KFKI-71-7

Kötél Gyula

ELJÁRÁSOK EGY- ÉS TÖBBVÁLTOZÓS FÜGGVÉNYEK KÖZELITŐ INTEGRÁLÁSÁRA

Hungarian Academy of Sciences

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS

BUDAPEST

KFKI-71-7

ELJÁRÁSOK EGY- ÉS TÖBBVÁLTOZÓS FÜGGVÉNYEK KÖZELITŐ INTEGRÁLÁSÁRA

Irta
Kötél Gyula
Központi Fizikai Kutató Intézet
Számitástechnikai Osztály

1. Bevezetés

${}^{b}\int_{a} f(x)dx$ kiszámitására közelitő módszereket alkalmazunk, ha az analizis pontos módszerei nem vezetnek célhoz, vagy munkaigényesebbek a közelitő módszereknél. Itt három, elektronikus számológépre programozott, numerikus eljárás ismertetése a célunk. Ennek érdekében az alkalmazott numerikus kvadraturákról is rövid áttekintést adunk. Továbbá, többszörös integrálok kiszámitásához ismertetjük a szukcessziv integráción alapuló rekurziv eljáráshivást.

Megállapitásainkat példákkal is illusztráljuk.

2. Numerikus kvadraturák. Mechanikus kvadratura.

Legyen adva az $[a,b]$ intervallum $x_k^{(m)}$ csomópontjainak és az $A_k^{(m)}$ együtthatóknak mátrixa ($m=1,2,\ldots;\ k=0,1,2,\ldots,m$). Ekkor az $[a,b]$ szakaszon értelmezett minden $f(x)$ függvényhez megalkotható a

$$Q_m(f) = \sum_{k=0}^{m} A_k^{(m)} f\left(x_k^{m}\right) \qquad /2.1/$$

kifejezés. Az ilyen alaku formulákat mechanikus kvadratura-formuláknak nevezzük.

$\lim_{m\to\infty} Q_m(f) = {}^{b}\int_{a} f(x)dx$ esetén azt mondjuk, hogy az $f(x)$ függvényre a fenti mátrixokhoz tartozó kvadratura-eljárás konvergál. Az integrált Q-val közelitjük:

$${}^{b}\int_{a} f(x)dx = Q_m(f) + E\ .$$

A numerikus kvadratura problémája ugy meghatározni az $x_k^{(m)}$ csomópontokat és $A_k^{(m)}$ együtthatókat, hogy a közelitő formula eleget tegyen bizonyos előirt követelményeknek /pl. bizonyos előirt pontosságot érjen el/.

Ha az $f(x_k)$ függvényértékek helyett azok f_k közelitéseivel számolunk, akkor hibát követünk el, amelyet Q öröklött hibájának nevezünk.

Ha az f_k közelitések közös hibakorlátja δf, akkor

$$\sum_k |A_k| \delta f$$

az öröklött hibának pontos korlátja.

2.1. Interpolációs kvadratura-képletek. Newton-Cotes kvadratura-formulák. Összetett formulák.

Az $f(x)$ függvény Lagrange-féle interpolációs polinomjainak integrálásával /2.1/ alaku formulákhoz jutunk. Nevezzük ezeket - származtatásuknál fogva - interpolációs kvadratura-képleteknek.

Rögzitsük a csomópontokat. A legfeljebb m-ed foku polinomokra pontos, az

$$x_k^{(m)} = a + kh_m \quad \left(h_m = \frac{b-a}{m}\ ;\ k=0,1,2,\dots,m\right) \qquad /2.2/$$

ekvidisztans alappontokhoz tartozó kvadratura-formulákat Newton-Cotes féle formuláknak nevezzük. Ezek interpolációs kvadratura-formulák. Olymódon is származtathatók, hogy az $f(x)$ függvényt a /2.2/ alappontokhoz tartozó Lagrange-féle interpolációs polinomjaival közelitjük, s ezeket integráljuk.

Páros m-re a pontosság még $m+1$-ed foku polinomokra is elérhető.

Az $m=1$-nek megfelelő

$$Q_1(f) = (b-a)\left[\frac{1}{2}\, f(a) + \frac{1}{2}\, f(b)\right].$$

Newton-Cotes formula trapéz-formula, az $m=2$-nek megfelelő

$$Q_2(f) = (b-a)\left[\frac{1}{6}\, f(a) + \frac{4}{6}\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{6}\, f(b)\right]$$

pedig Simpson-formula néven ismeretes.

Magas rendszámu Newton-Cotes formulák használata nem előnyös. Növekvő m esetén egyre nehezebb $E=E_m$-re korlátot adni, sőt bizonyos egészfüggvények kivételével nem is tudunk. $\lim\limits_{m\to\infty} \sum\limits_{k=0}^{m} |A_k^{(m)}| = +\infty$ miatt az öröklött hiba nagy lehet. Az is bebizonyitható, hogy vannak olyan folytonos $f(x)$ függvények, amelyekre $Q_m(f)$ nem konvergál $\int_a^b f(x)dx$-hez.

A fenti nehézségek elkerülése végett a rendszám növelése helyett más módszerhez folyamodunk. m-et rögzitjük, s az $[a,b]$ intervallumot részintervallumokra bontjuk.

A részintervallumokon képezett kvadratura-formulák összegezésével un. összetett kvadratura-képleteket nyerünk. E módszer hatékonysága onnan ered, hogy a Newton-Cotes formulák E hibája az intervallum valamilyen hatványával arányos.

