

УДК 004.42:[519.6:517.95]

DOI <https://doi.org/10.32782/cusu-pmtp-2024-2-5>

КОМБІНУВАННЯ МОЖЛИВОСТЕЙ MAPLE ТА PYTHON ДЛЯ СТВОРЕННЯ ГІБРИДНОГО АЛГОРИТМУ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ В НАВЧАЛЬНИХ КУРСАХ З МАТЕМАТИКИ

Гуртовий Юрій Валерійович,

кандидат фізико-математичних наук, доцент,
доцент кафедри математики та цифрових технологій
Центральноукраїнського державного університету
імені Володимира Винниченка
ORCID ID: 0000-0002-1499-7089
SCOPUS ID: 57203011325

Луньова Марія Валентинівна,

доктор філософії з прикладної математики,
старший викладач кафедри математики та цифрових технологій
Центральноукраїнського державного університету
імені Володимира Винниченка
ORCID ID: 0000-0002-7838-1013
SCOPUS ID: 57196297582

У статті досліджуються можливості систем комп'ютерної математики (СКМ), зокрема Maple та Python, при вивченні математичних дисциплін студентами спеціальностей 122 Комп'ютерні науки та 112 Статистика.

Maple пропонує ряд унікальних можливостей, таких як знаходження точних аналітичних розв'язків для багатьох інтегралів, спрощення складних інтегралів перед застосуванням чисельних методів, а також виявлення та обробка особливостей підінтегральної функції. Вбудована система Maple автоматично вибирає найбільш підходящий метод інтегрування залежно від характеру функції. Maple також надає потужні інструменти для візуалізації, що можуть бути використані для графічного представлення підінтегральної функції.

Python завдяки своїй гнучкості та великій кількості бібліотек також є потужним інструментом для чисельного інтегрування. Бібліотеки NumPy, SciPy, та SymPy забезпечують ефективну роботу з масивами, широкий спектр алгоритмів для чисельного аналізу та символічних обчислень, відповідно. Python дозволяє легко створювати власні функції та класи для реалізації спеціалізованих методів інтегрування, зокрема реалізацію нових алгоритмів, адаптацію існуючих методів під конкретні задачі та створення комплексних обчислювальних моделей.

У статті запропоновано гібридний алгоритм, який поєднує символічний аналіз в Maple з чисельним інтегруванням у Python для ефективного обчислення складних інтегралів. Загальна структура алгоритму включає: аналіз та підготовку в Maple, передачу даних з Maple у Python, чисельне інтегрування в Python та аналіз результатів з оцінкою похибки. Розглянуто приклад обчислення складного інтегралу, що демонструє ефективність запропонованого підходу.

Таким чином, гібридний підхід, що поєднує символічні можливості Maple з чисельними потужностями Python, дозволяє створити надійний та ефективний алгоритм чисельного інтегрування складних функцій, забезпечуючи високу точність та оптимізацію процесу обчислення.

Ключові слова: чисельне інтегрування, гібридний метод, Maple, Python.

Hurtovyi Yuriy, Lunyova Maria. Combination of Maple and Python capabilities to create a hybrid algorithm for numerical integration of complex functions

The article explores the possibilities of computer mathematics (CMA) systems, in particular Maple and Python, for performing numerical integration of complex functions.

Maple offers a number of unique capabilities, such as finding exact analytical solutions for many integrals, simplifying complex integrals before applying numerical methods, and identifying and handling features of the

integral function. Maple's built-in system automatically selects the most appropriate integration method depending on the nature of the function. Maple also provides powerful visualization tools that can be used to graphically represent an integral function.

Python, due to its flexibility and large number of libraries, is also a powerful tool for numerical integration. The NumPy, SciPy, and SymPy libraries provide efficient array manipulation, a wide range of algorithms for numerical analysis, and symbolic computation, respectively. Python allows you to easily create your own functions and classes for the implementation of specialized integration methods, including the implementation of new algorithms, the adaptation of existing methods for specific tasks, and the creation of complex computational models.

