Rombergova metóda pre numerické integrovanie a jej implementácia v prostredí MATLAB

***Martin Kačeňák*[1]**

Romberg's Method of Numerical Integration and its Implementation in MATLAB

A method suggested by Romberg in 1955 is shown to be a very efficient, accurate and fast. In this paper an implementation of the Romberg method in MATLAB is discussed and illustrated using example. Two modifications of the method are provided, one based on the use of the trapezoidal rule, and another one using the Simpson rule. The paper starts with an overview of some most basic approaches to the numerical integration. The place of the Romberg method in the classification of classical approaches is shown, and linked to Richardson's extrapolation method, which is used for the acceleration of convergence of numerical methods. The results of implementation are demonstrated in the form of comparison tables. It is demonstrated that the Romberg method gives a high precision for the price of the good time performance, and therefore represents a competitive alternative to MATLAB's standard functions for numerical integration.

Key words: *Numerical integration, Romberg method, Matlab, trapezoidal rule, Simpson's rule, speed-up.*

Motivácia

Hlavnou motiváciou pre rozpracovanie implementácie Rombergovej metódy v prostredí MATLAB bola potreba v presnej a rýchlej metódy, ktorá by nemala nedostatky, typické pre štandardné zabudované funkcie systému MATLAB (*quad* a *quad8*). Je známe, že tieto funkcie zlyhávajú v prípade, keď integrovaná funkcia má slabú alebo silnú singularitu v okolí jedného z koncov intervalu integrovania. Na druhej strane potreba riešiť diferenciálne rovnice neceločíselného rádu (Podlubny, 1999) vedie práve k integrálom so singularitami. Predkladané výsledky sa používajú pri simulovaní dynamických sústav neceločíselného rádu a pri navrhovaní regulátorov neceločíselného rádu.

Mechanické kvadratúry

Na výpočet určitého integrálu

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

funkcie danej funkčnými hodnotami v ekvidištančných bodoch (uzloch) sa najčastejšie používajú Newtonove-Cotesove kvadratúrne vzorce. Najznámejšími zástupcami tejto triedy metód je lichobežníková metóda a Simpsonovo pravidlo.

Na výpočet určitého integrálu funkcie $f(x)$ v intervale $\langle a,b\rangle$ pomocou ekvidištančných bodov sa položí:

$$h = \frac{b-a}{n}, \tag{2}$$

kde *n* je počet rovnakých častí, na ktoré delíme interval $\langle a,b\rangle$. Takto sú získané ekvidištančné body:

$$x_0 = a,\ x_i = x_0 + ih\ \ (i = 1,2,\ldots,n-1),\ x_n = b,$$

pre ktoré sa počítajú funkčné hodnoty $y_i=f(x_i),\ i=1,2,\ldots,n$.

Lichobežníková metóda

Lichobežníková metóda (*trapezoidal rule*) (3) sa vyznačuje pomalou konvergenciou numerického procesu pri relatívne nízkej presnosti o(h)$^{2.}$

$$I = I_L + R_L,$$

$$I_L = h\cdot\left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n)\right), \tag{3}$$

Z toho vyplýva veľká chyba výpočtu

$$R_L = -\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi)\ , \tag{4}$$

[1] *Ing. Martin Kačeňák*, Katedra informatizácie a riadenia procesov, FBERG TU Košice, e-mail: kacenak@tuke.sk
(Recenzované a revidovaná verzia dodaná 12.7.2001)

kde $\xi \in \langle a, b \rangle$.

Jej dobre známou geometrickou interpretáciou je súčet obsahov lichobežníkov, ktoré sú tvorené uzlovými bodmi a ich funkčnými hodnotami. Integrál sa počíta pomocou po čiastkach lineárnej aproximácie, ktorá pri veľkom kroku nezohľadňuje charakter zakrivenia funkcie medzi uzlovými bodmi.