$m=1$-re N részintervallum esetén előáll a

$$T_N = h_N \left[\frac{1}{2} f_o + \sum_{k=1}^{N-1} f_k + \frac{1}{2} f_N \right]$$

trapéz-szabály, $m=2$-re, páros N-re $N/2$ részintervallum esetén pedig az

$$S_N = \frac{h_N}{3} \left[f_o + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \ldots + 4f_{N-3} + 2f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N \right]$$

Simpson-szabály $(h_N = \frac{b-a}{N}\,;\ f_k = f(a+kh_N);\ k=0,1,2,\ldots,N)$. A maradék-tag /hiba/ kétszer, illetve négyszer folytonosan differenciálható $f(x)$ esetén

$$E_{\text{trapéz}} = -\frac{b-a}{12} h_N^2 f''(\xi)$$

$$(a < \xi < b) \qquad /2.3/$$

$$E_{\text{Simpson}} = -\frac{b-a}{180} h_N^2 f^{IV}(\xi)$$

A trapéz és Simpson kvadratura-eljárásokra $\lim_{N\to\infty} Q_N(f) = {}^b\!\int_a f(x)dx$ minden Riemann-integrálható $f(x)$ függvény esetében. Ha $f(x)$ korlátosan differenciálható, akkor integráljának közelitő értéke /2.3/ alapján előirt pontossággal meghatározható.

Természetesen, magasabb rendszámu összetett Newton-Cotes formulákhoz is eljuthatunk. Az alacsony rendszámu formulák azonban a kerekitési hibák alakulása szempontjából kedvezőbbek.

2.2. Javitott formulák. Richardson-féle extrapoláció. Romberg módszere.

Tegyük fel, hogy ${}^b\!\int_a f(x)dx$ közelitésére két különböző N_1 - és N_2-vel alkalmazunk valamilyen kvadraturát, és ezekből - az intervallum ujabb felosztása nélkül - határozunk meg egy harmadik közelitő formulát annak reményében, hogy esetleg még jobb közelitést kapunk. Az olyan eljárásokat, amelyeknél két közelitő eredményt egy harmadik kiszámitására használunk fel, Richardson-féle extrapolációnak nevezzük.

Számitástechnikai szempontból célszerü az $N_2 = 2N_1$ választás, mert igy minden olyan abszcissza, amely az első kvadraturához kellett, a másodiknál is felhasználható.

A módszer egymásutáni alkalmazásához tehát az $[a,b]$ intervallum szukcessziv felezésével kapott abszcisszák felvétele, az $N=2^n$ $(n=0,1,2,\ldots)$ választás a legalkalmasabb.

A Richardson-féle extrapoláció képezi alapját Romberg módszerének.

Induljunk ki az $[a,b]$ intervallum 2^n egyenlő részre történő felosztásához tartozó

$$T_{0,n}=h_n \left\{ \sum_{k=0}^{2^n} f_k^{(n)} - \frac{1}{2}\left[f(a)+f(b)\right]\right\}$$

trapéz-formulából, ahol

$$h_n=\frac{b-a}{2^n}\ ;\ x_k^{(n)}=a+kh_n\ ;\ f_k^{(n)}=f\left(x_k{}^n\right)\ ;$$

$$(n=0,1,2,\ldots;\ k=0,1,2,\ldots,2^n)\ ,$$

s a $T_{m-1,n-1}$, $T_{m-1,n}$ elemekből képezzük a

$$T_{m,n}=\frac{2^{2m}\,T_{m-1,n}-T_{m-1,n-1}}{2^{2m}-1} \qquad (m=1,2,\ldots,n)$$

elemeket.

Az igy definiált háromszög-mátrix átlós elemeire (m-oszlopindex, n-sorindex) Riemann-integrálható $f(x)$ függvény esetében $\lim\limits_{n\to\infty} T_{n,n}={}^b\!\int_a f(x)dx$. Analitikus függvényekre a konvergencia gyorsasága is ismert. Megmutatható, hogy az

$${}^b\!\int_a f(x)dx = T_{m,n}+R_{m,n}$$

Romberg-integráció maradék-tagja (m=n-re felirva)

$$R_{n,n}=(-1)^{n+1}\,\frac{2^{n(n+1)}}{(2n+2)!}\,B_{2n+2}(b-a)f^{(2n+2)}(\xi)h_n^{2n+2}\ ,$$

ahol $n=0,1,2,\ldots$-re B_{2n+2} a Bernoulli-féle számokat jelöli, és $a<\xi<b$.

A $T_{m,n}$ közelitő összegek háromszög-mátrixának /T séma/ az $[a,b]$ intervallum egy felosztása által meghatározott sorában az átló felé haladva, az extrapolációk utján előállitott elemek $\int_a^b f(x)dx$ egyre jobb közelitései.

h_n	konv. rend / $n \backslash m$	$O(h_n^2)$	$O(h_n^4)$	$O(h_n^6)$	$O(h_n^8)$	$O(h_n^{10})$	.		
h_n	n	0	1	2	3	4	.	.	.
$b-a$	0	$T_{0,0}$						.	
$\frac{b-a}{2}$	1	$T_{0,1}$	$T_{1,1}$					.	
$\frac{b-a}{4}$	2	$T_{0,2}$	$T_{1,2}$	$T_{2,2}$				.	
$\frac{b-a}{8}$	3	$T_{0,3}$	$T_{1,3}$	$T_{2,3}$	$T_{3,3}$			.	
$\frac{b-a}{16}$	4	$T_{0,4}$	$T_{1,4}$	$T_{2,4}$	$T_{3,4}$	$T_{4,4}$		.	
.	.							.	
.	.	.	.	.	.	.	.	.	
.	.								

- T séma -

A mátrix $m=0,1,2$ sorszámu oszlopaiban Newton-Cotes-féle közelitő összegek állnak: trapéz-, Simpson- és negyedrendü Newton-Cotes formulák. A Romberg-féle közelitő összegek a magasabbrendü Newton-Cotes formuláktól már eltérnek.