The article proposes a hybrid algorithm that combines symbolic analysis in Maple with numerical integration in Python for efficient computation of complex integrals. The overall structure of the algorithm includes: analysis and preparation in Maple, data transfer from Maple to Python, numerical integration in Python, and analysis of the results with error estimation. An example of calculating a complex integral is considered, demonstrating the effectiveness of the proposed approach.

Thus, the hybrid approach combining the symbolic capabilities of Maple with the numerical capabilities of Python allows for the creation of a reliable and efficient algorithm for the numerical integration of complex functions, ensuring high accuracy and optimization of the calculation process.

Key words: numerical integration, hybrid method, Maple, Python.

Вступ. У сучасній обчислювальній математиці чисельне інтегрування відіграє ключову роль у розв'язанні широкого спектру практичних та теоретичних задач. Особливо актуальним є пошук ефективних методів для інтегрування складних функцій, які часто зустрічаються в фізиці, інженерії, економіці та інших галузях науки. Незважаючи на значний прогрес у розробці алгоритмів, чисельне інтегрування складних функцій все ще залишається викликом, особливо коли йдеться про високу точність обчислень або роботу з функціями, що мають особливості.

Ця стаття присвячена розробці гібридного алгоритму чисельного інтегрування, який поєднує сильні сторони двох середовищ Maple та Python. Даний метод використовується при вивченні математичних дисциплін, зокрема «Чисельні методи», «Математичний аналіз», «Вища математика» тощо, а також може бути застосований при виконанні кваліфікаційних робіт студентами спеціальностей 122 Комп'ютерні науки та 112 Статистика. Мета дослідження – створити метод, здатний ефективно обробляти складні функції, використовуючи символічні можливості Maple для попереднього аналізу та спрощення інтегралів, а потім застосовуючи потужні чисельні методи Python для остаточного обчислення.

Аналіз досліджень та публікацій. У цьому контексті особливий інтерес представляє комбінування можливостей різних програмних середовищ, зокрема Maple та Python. Maple, відомий своїми потужними можливостями символічних обчислень, пропонує широкий спектр вбудованих функцій для аналітичного та чисельного інтегрування [7; 10; 11]. Python, з іншого боку, відрізняється гнучкістю, наявністю великої кількості бібліотек, що надають інтерфейс до всіх системних викликів на різних платформах та ефективністю в обробці великих обсягів даних [5].

У статті [4; 9] представлено HYINT, гібридний (символьно-числовий) метод обчислення невизначених інтегралів. HYINT охоплює більший діапазон інтегралів порівняно з алгоритмом Ріша-Нормана, і кінцевий інтеграл зазвичай має схожу форму з інтегрантом, що відповідає очікуванням користувачів. Показано, що система може вирішувати багато поширених задач інтегрування, використовуючи лише кілька десятків основних правил інтеграції. Також обговорюється числово-асистоване символічне інтегрування, де HYINT виступає як анзац-генератор для інших пакетів символічного інтегрування.

Використання гібридного методу дозволяє стабільно та ефективно обчислювати символічні первісні, уникаючи проблем із поганою обумовленістю, властивих числовим методам [8]. Авторами запропоновано два альтернативні методи для точних вхідних даних: перший обчис-

лює раціональну частину інтегралу за допомогою редукції Ерміта, а другий – трансцендентну частину за допомогою комбінації точного інтегрування та ефективного числового обчислення коренів. Показано, що обидва методи є прямо та зворотно стабільними в структурному сенсі, і, за умови відсутності сингулярностей, досягається пропорційність допустимих похибок шляхом налаштування точності обчислення коренів.

Можливість поєднання символічних та числових обчислень також досліджується у [3]. Автором розроблена система, яка може трасувати числовий код для отримання символічних виразів та перетворювати їх назад у числовий код під час компіляції. Нова система створює екосистему символічно-числових бібліотек, адаптивну до будь-якої галузі, і дозволяє науковцям бути «дизайнерами компіляторів» без попередніх знань.

Матеріали та метод. Під час дослідження використовувався комплекс таких методів: аналіз, синтез, порівняння та узагальнення. Метод аналізу використовувався для огляду літератури з проблеми застосування систем комп'ютерної математики в освіті та розробки гібридних методів символічно та / або чисельного аналізу. Метод синтезу дозволив об'єднати зібрану інформацію та визначити переваги і можливі обмеження у використанні СКМ у освітньому процесі. Метод узагальнення застосовувався для формулювання загальних висновків та визначення подальших напрямів дослідження.