Simpsonovo pravidlo

Simpsonovo pravidlo (S*impson's rule*) (5) presnejšie aproximuje danú funkciu, pre ktorú sa počíta hodnota integrálu v uzlových bodoch. Táto metóda sa vyznačuje vyššou presnosťou o(h)^4, chybu výpočtu vyjadruje (6). Geometrickou interpretáciou je súčet plôch pod parabolami nad trojicami uzlových bodov so spoločným hraničným bodom pre susediace paraboly. Aproximácia pomocou parabol lepšie zohľadňuje správanie sa integrovanej funkcie *f(x)* medzi uzlovými bodmi.

$$I = I_S + R_S ,$$

$$I_S = \frac{h}{3} \cdot \begin{pmatrix} f(x_0) + f(x_n) + 4 \cdot \left(f(x_1) + f(x_3) + \ldots + f(x_{n-1}) \right) + \\ + 2 \cdot \left(f(x_2) + f(x_4) + \ldots + f(x_{n-2}) \right) + f_n \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$R_S = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{180\,n^4} f^{(4)}(\xi). \tag{6}$$

Rovnako, ako pre lichobežníkovú metódu, aj pre Simpsonovo pravidlo platí, že presnosť výpočtu závisí od veľkosti kroku diskretizácie *h*. Najpresnejšie sú výpočty s veľkým počtom uzlových bodov *n+1* na malom intervale <*a, b*>.

Pri analytickom riešení je možné chybu vyjadriť pomocou príslušnej derivácie funkcie, samozrejme ak je táto na intervale <*a, b*> spojitá a dostatočne hladká. Pri numerických metódach však je vhodnejšie vyjadriť chybu pomocou diferencií uzlových bodov príslušného rádu (Pavluš, 1990),

$$R_L = -\frac{b-a}{12} \overline{\Delta^2 y}, \quad R_S = -\frac{b-a}{180} \overline{\Delta^4 y}, \tag{7}$$

kde $\overline{\Delta^2 y}$ označuje strednú hodnotu diferencií druhého rádu hodnôt *y*.

Richardsonova extrapolácia

Pomocou tohto postupu je možné pre aproximáciu so známou zvyškovou chybou riešenia z dvoch výpočtov s rôznym krokom vyjadriť riešenie presnejšie, ako v obidvoch pôvodných výpočtoch. Tento princíp využíva *metóda opakovaného výpočtu*, označovaná aj ako *Richardsonova extrapolácia* (Dĕmidovič, 1963, Ralston, 1978).

Metóda opakovaného výpočtu

Z vlastností vyššie popísaných numerických metód je známy rád zvyškovej chyby $R = o(h^m)$, kde $m \geq 1$. Veľkosť *R* sa určí pomocou tzv. *metódy opakovaného výpočtu*,

$$R = Mh^m . \tag{8}$$

Platí vzťah (8), kde M sa považuje za konštantu, ktorá závisí od danej funkcie *f(x)*, integrovanej na intervale <*a, b*>. Zvolia sa dva rôzne kroky výpočtu h_1, h_2, podľa (2), kde n_1 a n_2 ($n_1 > n_2$) sú príslušné počty čiastkových intervalov.

Zodpovedajúce hodnoty integrálov sa označia ako I_{n_1} a I_{n_2}. Zo vzťahu (8) vyplýva

$$R_{n_1} = I - I_{n_1} = M\left(\frac{b-a}{n_1}\right)^m, \quad R_{n_2} = I - I_{n_2} = M\left(\frac{b-a}{n_2}\right)^m, \tag{9}$$

kde R_{n_1} a R_{n_2} sú príslušné zvyškové chyby. Z toho potom

$$I_{n_1} - I_{n_2} = M(b-a)^m \left(\frac{1}{n_1^m} - \frac{1}{n_2^m} \right) \Rightarrow M = \frac{(n_1 n_2)^m}{(b-a)^m} \cdot \frac{I_{n_1} - I_{n_2}}{n_2^m - n_1^m} .$$