A T séma elemei természetesen felirhatók a

$$T_{m,n} = h_n \cdot \sum_{k=0}^{2^n} c_k^{(m,n)} f_k^{(n)} = \sum_{k=0}^{2^n} d_k^{(m,n)} \cdot f_k^{(n)}$$

alakban. Itt a $c_k^{(m,n)}$ sulyok mind pozitivok, nem ugy, mint a Newton-Cotes formuláknál.

Megmutatható, hogy $\sum_{k=0}^{2^n} d_k^{(m,n)} = b-a$, amiből következik, hogy a $T_{m,n}$ közelitő összegek öröklött hibája mindig ugy számolható, mint a trapéz-formula esetében: $(b-a)\delta f$, ahol δf az f_k közelitések közös hibakorlátja.

3. Egyváltozós függvény határozott integráljának kiszámitása. Algoritmusok, eljárások.

Az alábbiakban három hatékony algoritmust, önleosztó ALGOL nyelvü eljárást mutatunk be $\int_a^b f(x)dx$ kiszámitására. Mindhárom algoritmus alapját fentebb ismertetett kvadratura képezi. Az első kettő a trapéz-formulából kiinduló Romberg-integráció, a harmadik pedig a Simpson-eljárás egy adaptiv változata.

Bizonyos esetekben célszerü lehet az integrál részekre bontása, s az egyes részintegrálokra esetleg más-más kvadratura alkalmazása. Részintegrálokra hibabecslést is könnyebben végezhetünk. Azokkal az egyszerü algoritmusokkal szemben, amelyek közvetlenül magára az eredeti $\int_a^b f(x)dx$-re alkalmaznak egyszerü vagy összetett kvadraturát, adaptivnak nevezzük azokat az algoritmusokat, amelyek az $\int_{a_i}^{b_i} f(x)dx$ részintegrálokra alkalmaznak kvadraturát, s a már megfelelő pontossággal kiszámitott részintegrálokat összegezik ($\int_a^b f(x)dx = \sum_i \int_{a_i}^{b_i} f(x)dx$).

Az eljárást önleosztónak mondjuk, ha a részintervallumokra bontást, a felosztás finomitását /az alappontok megválasztását/ - a függvény viselkedésének megfelelően - automatikusan elvégzi.

Mindhárom eljárás elkészült a KFKI Programkönyvtár számára ICT 1900 ALGOL gépi reprezentációban. Az első kettő lényegében ugyanazon algoritmus paraméter-listában eltérő két változata. Beépithetők ALGOL programokba forrásnyelvi szinten, de a könyvtár-szalag SRA3 szubrutin-blokkjából "algol" eljárástörzsüként s/c formában is.

3.1. A romberg eljárás

A romberg nevü függvényeljárás - Romberg módszere alapján - előirt ε hibakorlátnál nem nagyobb relativ hibával határozza meg $\int_a^b f(x)dx$ közelitő értékét.

Az intervallum egy-egy ujabb felosztását szukcessziv felezéssel automatikusan elvégzi. A hibát két egymásutáni felosztáshoz tartozó közelitő összeg eltéréséből becsüli. 2n+2-szer korlátosan differenciálható f(x)-re ui. bizonyos n-től kezdve $|T_{n,n} - T_{n-1}|/|T_{n,n}|$ megfelelő becslése $|R_{n,n}|/|T_{n,n}|$-nek.

Az integrál kiszámitását az eljárás az alábbi két esetben tekinti befejezettnek:

a/ az eredmény relativ hibája nem nagyobb, mint az előirt hibakorlát,

b/ az [a,b] intervallum felosztásánál a felezések száma elér egy megadott korlátot.

Eljárásfej, paraméterek

```
real procedure romberg (fct,lgr,rgr,eps,ord,p);
value lgr,rgr,eps,ord;
integer ord;
real lgr,rgr,eps,p;
real procedure fct;
```

Bemeneti paraméterek

fct	függvényeljárás, mely az f(x) integrandust generálja. Az eljárásfej alakja: real procedure fct(x); real x; ahol a bemenő paraméter: x a függvény független változója
lgr	az integrációs intervallum kezdőpontja
rgr	az integrációs intervallum végpontja
eps	az integrál közelitő értékére adott relativ hibakorlát
ord	a felezések számának felső korlátja; ord $\geq$ 2 .

Kimeneti paraméterek /eredmények/

romberg	az integrál közelitő értéke
p	az integrál közelitő értékének tényleges relativ hibája /az eljárás az eredményt akkor adja eps-nél nem nagyobb p relativ hibával, ha ord - az előirt eps-nek megfelelően - elegendő nagy./

Az eljárás ICT 1900 ALGOL gépi reprezentációban:

```
'real''procedure'romberg(fct,lgr,rgr,eps,ord,p);
'value' lgr,rgr,eps,ord;
'real' lgr,rgr,eps,p;
'integer' ord;
'real''procedure' fct;
'begin' 'real' 'array' t[1:ord+1];
'real' f,l,q,u,m;
'integer' h,j,n;
l:=rgr-lgr;
t[1]:=(fct(lgr)+fct(rgr))/2;
n:=1;
'for' h:=1 'step' 1 'until' ord 'do'
'begin' u:=0;
m:=l/(2*n);
'for' j:=1 'step' 2 'until' 2*n-1 'do'
u:=u+fct(lgr+j*m);
t[h+1]:=(u/n+t[h])/2;
f:=1;
'for' j:=h 'step' -1 'until' 1 'do'
'begin' f:=4*f;
t[j]:=t[j+1]+(t[j+1]-t[j])/(f-1)
'end';
n:=2*n;
'if' h#1 'then'
'begin' p:=abs((q-t[1])/t[1]);
'if' p<eps 'then' 'goto' cl
'end';
q:=t[1]
'end';

cl: romberg:=t[1]*l
```

3.2. A rombergl eljárás

A rombergl nevü függvényeljárás Romberg módszere alapján előirt hibakorlátnál nem nagyobb relativ hibával határozza meg $\int_a^b f(x)dx$ közelitő értékét. Az intervallum egy-egy ujabb felosztását szukcesszív felezéssel automatikusan elvégzi. A képlethibát két egymásutáni felosztáshoz tartozó közelitő összeg eltéréséből becsüli.