Результати.

Можливості Maple в області чисельного інтегрування.

Maple – це система комп'ютерної алгебри, яка надає широкий спектр інструментів для символічних та чисельних обчислень [7]. У контексті чисельного інтегрування Maple пропонує ряд унікальних можливостей. А саме:

- символічне інтегрування (знаходити точні аналітичні розв'язки для багатьох інтегралів; спрощувати складні інтеграли перед застосуванням чисельних методів; виявляти та обробляти особливості підінтегральної функції);
- автоматичний вибір методу інтегрування (для простих функцій може бути застосоване символічне інтегрування; для складніших функцій система обирає відповідний чисельний метод);
- інструменти для візуалізації, (графічне представлення підінтегральної функції; візуалізація процесу чисельного інтегрування);
- взаємодія з іншими мовами програмування та системами (експорт результатів у різні формати; імпорт даних з інших систем; виклик зовнішніх програм та бібліотек).

У контексті нашого гібридного алгоритму, ми плануємо використовувати Maple для попереднього аналізу та спрощення інтегралів, виявлення особливостей та, за можливості, символічного розв'язання частин складних інтегралів. Це дозволить нам підготувати оптимізовану форму інтеграла для подальшої обробки за допомогою чисельних методів у Python.

Можливості Python в області чисельного інтегрування.

Python завдяки своїй гнучкості та великій кількості бібліотек, є потужним інструментом для чисельного інтегрування. Розглянемо основні можливості Python у цій області [5]:

- має ряд спеціалізованих бібліотек для чисельного аналізу (NumPy забезпечує ефективну роботу з масивами та базові математичні функції; SciPy надає широкий спектр алгоритмів для чисельного аналізу, включно з методами чисельного інтегрування; SymPy – бібліотека для символічних обчислень, що може бути корисною для попереднього аналізу інтегралів);
- можливість створювати власні функції та класи для реалізації спеціалізованих методів інтегрування;
- інтегрується з іншими мовами програмування та системами.

У контексті нашого гібридного алгоритму, ми плануємо використовувати Python для реалізації ефективних чисельних методів інтегрування, особливо для складних функцій. Гнуч-

кість Python дозволить нам створити адаптивний алгоритм, який зможе обирати найбільш підходящий метод інтегрування залежно від характеристик функції, отриманих на етапі аналізу в Maple.

Концепція гібридного алгоритму.

Гібридний алгоритм, який ми пропонуємо, спрямований на об'єднання сильних сторін Maple та Python для ефективного чисельного інтегрування складних функцій. Основна ідея полягає у використанні символьних можливостей Maple для попереднього аналізу та оптимізації інтегралів, з подальшим застосуванням потужних чисельних методів Python для остаточного обчислення.

Розглянемо інтеграл:

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x \cdot (1 + e^{-x})} dx$$

Цей інтеграл є складним через наявність осциляцій, повільно спадаючої поведінки та особливості при $x=0$ (рис. 1).

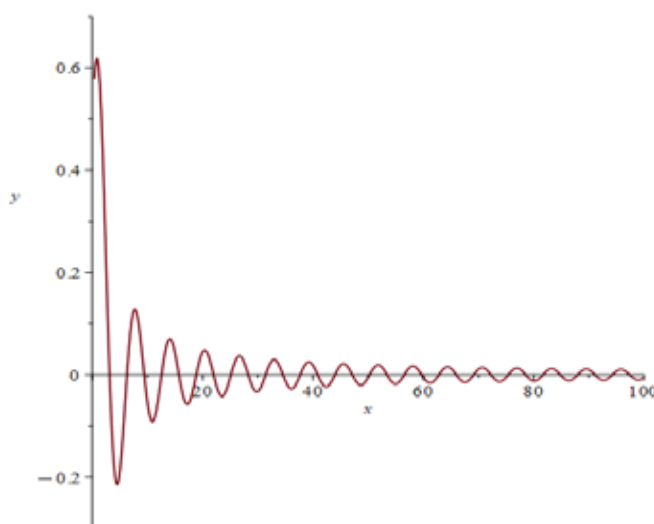


Рис. 1. Графік підінтегральної функції $\frac{\sin x}{x \cdot (1 + e^{-x})}$ на проміжку від 0 до 100