Zo vzťahu (8) po úprave vyplýva

$$R_{n_2} = \frac{n_1^m}{n_2^m - n_1^m} \left(I_{n_2} - I_{n_1} \right) . \tag{10}$$

Zo vzťahov (10), (9) sa získa presnejšia hodnota integrálu

$$I_{n_1,n_2} = I_{n_2} + \frac{n_1^m}{n_2^m - n_1^m}\left(I_{n_2} - I_{n_1}\right). \tag{11}$$

Tento spôsob vyjadrenia sa nazýva *Richardsonová extrapolácia*. Označením

$$\frac{n_2}{n_1} = \alpha,\ \alpha > 1$$

sa získa vzťah (12)

$$I_{n_1,n_2} = I_{n_2} + \beta\left(I_{n_2} - I_{n_1}\right),\ \beta = \frac{1}{\alpha^m - 1}. \tag{12}$$

Koeficienty *m* sú určené tabuľkami pre rôzne metódy, pre lichobežníkovú metódu je *m=2*, pre Simpsonovo pravidlo je *m=4*. Použitím vzťahu (12) sa získa z dvoch výpočtov integrálu I_{n_1} a I_{n_2}, s rôznym krokom delenia intervalu integrovania hodnota, ktorá má menšiu chybu, čiže je presnejšia. Súvisiace dôkazy a príklady je možné nájsť v (Dĕmidovič, 1963 a Ralston, 1978).

Rombergova metóda

Romberg (1955) načrtol spôsob výpočtu určitého integrálu pomocou aproximácie s využitím lichobežníkovej metódy. Ukázal, že je možné využiť metódy s nižším rádom presnosti na vyjadrenie presnejšej aproximovanej hodnoty integrálu, ak sa využije aproximácia na rovnakom intervale s rôznym krokom delenia intervalu. Kombináciou výsledkov s nižšou presnosťou sa dosiahne výsledok s vyššou presnosťou.

Postup je nasledujúci. Najprv aproximujeme integrál na intervale $a \le x \le b$, ktorý je rozdelený na *8N* (N je ľubovoľné celé číslo, ktoré určí počet počítaných uzlov) častí, s krokom $h = (b-a)/8N$. Potom pomocou uzlových bodov *f(a+kh)*, kde *k = 1, 2 ..,8N-1*, sa získa najhoršia aproximácia pomocou vzťahu (13). Ďalej sa vypočítavajú ďalšie aproximácie integrálu pomocou vzťahov (14), (15), ktoré majú postupne zmenšujúcu sa veľkosť kroku od *8h*, cez *4h* až po *h* pre hodnotu T_8.

$$T_1 = 8h\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m} = (b-a)\cdot\overline{\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m}} \tag{13}$$

$$U_1 = 8h\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m+4} = (b-a)\cdot\overline{\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m+4}},$$

$$U_2 = (b-a)\cdot\overline{\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m+2} + F_{8m+6}}, \tag{14}$$

$$U_4 = (b-a)\cdot\overline{\sum_{m=0}^{N-1} F_{8m+1} + F_{8m+3} + F_{8m+5} + F_{8m+7}},$$

$$T_2 = \overline{T_1 + U_1}, T_4 = \overline{T_2 + U_2}, T_8 = \overline{T_4 + U_4}. \tag{15}$$

U a T sú *hrubé* aproximácie integrálu I s chybou rádu h^2. Ďalej sa pomocou susediacich delení hľadá presnejšie priblíženie pomocou vzťahov (16), ktoré sú veľmi podobné vzťahom (12).

$$\begin{aligned} S_2 &= T_2 + \frac{T_2 - T_1}{2^2 - 1}; S_4 = T_4 + \frac{T_4 - T_2}{2^2 - 1}; S_8 = T_8 + \frac{T_8 - T_4}{2^2 - 1}; \\ V_2 &= U_2 + \frac{U_2 - U_1}{2^2 - 1}; V_4 = U_4 + \frac{U_4 - U_2}{2^2 - 1}; \end{aligned} \tag{16}$$