Az integrál kiszámitását az eljárás az alábbi két esetben tekinti befejezettnek:

a/ az eredmény relativ hibája nem nagyobb, mint az előirt hibakorlát

b/ az [a,b] intervallum felosztásánál a felezések száma elér egy megadott korlátot.

Eljárásfej, paraméterek

```
real procedure rombergl (a,b,x,f,eps,ord,delta);
value a,b,eps,ord;
integer ord;
real a,b,x,f,eps,delta;
```

Bemeneti paraméterek

a	az integrációs intervallum kezdőpontja
b	az integrációs intervallum végpontja
x	az integrációs változó
f	az integrandus értéke
eps	az integrál közelitő értékére előirt relativ hibakorlát
ord	a felezések számának felső korlátja

Kimeneti paraméterek /eredmények/

az integrál közelitő értékén kivül még

delta	az integrál közelitő értékének tényleges relativ hibája

Az eljárás ICT 1900 ALGOL gépi reprezentációban:

```
'real''procedure' romberg1(a,b,x,f,eps,ord,delta);
'value' a,b,eps,ord;
'integer' ord;  'real' a,b,x,f,eps,delta;
'begin''real' s,sum,error,f0,I1,I2;
'integer' j,k,p;
'array' t[1:ord+1];
s:=b-a;
x:=a;  I1:=f;  x:=b;
t[1]:=(I1+f)*s/2;  I1:=0;
'for' k:=1 'step' 1 'until' ord 'do'
'begin' sum:=error:=0;
s:=s/2;  p:=2↑k;
'for' j:=p-1 'step' -2 'until' 1 'do'
'begin' x:=j/p;
x:=x*a+(1-x)*b;
f0:=f;  I2:=sum+f0; error:=error+
('if' abs(f0)>abs(sum) 'then'(sum-(I2-f0))
 'else'(f0-(I2-sum)));
sum:=I2
'end';
I2:=t[k+1]:=t[k]/2+(I2+error)*s;
p:=1;
'for' j:=k 'step' -1 'until' 1 'do'
'begin' p:=4*p;
I2:=t[j]:=(I2*p-t[j])/(p-1)
'end';
delta:=abs((I2-I1)/I2);
'if' delta 'le' eps 'then' 'goto' finis;
I1:=I2
'end';
finis: romberg1:=I2
'end' romberg1;
```

3.3. A simpson eljárás

A simpson nevü függvényeljárás előirt ε hibakorlátnál nem nagyobb δ relativ hibával szolgáltatja az integrál közelitő értékét. Az eljárás adaptiv, és minden részintegrált Simpson-formulával közelit.

Az $[a,b]$ intervallumból kiindulva, azt az $[a_i,b_i]$ részintervallumot, amelyre az integrálás történik, három egyenlő hosszuságu $[a_{i_j},b_{i_j}]$ részintervallumra bontja /j=1,2,3/, s felezőpontok közbeiktatásával képezi az

$$S_i^{(1)}=(b_i-a_i)\left[\frac{1}{6}f(a_i)+\frac{4}{6}f\left(\frac{a_i+b_i}{2}\right)+\frac{1}{6}f(b_i)\right]$$

egyszerü és az

$$S_i^{(2)}=\sum_{j=1}^{3}S_{i_j}^{(1)}=\frac{b_i-a_i}{3}\sum_{j=1}^{3}\left[\frac{1}{6}f(a_{i_j})+\frac{4}{6}f\left(\frac{a_{i_j}+b_{i_j}}{2}\right)+\frac{1}{6}f(b_{i_j})\right]$$

összetett Simpson-formulákat. $\int_{a_i}^{b_i}f(x)dx$-et $S_i^{(2)}$ közeliti. $S_i^{(2)}$ hibáját $|S_i^{(2)}-S_i^{(1)}|$-ből becsüljük. Mivel a mindenkor rendelkezésünkre álló $\sum_{ij}|S_{ij}|$ az $\int_a^b|f(x)|dx$ közelitése, $S_i^{(2)}$-höz hozzárendelhetjük az $|S_i^{(2)}-S_i^{(1)}|/\sum_{ij}|S_{ij}^{(1)}|$ hibatagot, amelyre az eljárás az adott ε-ból kiindulva felső korlátot állapit meg olymódon, hogy a hibatagok $\delta=\sum_i|S_i^{(2)}-S_i^{(1)}|/\sum_{ij}|S_{ij}^{(1)}|$ összege az $\int_a^b f(x)dx$ -et közelitő érték relativ hibájának megfelelő becslése legyen. A gyakorlat azt mutatta, hogy a legtöbb feladat esetében ezek a hibakorlátok megfelelnek. Ismert integrálokat közelitő értékek értékes jegyeinek alakulásából leolvasható, hogy δ inkább tulzott becslése a hibának. Ez főleg az eljárás adaptiv jellegével függ össze.

Egy részintegrál kiszámitását az eljárás az alábbi két esetben tekinti befejezettnek, s tér át a jobbról szomszédos részintervallumon való integrálásra:

a/ a részintegrál közelitő értékére eső hibatag nem nagyobb, mint az előirt ε hibakorlát megfelelő hányada

b/ a részintervallum hossza $\leq \frac{b-a}{3^{ord}}$, ahol ord előre megadható.

