & 4 & \dots & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Тоді обчислення подвійного інтегралу можна звести до повторного інтегралу, а узагальнена кубатурна формула Симпсона прийме вигляд

$$\iint_D f(x, y) dx dy = \sum_{i=0}^{2n} \sum_{j=0}^{2m} A_{ij} f(x_i, y_j), \quad (11)$$

де прийняті позначення

$$\begin{aligned} f_{ij} &= f(x_i, y_j), \quad x_i = a + ih_1, \quad y_j = c + jh_2, \\ h_1 &= \frac{b-a}{2n}, \quad h_2 = \frac{d-c}{2m}, \\ i &= 0, \dots, 2n, \quad j = 0, \dots, 2m. \end{aligned} \quad (12)$$

Застосуємо до кубатурної формули Симпсона принцип подвійного перерахунку.

Запишемо формулу (11) у вигляді:

$$\begin{aligned} \iint_D f(x, y) dx dy &= \\ &= \frac{h_1 h_2}{9} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m-1} \left[(f_{2i,2j} + f_{2i+2,2j} + f_{2i+2,2j+2} + f_{2i,2j+2}) + \right. \\ &\quad \left. + 4(f_{2i+1,2j} + f_{2i+2,2j+1} + f_{2i+1,2j+2} + f_{2i,2j+1}) + 16f_{2i+1,2j+1} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Розглянемо ці формули при початкових значеннях $n_0 = 2$, $m_0 = 2$ і представимо їх у вигляді окремих сум:

$$I_0 = \frac{h_1^{(0)} h_2^{(0)}}{9} [\sigma_0^{(0)} + \sigma_1^{(0)} + 4\sigma_2^{(0)} + 16\sigma_3^{(0)}], \quad (14)$$

де

$$\sigma_0^{(0)} = f_{0,0}^{(0)} + f_{0,4}^{(0)} + f_{4,0}^{(0)} + f_{4,4}^{(0)}, \quad (15)$$

$$\sigma_1^{(0)} = 2[f_{0,2}^{(0)} + f_{2,0}^{(0)} + f_{2,4}^{(0)} + f_{4,2}^{(0)}] + 4f_{2,2}^{(0)}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \sigma_2^{(0)} &= f_{0,1}^{(0)} + f_{1,0}^{(0)} + f_{1,4}^{(0)} + f_{4,1}^{(0)} + f_{0,3}^{(0)} + f_{3,0}^{(0)} + \\ &+ f_{3,4}^{(0)} + f_{4,3}^{(0)} + 2[f_{1,2}^{(0)} + f_{2,1}^{(0)} + f_{2,3}^{(0)} + f_{3,2}^{(0)}], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\sigma_3^{(0)} = f_{1,1}^{(0)} + f_{1,3}^{(0)} + f_{3,1}^{(0)} + f_{3,3}^{(0)}. \quad (18)$$

Тут верхній індекс відповідає початковій нумерації решітки (гратки) (див. рис.1).

Застосуємо далі принцип подвійного перерахунку, для чого подвоїмо значення $n = 2n_0$ та $m = 2m_0$. Формули (13)-(14) набудуть вигляд:

$$I_1 = \frac{h_1^{(1)} h_2^{(1)}}{9} [\sigma_0^{(1)} + \sigma_1^{(1)} + 4\sigma_2^{(1)} + 16\sigma_3^{(1)}], \quad (19)$$

де

$$\sigma_0^{(1)} = f_{0,0}^{(1)} + f_{0,8}^{(1)} + f_{8,0}^{(1)} + f_{8,8}^{(1)}. \quad (20)$$

Суми у вузлах з парними індексами матимуть вигляд

$$\begin{aligned} \sigma_1^{(1)} &= 2[f_{0,2}^{(1)} + f_{0,4}^{(1)} + f_{0,6}^{(1)} + f_{2,0}^{(1)} + f_{4,0}^{(1)} + f_{6,0}^{(1)} + \\ &+ f_{2,8}^{(1)} + f_{4,8}^{(1)} + f_{6,8}^{(1)} + f_{8,2}^{(1)} + f_{8,4}^{(1)} + f_{8,6}^{(1)}] + \\ &+ 4[f_{2,2}^{(1)} + f_{2,4}^{(1)} + f_{2,6}^{(1)} + f_{4,2}^{(1)} + f_{4,4}^{(1)} + \\ &+ f_{4,6}^{(1)} + f_{6,2}^{(1)} + f_{6,4}^{(1)} + f_{6,6}^{(1)}]. \end{aligned} \quad (21)$$