Загальна структура алгоритму:

1. Аналіз та підготовка в Maple, що включає:
 - символний аналіз підінтегральної функції;
 - спрощення та перетворення інтеграла;
 - виявлення особливостей та критичних точок;
 - розбиття складних інтегралів на простіші підінтеграли.
2. Передача даних з Maple в Python:
 - формування структурованого опису інтеграла та його характеристик;
 - експорт даних у форматі, зручному для обробки в Python.
3. Чисельне інтегрування в Python:
 - вибір оптимального методу інтегрування на основі аналізу Maple;
 - застосування адаптивних алгоритмів для обробки складних ділянок;
 - паралельне обчислення підінтегралів (за необхідності).
4. Аналіз результатів та оцінка похибки:

- обчислення похибки інтегрування;
- при необхідності, повернення до етапу аналізу в Maple для уточнення.

Покроковий опис гібридного алгоритму:

1. Аналіз в Maple:

Визначення інтегралу

> restart;

> f := unapply(sin(x) * 1 / (x * (1 + exp(-x))), x);

> F := Int(f(x), x = 0 ..infinity);

$$F := \int_0^{\infty} \frac{\sin(x)}{x(1 + e^{-x})} dx$$

Аналіз особливостей

> limit(f(x), x = 0); # Перевірка поведінки біля x=0

$$\frac{1}{2}$$

> series(f(x), x = 0, 6); # Розклад в ряд Тейлора біля x=0

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{4}x - \frac{1}{12}x^2 - \frac{1}{16}x^3 + \frac{1}{240}x^4 + \frac{11}{1440}x^5 + O(x^6)$$

Розбиття інтегралу

> I1 := Int(f(x), x = 0 ..1);

$$I1 := \int_0^1 \frac{\sin(x)}{x(1 + e^{-x})} dx$$

> I2 := int(f(x), x = 1 ..infinity);

$$I2 := \int_1^{\infty} \frac{\sin(x)}{x(1 + e^{-x})} dx$$

Спроба символічного обчислення I1

> I1_symbolic := value(I1);

$$I1_symbolic := \int_0^1 \frac{\sin(x)}{x(1 + e^{-x})} dx$$

Аналіз асимптотичної поведінки для I2

> asym := series(f(x), x = 0, 6);

$$asym := \frac{1}{2} + \frac{1}{4}x - \frac{1}{12}x^2 - \frac{1}{16}x^3 + \frac{1}{240}x^4 + \frac{11}{1440}x^5 + O(x^6)$$

Експорт результатів для Python

> export_data := [I1_symbolic, (asym)];

> Export("C:\\Users\\Maple\\maple_analysis.csv", export_data);

2. Обробка в Python:

1) Підключення бібліотек необхідних для завантаження даних та виконання чисельного інтегрування;

2) Імпорт результатів з Maple та розділення рядків на окремі елементи, оскільки у файлі дані розділені комами;

- 3) Перевірка вміст файлу;
- 4) Перетворення символьних виразів з рядків;
- 5) Інтегрування I_1 (0 до 1)

try:

```
I1 = sp.integrate(I1_symbolic, (sp.Symbol('x'), 0, 1)).evalf()
print(f"Значення інтегралу I1: {I1}")
```

except Exception as e:

```
print(f"Помилка під час інтеграції I1: {e}")
```

I1 = 0 # Задаємо значення за замовчуванням, щоб уникнути помилок у подальших обчисленнях

- 6) Інтегрування I_2 від 1 до 1000

try:

```
invF = lambda x: (np.sin(x) / (x * (1 + np.exp(-x))))
I2, _ = integrate.quad(invF, 1, 1000, epsabs=1e-12, epsrel=1e-12)
print(f"Значення інтегралу I2: {I2}")
```

except Exception as e:

```
print(f"Помилка під час інтеграції I2: {e}")
```

```
I2 = 0 # Задаємо значення за замовчуванням, якщо інтеграл не збігається
# Перевірка збіжності інтегралу I2
```

```
if not np.isfinite(I2):
```

```
print("Інтеграл I2 не збігається або повільно збігається.")
```