Ellenkező esetben i szerepét i_j /j=1,2,3/ veszi át, s a fentiek ismétlődnek. Az eljárás - a/ vagy b/ miatt - szomszédos részintervallumok illesztésével, egymásba skatulyázott részitervallumokon át egyszer végetér. A részintervallumokra bontást, a felosztás finomitását csak a kritikus szakaszokon hajtja végre /ott, ahol a megfelelő pontosságot még nem sikerült elérni/, s a nem-adaptiv eljárásokkal szemben csak itt számit ujabb függvényértékeket. Az eljárás automatikusan levágja a "rossz" szakaszokat, s e részintegrálokat külön kezeli. Előnyösen használható "szakaszonként rosszul viselkedő" függvények, s bizonyos fajta szingularitással biró függvények integrálására. Természetesen, időigényesebb a nem-adaptiv eljárásoknál.

Eljárásfej, paraméterek

```
real procedure simpson (f,a,b,eps,ord,delta);
value a,b,eps,ord;
integer ord;
real a,b,eps,delta;
real procedure f;
```

Bemeneti paraméterek

f függvényeljárás, mely az f(x) integrandust generálja

Az eljárásfej alakja

```
real procedure f(x);
real x;
```

ahol a bemeneti paraméter:

x a függvény független változója

a	az integrációs intervallum kezdőpontja
b	az integrációs intervallum végpontja
eps	az integrál közelitő értékére előirt relativ hibakorlát
ord	felső korlát részintervallumok egymásbaskatulyázottságának mélységére; ord $\leq$ 2.

Kimeneti paraméterek /eredmények/

simpson	az integrál közelitő értéke
delta	az integrál közelitő értékének tényleges relativ hibája

Az eljárás ICT 1900 ALGOL gépi reprezentációban:

```
'real' 'procedure'simpson (f,a,b,eps,ord,delta);
'value' a,b,eps,ord;
'integer' ord; 'real' a,b,eps,delta; 'real''procedure' f;
'begin' 'integer' lvl;
        'real' d,ab,est,fa,fm,fb,da,sx,est1,sum,f1;
        'integer' 'array' rtrn[ord];
        'real' 'array' dx,epsp,x2,x3,f2,f3,f4,fmp,fbp,
               est2,est3[ord],pval,del[1:ord,1:3];
        'switch' return:=r1,r2,r3;
        lvl:=0; ab:=est:=1.0; da:=b-a;
        fa: f(a); fm:=4.0*f((a+b)/2.0); fb:=f(b);
recur:  lvl:=lvl+1; dx[lvl]:=da/3.0;
        sx:=dx[lvl]/6.0; f1:=4.0*f(a+dx[lvl]/2.0);
        x2[lvl]:=a+dx[lvl]; f2[lvl]:=f(x2[lvl]);
        x3[lvl]:=x2[lvl]+dx[lvl];  f3[lvl]:=f(x3[lvl]);
        epsp[lvl]:=eps; f4[lvl]:=4.0*f(x3[lvl]+dx[lvl]/2.0);
          fmp[lvl]:=fm; est1:=(fa+f1+f2[lvl])*sx;
        fbp[lvl]:=fb; est2[lvl]:=(f2[lvl]+f3[lvl]+fm)*sx;
                      est3[lvl]:=(f3[lvl]+f4[lvl]+fb)*sx;
        sum:=est+est2[lvl]+est3[lvl];
        ab:=ab-abs(est)+abs(est1)+abs(est2[lvl])+abs(est3[lvl]);
        d:=abs(est-sum);
        'if'(d'le'epsp[lvl]*ab)'and'(est#1.0)'or'(lvl 'ge'ord)
        'then'
        'begin' up:lvl:=lvl-;
              pval[lvl,rtrn[lvl]]:=sum;
              del[lvl,rtrn[lvl]]:=d;
              'goto' return[rtrn[lvl]]
        'end';
        rtrn[lvl]:=1; da:=dx[lvl]; fm:=f;
        fb:=f2[lvl]; eps:=epsp[lvl]/.7;
        est:=est1;
```

```
    'goto' recur; r1:
   rtrn[lvl]:=2; da:=dx[lvl]; fa:=f2[lvl];
    fm:=fmp[lvl]; fb:=f3[lvl]; eps:=epsp[lvl]/1.7;
    est:=est2[lvl]; a:=x2[lvl];
    'goto' recur; r2:
    rtrn[lvl]:=3; da:=dx[lvl]; fa:=f3[lvl];
    fm:=f4[lvl]; fb:=fbp[lvl];
    eps:=epsp[lvl]/1.7;
    est:=est3[lvl]; a:=x3[lvl];
    'goto' recur; r3:
    sum:=pval[lvl,]+pval[lvl,2]+pval[lvl,3];
    d:=del[lvl,]+del[lvl,2]+del[lvl,3];
     'if' lvl>1 'then' 'goto' up;
    simpson:=sum;  delta:=d/abs(sum);
'end' simpson;
```

4. Többszörös integrálok kiszámitása szukcessziv integrációval. Rekurziv eljáráshivás.

Ismeretes, hogy ha $g(x) = {}^{d}\int_{c} f(x,y)\,dy$ integrálható $[a,b]$-ben, akkor

$$\iint_{(N)} f(x,y)\,dxdy = {}^{b}\int_{a}\left({}^{d}\int_{c} f(x,y)\,dy\right)dx \quad ,$$

ahol N a sik egy $\begin{cases} a \le x \le b \\ c \le y \le d \end{cases}$ négyszög- vagy $\begin{cases} a \le x \le b \\ c(x) \le y \le d(x) \end{cases}$

normáltartománya. Négyszög esetén az integrálások sorrendje fel is cserélhető.

Hasonlóképpen az egyes változók szerinti szukcessziv integrálással határozható meg az $f(x_1,x_2,\dots,x_n)$ függvény integrálja az n-dimenziós euklidesi tér egy normáltartományán.