Суми у вузлах з непарними індексами матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_2^{(1)} &= f_{0,1}^{(1)} + f_{0,3}^{(1)} + f_{0,5}^{(1)} + f_{0,7}^{(1)} + \\ &+ f_{1,0}^{(1)} + f_{1,8}^{(1)} + f_{3,0}^{(1)} + f_{3,8}^{(1)} + f_{5,0}^{(1)} + f_{5,8}^{(1)} + \\ &+ f_{7,0}^{(1)} + f_{7,8}^{(1)} + f_{8,1}^{(1)} + f_{8,3}^{(1)} + f_{8,5}^{(1)} + f_{8,7}^{(1)} + \\ &+ 2[f_{1,2}^{(1)} + f_{1,4}^{(1)} + f_{1,6}^{(1)} + f_{2,1}^{(1)} + f_{2,3}^{(1)} + \\ &+ f_{2,5}^{(1)} + f_{2,7}^{(1)} + f_{3,2}^{(1)} + f_{3,4}^{(1)} + f_{3,6}^{(1)} + \\ &+ f_{4,1}^{(1)} + f_{4,3}^{(1)} + f_{4,5}^{(1)} + f_{4,7}^{(1)} + f_{5,2}^{(1)} + f_{5,4}^{(1)} + \\ &+ f_{5,6}^{(1)} + f_{6,1}^{(1)} + f_{6,3}^{(1)} + f_{6,5}^{(1)} + f_{6,7}^{(1)} + \\ &+ f_{7,2}^{(1)} + f_{7,4}^{(1)} + f_{7,6}^{(1)}], \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \sigma_3^{(1)} &= f_{1,1}^{(1)} + f_{1,3}^{(1)} + f_{1,5}^{(1)} + f_{1,7}^{(1)} + \\ &+ f_{3,1}^{(1)} + f_{3,3}^{(1)} + f_{3,5}^{(1)} + f_{3,7}^{(1)} + \\ &+ f_{5,1}^{(1)} + f_{5,3}^{(1)} + f_{5,7}^{(1)} + \\ &+ f_{7,1}^{(1)} + f_{7,3}^{(1)} + f_{7,5}^{(1)} + f_{7,7}^{(1)}. \end{aligned} \quad (23)$$

У формулах (19)-(23) кроки інтегрування будуть вдвічі зменшені

$$h_1^{(1)} = \frac{h_1^{(0)}}{2} = \frac{b-a}{2n}, \quad h_2^{(1)} = \frac{h_2^{(0)}}{2} = \frac{d-c}{2m},$$

а вузли інтегрування перераховуються відповідно до формул

$$\begin{aligned} x_i^{(1)} &= a + ih_1^{(1)}, \quad y_j^{(1)} = c + jh_2^{(1)}, \\ i &= 0, \dots, 2n, \quad j = 0, \dots, 2m. \end{aligned} \quad (24)$$

Розрахункова схема оптимізаційного підходу для двократних інтегралів відповідає матричній гратці (рис.1)

Тут коефіцієнти кубатурних формул (14)-(18) представлені у кружках в лівій (верхній) частині, а коефіцієнти для формул (19)-(23),

що відповідають подвійному перерахунку, відображені у кружках в правій (нижній) частині та у квадратах. Можна одразу відзначити, що суми (15) та (20) – еквівалентні, так як в них фігурують

значення функції $f(x_i, y_j)$ у вершинах прямокутної області, тобто

$$f_{0,0}^{(0)} = f_{0,0}^{(1)}, f_{0,4}^{(0)} = f_{0,4}^{(1)}, f_{4,0}^{(0)} = f_{4,0}^{(1)}, f_{4,4}^{(0)} = f_{4,4}^{(1)}.$$