S a V sú presnejšie aproximácie s chybou o(h^4). Týmto spôsobom sa pokračuje vo výpočte pre priblíženia R, W (s chybou o(h^6)) a Q (s chybou o(h^8)). Výslednú aproximovanú hodnotu integrálu I predstavuje veličina Q:

$$Q_{\acute{a}} = R_8 + \frac{R_8 - R_4}{2^6 - 1}. \tag{17}$$

Konečná hodnota Q je výsledkom prepočtov, ktorých výsledky sa zapíšu do schémy (18). Podľa pôvodnej práce (Romberg, 1955) sa postupuje od prvého ľavého stĺpca k prvému pravému (pôvodné Rombergové označenie).

$$\begin{array}{llll} T_1, U_1 & & & \\ T_2, U_2 & S_2, V_2 & & \\ T_4, U_4 & S_4, V_4 & R_4, W_4 & \\ T_8 & S_8 & R_8 & Q_8\ . \end{array} \tag{18}$$

S použitím *Richardsonovej extrapolácie* je možné túto metódu čiastočne doplniť. Ralston (1978) popísal aproximáciu pomocou schémy (19), keď sa výpočet uskutočňoval po riadkoch, zhora nadol (20), a nie ako u (Romberg, 1955) po stĺpcoch. Rozdiel však nie je principiálny, je to len iné poradie vo výpočte zhodných vzťahov.

$$\begin{array}{lllll} T_{0,0} & & & & \\ T_{0,1} & T_{1,0} & & & \\ T_{0,2} & T_{1,1} & T_{2,0} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ T_{0,m} & T_{1,m-1} & \cdots & \cdots & T_{m,0}\ . \end{array} \tag{19}$$

T je aproximácia integrálu *I*, pričom *m* vyjadruje počet výpočtov s rôznym krokom $h_m=(b-a)/2^{m+p}$,*p* vyjadruje počiatočné delenie intervalu integrovania pre aproximáciu na 2^p dielov Výslednú aproximáciu predstavuje $T_{m,0}$

$$T_{m,k} = \frac{1}{4^m - 1}\left(4^m T_{m-1,k+1} - T_{m-1,k}\right), \ k = 0,1,\ldots\ , \quad m = 1,2,\ \ldots\ . \tag{20}$$

Keďže Rombergova metóda je vlastne len numerický prepočet výsledkov aproximácie pre rôzny krok delenia intervalu, je možné použiť aj inú aproximáciu, ako len lichobežníkovú metódu, napríklad Simpsonovo pravidlo, atď.

Rombergova metóda je napriek svojej jednoduchosti veľmi presná, čo ilustruje aj príklad, ktorý je uvedený nižšie. Počiatočné obmedzenia presnosti aproximácie sú rovnaké ako pri lichobežníkovej metóde, alebo pri Simpsonovom pravidle, pretože tieto metódy sa využívajú na prvotné priblíženie, ktoré sa ďalej upresňuje (zvyšuje sa rád presnosti). Rozhodujúcimi parametrami pre presnosť výslednej aproximácie je krok počiatočnej aproximácie (počet uzlových bodov) a *m* celkový počet opakovaní aproximácie. Je zrejmé, že výsledok je ovplyvnený aj vlastnosťami aproximovanej funkcie, lebo tá môže byť nevhodná pre využitie spomenutých metód aproximácie (napr. rýchlo oscilujúca), čo aj napriek dobrému algoritmu Rombergovej integrácie nemusí priniesť presný výsledok. V takom prípade však zlyháva aj väčšina iných metód.

Implementácia v MATLAB-e

Aplikácia MATLAB využíva výpočtové jadro, ktoré matice a vektory (riadková matica) chápe ako samostatné objekty a obsahuje rýchle algoritmy a funkcie pre prácu s nimi. To umožňuje urýchliť výpočty s maticami, v niektorých prípadoch až na zlomok času potrebného pre klasický výpočet pomocou cyklov a indexovaných premenných.