Ha az egyes integrálokra numerikus kvadraturát alkalmazunk, akkor eljuthatunk a többszörös integrál közelitő összegeihez /az eredeti integrációs tartomány csomópontjaihoz tartozó formulák/, pl. egy kettős integrál kubaturájához. Természetesen ez csupán egy lehetséges eljárás. Mi itt csak ezzel foglalkozunk. Sőt, nem is adunk meg explicite ilyen formulákat, ui. egyváltozós integrátor rekurziv hivásával automatikusan előállnak.

Egyváltozós integrálközelitő összeget kétféle hiba terhel: a kvadratura maradéktagjával kifejezett képlethiba és a függvényértékek hibájából származó un. öröklött hiba.

A $Q_n = \sum_k d_k . f_k$ közelitő összeg relativ képlethibáját $|Q_n - Q_{n-1}|/|Q_n|$ becsüli. Az f_k függvényértékek relativ hibakorlátjai közül a maximális pedig relativ hibakorlát Q_n öröklött hibájára, ami következik abból a tételből, hogy a tagok relativ hibakorlátjai közül a legnagyobb az összegnek is relativ hibakorlátja.

Szukcessziv integráció esetén tehát egy belső integrál képlethibája a rákövetkező külső integrálnak öröklött hibája lesz.

Összefoglalva, többszörös integrálokat olymódon fogunk kiszámitani, hogy egy-egy változó szerint egymás után integrálunk, miközben a többi változót rögzitjük. Az egyes integrálok képlethibáira ugy irunk elő relativ hibakorlátokat, hogy az eredeti integrált előirt pontossággal kapjuk. A továbbiakban mindenegyes integrálra Romberg-féle kvadraturát alkalmazunk.

A közvetlenül egyváltozós függvény integrálására szolgáló rombergl eljárás a 3.2. pont alatt ismertetett eljárásfejjel ellátva, alkalmas arra, hogy rekurziv hivásával többszörös integrálok közelitő értékét meghatározzuk. Azzal ui., hogy az integrációs változót felvettük a paraméter-listára, továbbá, hogy az integrándust real procedure helyett real-nak specifikáltuk, lehetőségünk nyilt egy változó szerint integrálni, az összes többit fixen tartva.

A romberg eljárás tehát csak egyváltozós, a rombergl eljárás viszont többváltozós függvények integrálására is alkalmas. Azzal, hogy mindkét - ugyanazon kvadraturán alapuló - eljárást bemutattuk, fenti fejtegetéseinket akartuk kézzelfoghatóbbá tenni.

Két példát mutatunk itt a rombergl eljárás aktivizálására; mindkettőt egy programtöredék illusztrálja.

4.1. Egyváltozós függvény integrálása

Számitsuk ki $\int_{1.2}^{4.8} \frac{1}{x^5+3}\,dx$-et 10^{-5}-nél nem nagyobb relativ hibával.

```
.
.
.
'real' x, delta, I;
I := rombergl(1.2,4.8,x,1/(x ↑ 5+3),1.0 &-5,12,delta);
.
.
.
vagy
.
.
.
'real' x, delta, I;
'real' 'procedure' f(x);
'real' x;
'begin'
f:=1/(x↑ 5+3);
'end' f;
I:=rombergl(1.2,4.8,x,f(x), 1.0 &-5,12,delta);
.
.
```

4.2. Többváltozós függvény integrálása egyváltozós függvényeljárás rekurziv hivásával

Határozzuk meg az $f(x,y)= x^2+xy + 1$ függvény kettős integrálját az $y=x$ egyenes és az $y=x^2$ parabola által határolt tartományra két értékes jeggyel.

.

.

```
'real' delta,I;
'array' x[1:2];
'real' 'procedure' f(x);
'array' x;
'begin'
f:=x[1]*(x[1]+x[2])+1;
'end' f;
I:= romberg1(0,1,x[1], romberg1(x[1]↑2,x[1],x[2],f(x),1.0 &-4, 12,
        delta2), 1.0 &-3,8 delta1);
```

.

.

.

A belső integrál képlethibája, ami a külsőnek öröklött hibája, nem lesz nagyobb, mint 10^{-4}. A külső integrál képlethibájára 10^{-3}-t előirva, elmondhatjuk, hogy az eredmény relativ hibája 10^{-3} nagyságrendü.

A romberg1 eljárás rekurziv hivása itt direkt kubatura-eljárást helyettesit.

5. Példák, numerikus eredmények

Mindegyik eljárás kipróbálásra került a KFKI ICT 1905-ös számológépére irt ALGOL programból.

A Romberg-integráció:

$$\int_a^b f(x)dx = T_{m,n} + R_{m,n}$$

$$\left(h_n = \frac{b-a}{2^n};\ n = 0,1,2,\ldots,ord;\ m = 0,1,2,\ldots,n\right).$$

A $\delta^{o} = |R_{n,n}|/|T_{n,n}|$ relativ hiba becslése $\delta = |T_{n,n}-T_{n-1,n-1}|/|T_{n,n}|$.

A Simpson-féle adaptiv integráció:

$$\int_a^b f(x)dx = S_n + E_n$$

$$\left(h_n = \frac{b-a}{6^n}\ ;\quad n = 0,1,2,\ldots,\ \text{ord}\right).$$

Itt S_n részintegrálok közelitéseinek összege. S_n δ^{o} relativ hibájának becslését δ-val jelöljük. Az alábbi feladatok esetében többnyire ugy jártunk el, hogy ε relativ pontosságot előirva, kiirattuk az S_n közelitő értékeket, amig csak nem teljesült a $\delta(=\delta_n) \leq \varepsilon$ reláció. Általában több jegyet irtunk, mint amennyit δ "értékesként" megenged. Ezt azért tettük, hogy a hibabecslésre is megfigyeléseket végezhessünk /pl. δ_n esetleg tulzott/. Ismert integrál esetén összehasonlitást tehetünk a közelitő érték értékes jegyei, a maradéktag /ha megadható és korlátos/, valamint az eljárás hibabecslése között. A rombergl eljárás alkalmazására példaként kettős és hármas integrálokat hozunk.