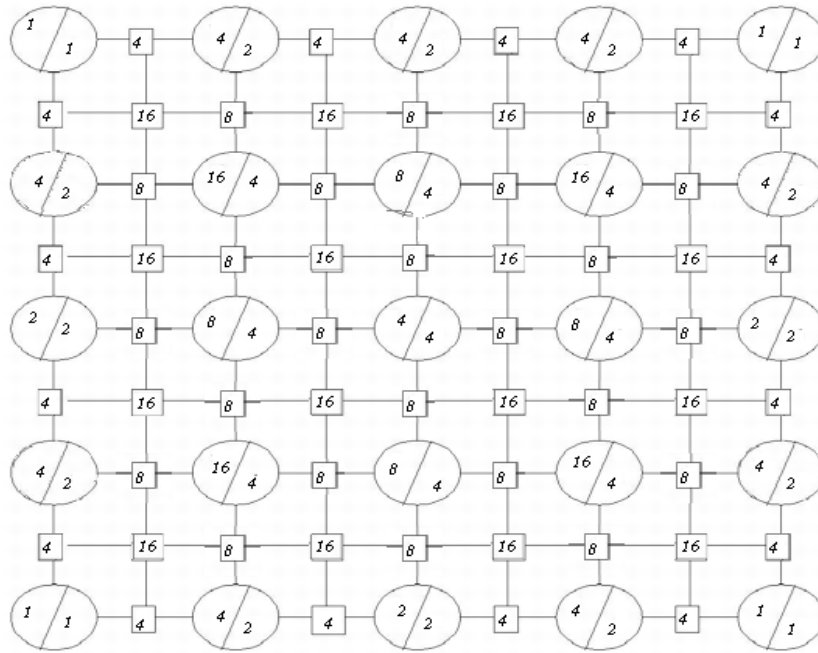


Рисунок 1. Матрична ґратка з коефіцієнтами (в кружках – для розбиття $n_0, m_0 = 2$; в квадратах – для розбиття $n, m = 4$).

Перегруповуючи доданки в (21), отримуємо

$$\begin{aligned} \sigma_1^{(1)} = & \left\{ 2 \left[f_{0,4}^{(1)} + f_{4,0}^{(1)} + f_{4,8}^{(1)} + f_{8,4}^{(1)} \right] + 4 f_{4,4}^{(1)} \right\} + \\ & + 2 \left\{ f_{0,2}^{(1)} + f_{2,8}^{(1)} + f_{2,0}^{(1)} + f_{8,2}^{(1)} + f_{0,6}^{(1)} + f_{6,0}^{(1)} + f_{6,8}^{(1)} + f_{8,6}^{(1)} + \right. \\ & \left. + 2 \left[f_{2,4}^{(1)} + f_{4,2}^{(1)} + f_{4,6}^{(1)} + f_{6,4}^{(1)} \right] \right\} + \\ & + 4 \left\{ f_{2,2}^{(1)} + f_{2,6}^{(1)} + f_{6,2}^{(1)} + f_{6,6}^{(1)} \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Для вузлів, що мають парні індекси в новій нумерації, мають місце співвідношення

$$f_{0,4}^{(1)} = f_{0,2}^{(0)}, f_{4,0}^{(1)} = f_{2,0}^{(0)}, f_{4,8}^{(1)} = f_{2,4}^{(0)}, f_{8,4}^{(1)} = f_{4,2}^{(0)}, f_{4,4}^{(1)} = f_{2,2}^{(0)},$$

тоді вираз в перших фігурних дужках (25) повністю відповідає формулі (16). Аналогічно, в силу справедливості співвідношень

$$\begin{aligned} f_{0,2}^{(1)} &= f_{0,1}^{(0)}, f_{2,8}^{(1)} = f_{1,4}^{(0)}, f_{2,0}^{(1)} = f_{1,0}^{(0)}, f_{8,2}^{(1)} = f_{4,1}^{(0)}, \\ f_{0,6}^{(1)} &= f_{0,3}^{(0)}, f_{6,0}^{(1)} = f_{3,0}^{(0)}, f_{6,8}^{(1)} = f_{3,4}^{(0)}, f_{8,6}^{(1)} = f_{4,3}^{(0)}, \\ f_{2,4}^{(1)} &= f_{1,2}^{(0)}, f_{4,2}^{(1)} = f_{2,1}^{(0)}, f_{4,6}^{(1)} = f_{2,3}^{(0)}, f_{6,4}^{(1)} = f_{3,2}^{(0)}, \end{aligned}$$