Iným možným riešením pre urýchlenie je využitie rekurzie na vhodné vzorce, ktoré sa opakujú vo výpočte, v tomto prípade ide o rekurzívne vzťahy pre výpočet lichobežníkovej metódy (21) (Eberly) a Simpsonovho pravidla (22)

$$2 \cdot T_m = T_{m-1} + h_{m-1} \cdot \sum_{j=1}^{2^{m-2}} f\left(a + (j - 0.5) \cdot h_{m-1}\right), \tag{21}$$

$$6 \cdot T_m = 3 \cdot T_{m-1} + 2 \cdot h_{m-1} \cdot \left(2 \cdot \sum_{j=1}^{2^m} f\left(a + (j - 0.5) \cdot h_{m-1}\right) - \sum_{j=1}^{2^{m-1}} f\left(a + (2j - 1) \cdot h_{m-1}\right) \right), \tag{22}$$

kde *m* predstavuje poradie aproximácie, T_m je hodnota príslušnej aproximácie s krokom $h_m=(b-a)/2^m$.

Pomocou týchto rekurzívnych vzťahov je možné sa vyhnúť práci s hodnotami, ktoré už boli spracované a niekoľkokrát sa opakujú. Taktiež je možné využiť vektory hodnôt funkcií v uzlových bodoch namiesto opakovaného vypočítavania funkčných hodnôt v tých istých uzlových bodoch.

Porovnanie rýchlosti

Tieto postupy a vyššie spomenutá teória boli využité pri tvorbe funkcií *rombtrap*, *rombsim,* určených pre numerický výpočet určitých integrálov v MATLABe. Tieto funkcie sú publikované a sprístupnené užívateľom MATLABu (Kačeňák, 2000).

Boli vytvorené dve funkcie pre výpočet integrálov s využitím Rombergovej metódy. Prvá funkcia – *rombtrap* – je založená na základnej aproximá cii lichobežníkovou metódou. Druhá funkcia – *rombsim* – používa Simpsonovo pravidlo. Tieto dve funkcie sú porovnané so štandardnými metódami *quad*, *quad8*, ktoré sú súčasťou aplikácie MATLAB. Funkcia *quad* využíva pri výpočte integrálu *adaptívno–rekurzívne Simpsonovo pravidlo* je považovaná za menej presnú metódu (z dvoch). Druhá štandardná funkcia *quad8* počíta integrál pomocou *adaptívno–rekurzívneho Newtonovho–Cotesovho pravidla*. Obidve metódy uskutočňujú výpočet s relatívnou chybou 10^{-3} (čo sa však dá zmeniť pomocou voľby parametrov volanej funkcie).

Toto nastavenie presnosti bolo použité aj v nasledujúcom príklade, kde hodnota r v tabuľkách predstavuje nastavenie relatívnej chyby na hodnotu 10^{-r} pre funkcie *quad* a *quad8* a pre funkcie *rombtrap* a *rombsim* táto hodnota predstavuje počet spresňujúcich aproximácií, čo zodpovedá presnosti výpočtu s relatívnou chybou 10^{-r}. Výsledky výpočtov pomocou funkcií *rombtrap, rombsim* boli získané s prvou aproximáciou s krokom delenia intervalu na 2^8 častí. Počet uzlových bodov pre poslednú aproximáciu pre jednotlivé výpočty, vyjadrujeme ako 2^{8+r}.

Tieto štyri funkcie boli použité pre výpočet hodnoty určitého integrálu

$$\int_{-4}^{4} \frac{dx}{1+x^2} = 2\,arctg\,4\,. \qquad (23)$$

Zisťoval sa čas výpočtu, počet operácií s plávajúcou desatinnou čiarkou (floating-point operations – *flops*) a absolútna chyba výpočtu ε. V nasledujúcich tabuľkách je ukázané, ako sa jednotlivé funkcie od seba kvalitatívne líšia pre rôzne hodnoty r.