5.1. Példák a romberg eljárás alkalmazására

5.1.1. $\int_{-6.4}^{+6.4} \text{ch } x\, dx = 601.8433764\ldots$ /Filippi példája/

n	h_n	$T_{0,n}$	$T_{1,n}$	$T_{2,n}$	$T_{3,n}$
0	12.8	3851.			
1	6.4	1932.	1292.		
2	3.2	1044.	748.	712.	
3	1.6	725.	618.	609.	608.
4	0.8	633.	603.	602.	601.9
5	0.4	609.	601.9	601.848	601.844
6	0.2	603.	601.848	601.8434561	601.8433811

n	$T_{4,n}$	$T_{5,n}$	$T_{6,n}$
4	601.942		
5	601.8438723	601.8437757	
6	601.8433773	601.8433768	601.8433767

n	$R_{0,n}$	$R_{1,n}$	$R_{2,n}$	$R_{3,n}$
0	3250			
1	1330.	691.		
2	442.	147.	111.	
3	123.	16.	8.	
4	32.	1.	0.2	0.1
5	8.	0.08	0.005	0.0009
6	2.	0.005	0.00008	0.00005

n	$R_{4,n}$	$R_{5,n}$	$R_{6,n}$
4	0.099		
5	0.005	0.0004	
6	0.000009	0.0000004	0.0000003

5.1.2. $\int_0^{1.2} \frac{1}{x^5 + x + 1}\, dx = 0.70804892...$

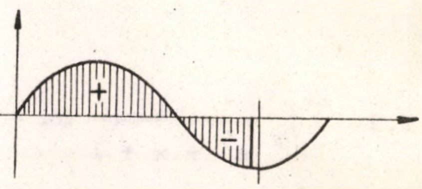
n	$T_{n,n}$	δ_n
2	0.71	2.10^{-2}
3	0.7081	8.10^{-4}
4	0.70805	2.10^{-5}
5	0.708048919	2.10^{-9}

5.1.3. $\int_{-1}^{+1} \sqrt{1 - x^2}\, dx = \frac{\pi}{2} = 1.570796...$; $\varepsilon = 10^{-5}$

n	$T_{n,n}$	δ_n
2	1.5	1.10^{-1}
3	1.55	3.10^{-2}
4	1.56	1.10^{-2}
5	1.568	4.10^{-3}
6	1.5697	1.10^{-3}
7	1.5704	4.10^{-4}
8	1.57066	2.10^{-4}
9	1.57075	6.10^{-5}
10	1.57078	2.10^{-5}
11	1.570790	7.10^{-6}

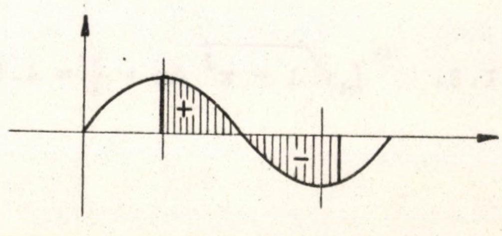
5.1.4. $\int_0^{4.71} \sin x \, dx = 1.00238898\ldots$; $\varepsilon = 10^{-6}$

n	$T_{n,n}$	δ_n	δ_n^0
2	0.99	5.10^{-1}	7.10^{-2}
3	1.003	2.10^{-2}	
4	1.0024	1.10^{-4}	
5	1.002388978	3.10^{-7}	



5.1.5. $\int_{1,57}^{4,90} \sin x \, dx = -0.18571604\ldots$;

n	$T_{n,n}$	δ_n
2	-0.1855178096	6.10^{-2}
3	-0.1857169084	1.10^{-3}
4	-0.1857160418	5.10^{-6}
5	-0.1857160427	5.10^{-9}



5.2. Példák a simpson eljárás alkalmazására

Az eljárás legfeljebb harmadfoku polinomokra pontos /pl. $\int_0^2 x^3 dx$-re - az eljárás kipróbálása során - természetesen, megkaptuk a 4 értéket/.

5.2.1. $\int_{-9}^{10000} \frac{1}{\sqrt{|x|}} dx = 206$ /206 pontos érték/

Az integrandusnak x = 0-ban szingularitása van.

n	S_n	δ_n	n	S_n	δ_n
2	232.6532615	4.10^{-1}	16	205.9866742	4.10^{-5}
3	204.4260449	1.10^{-1}	17	205.9955368	5.10^{-5}
4	198.7269968	3.10^{-2}	18	205.9967931	7.10^{-6}
5	200.2217000	8.10^{-3}	19	205.9975493	8.10^{-6}
6	203.7597443	2.10^{-2}	20	205.9985073	5.10^{-6}
7	206.0978585	1.10^{-2}	21	205.9996514	6.10^{-6}
8	205.1448069	5.10^{-3}	22	205.9995237	7.10^{-7}
9	205.4589010	2.10^{-3}	23	206.0003546	4.10^{-6}
10	205.7228454	1.10^{-3}	24	205.9999365	2.10^{-6}
11	205.8123702	8.10^{-4}	25	205.9999074	2.10^{-7}
12	205.8898663	4.10^{-4}	26	206.0001685	1.10^{-6}
13	205.9822488	5.10^{-4}	27	206.0000205	8.10^{-7}
14	205.9597208	1.10^{-4}	28	205.9999873	2.10^{-7}
15	205.99534337	2.10^{-4}	29	206.0000036	1.10^{-7}

5.2.2. $\int_0^{1.2} \frac{1}{x^5 + x + 1} dx = 0.70804892\ldots$; $\varepsilon = 5.10^{-6}$.