вираз в других фігурних дужках (25) повністю відповідає формулі (17). І співвідношення

$$f_{2,2}^{(1)} = f_{1,1}^{(0)}, f_{2,6}^{(1)} = f_{1,3}^{(0)}, f_{6,2}^{(1)} = f_{3,1}^{(0)}, f_{6,6}^{(1)} = f_{3,3}^{(0)}$$

дають підстави для співставлення виразу у третіх фігурних дужках з формулою (18).

Таким чином, на наступній ітерації при подвійному перерахунку значення суми $\sigma_1^{(1)}$ можна не обчислювати за формулою (25), а

одразу встановлювати її значення згідно рекурентного виразу

$$\sigma_1^{(1)} = \sigma_1^{(0)} + 2\sigma_2^{(0)} + 4\sigma_3^{(0)}. \quad (26)$$

Це обумовлено тим, що значення підінтегральної функції, які відповідають вузлам, позначених кружками, перераховувати немає потреби. Достатньо лише зафіксувати їх суми відповідно до (26) і відтворювати ці значення з коефіцієнтами, вказаними у правій (нижній) частині.

Значення функції у нових вузлах з непарними індексами, що відповідають квадратам на рис.1, і, відповідно, формулам (22), (23) потрібно підраховувати на кожному кроці подвійного перерахунку.

Введемо нове позначення:

$$\sigma_4^{(k)} = \sigma_1^{(k)} + 2\sigma_2^{(k)} + 4\sigma_3^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (27)$$

Тоді для пари формул (14), (19) можна використати наступне представлення

$$I_k = \frac{h_1^{(k)} h_2^{(k)}}{9} \left[\sigma_0^{(k)} + 2\sigma_2^{(k)} + 12\sigma_3^{(k)} + \sigma_4^{(k)} \right], \quad (28)$$

$$f_{i,j}^{(k)} = f(x_i^{(k)}, y_j^{(k)}), \quad x_i^{(k)} = a + i h_1^{(k)}, \quad y_j^{(k)} = c + j h_2^{(k)},$$

$$h_1^{(k)} = \frac{b-a}{2n}, \quad h_2^{(k)} = \frac{d-c}{2m}, \quad n = 2^k n_0, \quad m = 2^k m_0,$$

$$i = 0, \dots, 2n, \quad j = 0, \dots, 2m.$$

У загальному випадку у вершинах прямокутника значення підінтегральної функції будуть обчислюватись за формулою

$$\sigma_0^{(k)} = f_{0,0}^{(k)} + f_{0,2m}^{(k)} + f_{2n,0}^{(k)} + f_{2n,2m}^{(k)} \quad (29)$$

Суми для значень вказаної функції на межі сітки та у внутрішніх вузлах набудуть такого вигляду:

$$\sigma_1^{(k)} = 2S_1^1 + 4S_1^2, \quad (30)$$

де

$$\begin{aligned} S_1^1 &= \sum_{i=1}^{n-1} f_{2i,0}^{(k)} + \sum_{j=1}^{m-1} f_{0,2j}^{(k)} + \sum_{i=1}^{n-1} f_{2i,2m}^{(k)} + \sum_{j=1}^{m-1} f_{2n,2j}^{(k)} = \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} (f_{2i,0}^{(k)} + f_{2i,2m}^{(k)}) + \sum_{j=1}^{m-1} (f_{0,2j}^{(k)} + f_{2n,2j}^{(k)}), \quad (31) \\ S_1^2 &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{m-1} f_{2i,2j}^{(k)}. \end{aligned}$$