Tab.1. Hodnoty časov výpočtu a flops pre daný príklad.
Tab.1. Time of computation and number of flops for the considered example.

	čas výpočtu [s]				hodnota "flops"			
r	quad	quad8	rombtrap	rombsim	quad	quad8	rombtrap	rombsim
2	0.01	0.00	0.02	0.01	393	381	2095	4665
3	0.03	0.01	0.00	0.01	645	803	4173	9821
4	0.03	0.01	0.00	0.01	1275	803	8308	20106
5	0.08	0.01	0.00	0.02	2535	1225	16548	40640
6	0.11	0.02	0.01	0.03	4299	1225	32989	81663
7	0.21	0.02	0.03	0.06	8331	1225	65823	163655
8	0.42	0.03	0.07	0.14	15513	2069	131434	327576
9	0.59	0.03	0.12	0.31	21908	2913	262590	655346
10	0.79	0.05	0.22	0.67	32216	3757	524827	1310805

Tab.2. Hodnoty chýb výpočtu ε pre daný príklad.
Tab.2. Computational error for the considered example.

	chyba výpočtu ε			
r	quad	quad8	rombtrap	rombsim
2	+1.23e-004	-7.49e-005	-1.14e-011	+0.00e+000
3	+3.89e-006	+1.27e-008	+0.00e+000	+3.11e-015
4	+9.33e-007	+1.27e-008	+3.55e-015	+5.33e-015
5	+1.34e-007	+9.30e-010	+7.11e-015	+4.44e-016
6	+1.25e-008	+9.30e-010	+4.00e-015	-7.11e-015
7	+1.07e-009	+9.30e-010	-6.66e-015	-1.51e-014
8	+9.65e-011	+1.06e-011	-1.55e-014	+9.77e-015
9	+1.82e-011	-2.63e-013	+1.78e-015	+2.66e-015
10	+6.17e-013	+1.20e-014	+7.55e-015	-4.44e-015

Z tabuliek 1 a 2, v ktorých sú uvedené výsledky výpočtov určitého integrálu (23) pomocou štyroch vyššie spomenutých funkcií vidieť, že Rombergova metóda pre výpočet približnej hodnoty určitého integrálu je pri veľmi krátkom čase výpočtu zároveň veľmi presná. Na zvolenom príklade sa lepšie osvedčila funkcia *rombsim*, ktorá využíva Simpsonovo pravidlo. Aj vo všeobecnosti je táto funkcia presnejšia ako štandardné funkcie (*quad, quad8*) a funkcia *rombtrap*. Funkciu *rombtrap* je vhodnejšie použiť pri riešení úloh, ktoré si vyžadujú lichobežníkovú metódu alebo nekladú značné požiadavky na presnosť výpočtu.

Poďakovanie: Tento príspevok vznikol v rámci riešenia grantu VEGA 1/7098/20 zo Slovenskej grantovej agentúry. Ďakujem recenzentovi za cenné pripomienky.

Literatúra

DĚMIDOVIČ, B. P., MARON, I. A.: Základy numerické matematiky, *SNTL Praha,* 1963.

EBERLY, D.: Numerical integration, Magic Software 6006 Meadow Run Court, Chapel Hill, NC 27516, http://www.magic-software.com/nu_func.htm

KAČEŇÁK, M.: Funkcie rombtrap, rombsim pre numerické integrovanie s využitím Rombergovej metódy, ftp://ftp.mathworks.com/pub/contrib/v5/integration, 2000.

PAVLUŠ, M., TÖRÖK, C., PURCZ, P.: Programovanie v jazyku PASCAL a úvod do numerickej matematiky (zbierka úloh), *ES TU* 1990.

PODLUBNY, I.: Fractional Differential Equations, *Academic Press*, San Diego, 1999.

RALSTON, A.: Základy numerické matematiky, *Academia Praha*, 1978.

ROMBERG, W.:Verienfachte numeriche integration Der Kongelinge Norske Videskabers Selskabs Forhandlinge, Bind 28, 1955, Nr 7, 30-36.