n	S_n	δ_n
2	0.70805	1.10^{-4}
3	0.70804893	2.10^{-6}

5.2.3. $\int_{-1}^{+1} \sqrt{1 - x^2}\, dx = \frac{\pi}{2} = 1.5707963268\ldots$;

n	S_n	δ_n
2	1.56	2.10^{-2}
3	1.569	4.10^{-3}
4	1.5705	8.10^{-4}
5	1.57074	2.10^{-4}
6	1.57078	3.10^{-5}
7	1.570794	6.10^{-6}
8	1.5707959	1.10^{-6}
9	1.5707962	2.10^{-7}
10	1.57079631	5.10^{-8}
11	1.570796324	1.10^{-8}
12	1.5707963261	4.10^{-9}
13	1.5707963267	3.10^{-9}

5.2.4. $\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\,dx = \frac{\pi}{4} = 0.7853981634\ldots\ ;\quad \varepsilon = 10^{-6}$

n	S_n	δ_n^0	δ_n^0
2	0.7853981631	5.10^{-5}	10^{-7}
3	0.7853981634	6.10^{-7}	

5.2.5. $\int_0^{10} e^{-x}dx = 0.999955\ldots\ ;\quad \varepsilon = 5.10^{-4}$

$S = 0.999962 \qquad \delta = 5.10^{-4}$

5.2.6. $\int_0^{0.999} \mathrm{th}\, x \,.\, \ln \frac{1-x}{1+x}\, dx = ? \qquad \varepsilon = 1.10^{-4}$

$S = 0.82254 \qquad \delta = 4.10^{-5}$

$\int_0^{0.999} \mathrm{th}\, x \,.\, \ln \frac{1-x}{1+x}\, dx \sim 0.8225$

5.3. Példák a rombergi eljárás alkalmazására

Itt most kettős és hármas integrálokra szoritkozunk. Az integrációs tartomány mindig négyszög- vagy normáltartomány.

A 2.1. pontban elmondottakból következik, hogy a Romberg-féle kubatura-eljárás legfeljebb ötödfoku polinom négyszögtartományon vett integráljára - a kerekitési hibáktól eltekintve - pontos értéket adhat. /A gépi pontosság 11 értékes jegy./ A továbbiakban az integrál közelitő értékét egyszerüen T jelöli.

5.3.1. $$\int_0^1 \int_0^1 (x^2 + y^2)\,dxdy = \frac{2}{3}$$

T = 0.66666666667

5.3.2. $$\int_0^1 \int_0^1 (x^4 + y^4)\,dxdy = \frac{2}{5}$$

T = 0.40000000000

5.3.3. $$\int_{x=0}^{3} \int_{y=0}^{(6-2x)/3} (x^2 + y^2)\,dydx = \frac{13}{2}\,.$$

T = 0.65000000000

5.3.4. $$\iint_{(x^2+y^2\leq 1)} (x^2 + y^2)\,dxdy = \int_{y=-1}^{+1} \left(\int_{x=-\sqrt{1-y^2}}^{+\sqrt{1-y^2}} (x^2 + y^2)\,dx \right) dy = \frac{\pi}{2} \left(= 1.570796\ldots\right)\,.$$

T = 1.569 $\qquad \varepsilon = 10^{-3}$

T = 1.5705 $\qquad \varepsilon = 10^{-5}$

5.3.5. $$\int_0^1 \int_0^1 e^{x+y}\,dx\,dy = (e-1)^2 = 2.95249303\ldots$$

T = 2.952492 $\qquad \varepsilon = 10^{-6} \qquad \delta = 5.10^{-7}$

5.3.6. $$\iint_{(x^2+y^2\leq 1)} e^{x^2+y^2}\,dx\,dy = \pi(e-1). \qquad \varepsilon = 10^{-6}$$

T = 5.39788

5.3.7 $\displaystyle\int_{y=2}^{4.9}\int_{x=2}^{6.9-y} \frac{[(x^2-4)(y^2-4)[47-(x+y)^2][47-(x-y)^2]\}^{3/2}}{[(x^2-29.5)^2+20.6][(y^2-29.5)^2+20.6]} dxdy$.

T = 11.57 $\pm$ 3 ‰

5.3.8. $\displaystyle\int_0^1\int_0^1\int_0^1 (x^4 + y^4 + z^4)dxdydz = \frac{3}{5}$.

T = 0.60000000000

5.3.9. Sikeresen számitottunk ki

$$\iiint\limits_{(N)} f(E;x,y,z)\cdot e^{-\mu\cdot g(x,y,z)}dxdydz$$

alaku hármas integrálokat, amelyek szcintillációs detektor fotocsucshatásfokát adják egy elliptikus hengerekből felépitett N fantomra.

Bizonyos (E,μ) pontokban eredményeinket - a probléma természeténél fogva - mérésekkel is kontrollálhattuk.

Irodalom

I.P. Natanszon: Konstruktiv függvénytan /1949/ /V. Mechanikus kvadraturák/

A. Ralston: A First Course in Numerical Analysis. /4. Numerical Quadrature/ /1965/

Filippi: Das Verfahren von Romberg-Stiefel-Bauer .../Math.Techn.Wirtschaft 11, 2-3/ /1964/

F.L. Bauer: Romberg Integration /Algorithm 60. CACM 4-61 [255]/ és CACM 5-62 [168], 5-62 [281], 6-63 [443], 7-64 [420], 8-65 [686]

W.M.McKeeman - L. Tesler: Nonrecursive adaptive integration /Algorithm 182 CACM 6-63 [312]/és CACM 5-62 [604]

KFKI report 71-7. szám.

Érkezett: 1971. jan. 26.

Központi Fizikai Kutató Intézet
Könyvtár és Kiadói Osztály

O.v.: Dr. Farkas Istvánné
Szakmai lektor: Németh Géza
Példányszám: 136 Munkaszám: 5395
Készült a KFKI házi sokszorositójában
F.v.: Gyenes Imre
Budapest, 1971. március hó