Сума у вузлах з одним непарним індексом матиме вигляд

$$\sigma_2^{(k)} = S_2^1 + 2(S_2^2 + S_2^3), \quad (32)$$

де

$$\begin{aligned} S_2^1 &= \sum_{i=0}^{n-1} f_{2i+1,0}^{(k)} + \sum_{j=0}^{m-1} f_{0,2j+1}^{(k)} + \sum_{i=0}^{n-1} f_{2i+1,2m}^{(k)} + \\ &+ \sum_{j=0}^{m-1} f_{2n,2j+1}^{(k)} = \sum_{i=0}^{n-1} (f_{2i+1,0}^{(k)} + f_{2i+1,2m}^{(k)}) + \\ &+ \sum_{j=0}^{m-1} (f_{0,2j+1}^{(k)} + f_{2n,2j+1}^{(k)}), \quad (33) \\ S_2^2 &= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=1}^{m-1} f_{2i+1,2j}^{(k)}, \quad (34) \\ S_2^3 &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=0}^{m-1} f_{2i,2j+1}^{(k)} \end{aligned}$$

відповідно, з двома непарними індексами –

$$\sigma_3^{(k)} = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m-1} f_{2i+1,2j+1}^{(k)}. \quad (35)$$

Отже, узагальнена кубатурна формула Симпсона, з урахуванням методу подвійного перерахунку, буде мати вигляд (28), а її компоненти обчислюватись за формулами (29)–(35). Значення $\sigma_1^{(k)}$, що входить до виразу (26), лише на нульовій ітерації обчислюється згідно (16), а в решта випадків визначається за розгалуженим виразом

$$\sigma_1^{(k)} = \begin{cases} 2[f_{0,2}^{(0)} + f_{2,0}^{(0)} + f_{2,4}^{(0)} + f_{4,2}^{(0)}] + 4f_{2,2}^{(0)}, & k=0, \\ \sigma_4^{(k-1)}, & k>0 \end{cases}$$

Останнє рекурентне співвідношення забезпечує оптимізацію процесу обчислень, пов'язану з необхідністю проведення обчислень при подвійному перерахунку лише в частині вузлів ґратки.

Для апостеріорної оцінки точності обчис-

леного подвійного інтегралу використовують співвідношення

$$|I_k - I_{k-1}| < \varepsilon, \quad k=1, 2, \dots$$

Приклад. Обчислити подвійний інтеграл

$$\iint_D \sin[\pi(x^2 + y^2)] dx dy. \quad (36)$$

$D = \{(x, y), 0 \leq x, y \leq 1\}$ – одиничний квадрат.

Підінтегральна функція представляє собою поверхню, зображену на рис.2

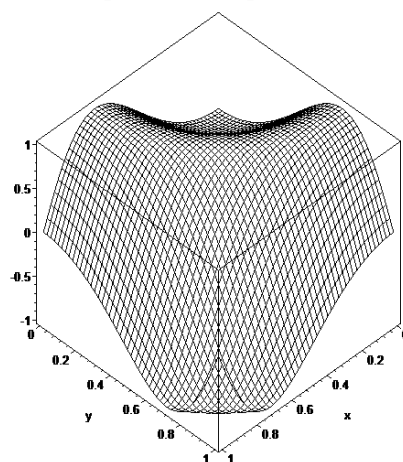


Рисунок 2. Графік функції $f(x, y) = \sin[\pi(x^2 + y^2)]$

Точний розв'язок можна представити через інтеграли Френеля [6]

$$S(x) = \int_0^x \sin\left(\frac{\pi t^2}{2}\right) dt = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2n+1} \frac{(-1)^n x^{4n+3}}{(4n+3)(2n+1)!}, \quad (37)$$

$$C(x) = \int_0^x \cos\left(\frac{\pi t^2}{2}\right) dt = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2n} \frac{(-1)^n x^{4n+1}}{(4n+1)(2n)!}.$$

Тоді точне значення інтегралу (36) обчислюється за формулою

$$I_T = S(\sqrt{2}) \cdot C(\sqrt{2}) = 0.377613903139.$$

Обчислення проводились в системі комп'ютерної математики (СКМ) *Maple 17* із використанням процедур *FrenelS(x)*, *FrenelC(x)* при встановленні системної змінної *Digits:=24*. Зауважимо, що визначення інтегралу Френеля в [6] відрізняється від вбудованих в ядро СКМ *Maple* та *Mathematica* функцій (37) з точністю до константи.

Результати розроблених модифікацій кубатурної формули Симпсона при різних значеннях розбиття області інтегрування приведені в табл.1

Таблиця 1. Кубатурна формула Симпсона

k	$n=m$:	$I^{(k)}$	$I_T - I^{(k)}$
0	16	0.377615532247	0.163 E-5
1	32	0.377614004370	0.101 E-6
2	64	0.377613909457	0.632 E-8
3	128	0.377613903534	0.395 E-9
4	256	0.377613903164	0.247 E-10
5	512	0.377613893141	0.154 E-11

Таблиця 2. Метод Монте-Карло

N	I_N
512	0.32042469
1024	0.35421124
2048	0.36126166
4096	0.37362189
8192	0.37293736
16384	0.37339162

Похибка методу Монте-Карло визначається похибкою генерації псевдовипадкової послідовності чисел, згенерованих на ПК, та обсягом вибірки. Вона може бути оцінена із співвідношення

$$\delta = \frac{1}{2\sqrt{N(1-P)}},$$

де P – гарантована ймовірність влучання похибки в інтервал $[-\delta, \delta]$. Ця похибка є порядку $O(N^{-1})$ і значно більша, ніж у розглянутих детермінованих методах. Крім цього, для двократного інтегралу необхідно використовувати два генератори рівномірно розподілених випадкових чисел в діапазоні $(0,1)$, що загалом не забезпечує достатньо малої похибки та оптимальних обчислювальних затрат на протизагу модифікованим формулам Симпсона з оптимізаційною реалізацією принципу подвійного перерахунку.

Слід зауважити, що для великих значень n, m використання значення системної змінної “за замовчуванням” ($Digits:=10$), спричинює похибку округлення, що впливає не лише на втрату точності на 8-й значущій цифрі мантиси, а й веде до зміни знаку відхилення наближеного розв’язку від точного.

ВИСНОВКИ

На основі розроблених програмних модулів і чисельних розрахунків показані переваги запропонованого підходу порівняно з класичними схемами в сенсі значного зменшен-

ня обчислювальних витрат: процесорного часу, оперативної пам’яті, похибки округлення.

Зауважимо, що використаний для якісного порівняння метод Монте-Карло, може давати дещо кращі результати в порівнянні з приведеними формулами. Але це буде значно помітно лише для багатократних інтегралів (починаючи з потрійних), при великій вибірці і використанні досконального генератора випадкових чисел, приєднаного до програмно-технічного комплексу як фізичний пристрій-адаптер. Проте слід зауважити, що це буде вимагати потужних обчислювальних ресурсів, особливо машинного часу CPU.

Сформульована проблема узагальнення методу подвійного перерахунку на випадок багатократних інтегралів може бути вирішена при застосуванні вище викладеного алгоритму. Разом з методом подвійного перерахунку цей підхід пропонується застосовувати для практичних обчислень, а також використовувати в курсах “Чисельні методи”, “Символьні обчислення та комп’ютерна алгебра” тощо, які викладаються на більшості природничих спеціальностях ВНЗ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Гаврилюк І.П. Методи обчислень: підручник у 2 част. / І.П. Гаврилюк, В.Л. Макаров – К.: Вища школа, 1995. – Ч.2. – 431 с.
- [2] Вейцблїт О.Й. Метод кратного перерахунку / О.Й. Вейцблїт // Інформаційні технології в освіті. – 2011. – № 7. – С. 50–60.
- [3] Лазурчак І.І. Численная реализация квадратурной формулы Симпсона с автоматическим выбором шага / І.І. Лазурчак, Ю.М. Галь – К., 1989. – 12 с. Деп. в УкрНПНТІ, 1989, №17, У-89.
- [4] Лазурчак І.І. Двухсторонний FD-метод решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца / І.І. Лазурчак, В.Л. Макаров // “Дифференц. уравнения”. – 1999. – Т.35. – № 3. – С. 388 - 395.
- [5] Лазурчак І.І. Системи комп’ютерної математики: навчальний посібник / І.І. Лазурчак, Т.П. Кобильник. – Дрогобич: Коло, 2013. – 256 с.
- [6] Янке Е. Специальные функции / Е. Янке, Ф.Эмде, Ф.Лёш. – М.: Наука, – 1977. – 342 с.
- [7] Биндер К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. / К. Биндер, Д.В. Хеерман. - М.: Физматлит, - 1995. - 144 с.