- 7) Загальний результат

```
I_total = I1 + I2
```

```
print(f"Значення інтегралу: {I_total}")
```

- 8) Оцінка похибки з використанням асимптотики

```
x = sp.Symbol('x')
```

try:

```
if asympt:
```

```
asympt_func = sp.simplify(asympt)
```

```
asympt_integral = sp.integrate(asympt_func, (x, 1, 1000))
```

```
asympt_integral = asympt_integral.evalf()
```

```
if asympt_integral.is_real:
```

```
asympt_error = float(asympt_integral)
```

else:

```
asympt_error = float(asympt_integral.as_real_imag()[0])
```

else:

```
asympt_error = float('inf')
```

```
except sp.SympifyError as e:
```

```
print(f"Помилка перетворення асимптотичної функції: {e}")
```

```
asympt_error = float('inf')
```

```
print(f"Оцінка похибки: {asympt_error:.2e}")
```

Пояснення алгоритму:

– Maple використовується для символьного аналізу інтегралу, виявлення особливостей та розбиття на підінтеграли.

– Maple намагається символьно обчислити I_1 (інтеграл від 0 до 1) і аналізує асимптотичну поведінку для I_2 (інтеграл від 1 до ∞).

– Результати аналізу експортуються для використання в Python.

– Python імпортує результати Maple і використовує їх для налаштування чисельного інтегрування.

– Для I1 використовується символічний результат, якщо він доступний, інакше застосовується адаптивне квадратурне інтегрування.

– Для I2 застосовується зведення нескінченного інтервалу до скінченного через те, що саме на цьому інтервалі функція вже значно зменшується. Такий підхід корисний у випадках, коли функція має швидке зменшення після певної точки, і вклад у загальний інтеграл стає дуже малим за межами цього інтервалу. Після чого використовується адаптивне квадратурне інтегрування.

– Асимптотика, отримана з Maple, використовується для оцінки похибки.

Результат роботи гібридного алгоритму. Результатом роботи такого гібридного алгоритму чисельного інтегрування є шукане значення інтегралу функції $\frac{\sin x}{x \cdot (1 + e^{-x})}$ на проміжку від 0 до 1000 (рис. 2).

Вміст файлу:

```
['int(sin(x)/x/(1+exp(-x))', 'x = 0 .. 1)', 'series(1/2+1/4*x-1/12*x^2-1/16*x^3+
1/240*x^4+11/1440*x^5+O(x^6)', 'x', '6)']
I1_symbolic: sin(x)/(x*(1 + exp(-x)))
asympt: 1/2+1/4*x-1/12*x^2-1/16*x^3+1/240*x^4+11/1440*x^5
Значення інтегралу I1: 0.583599284487073
Значення інтегралу I2: 0.4799981561179753
Значення інтегралу: 1.06359744060505
Оцінка похибки: 1.27e+15
```

Рис. 2. Результат роботи гібридного алгоритму чисельного інтегрування

Висновки. Розроблений гібридний алгоритм, що поєднує символічні можливості Maple та чисельні методи Python, демонструє високу ефективність у чисельному інтегруванні складних функцій. Використання Maple для попереднього аналізу, спрощення інтегралів та виявлення особливостей значно полегшує подальші чисельні обчислення, зменшуючи похибку та покращуючи точність результатів.

Дослідження показало потенціал міждисциплінарного підходу до вирішення складних обчислювальних задач. Комбінування можливостей різних програмних середовищ відкриває нові перспективи для подальших досліджень у області чисельних методів та їх практичного застосування. Зокрема, інтеграція Maple та Python дозволяє створювати адаптивні алгоритми, які обирають найефективніший метод інтегрування залежно від характеристик функції.

Запропонований алгоритм може бути корисним у широкому спектрі галузей, де потрібне чисельне інтегрування складних функцій, зокрема, у фізиці, інженерії, економіці та інших галузях науки, де висока точність обчислень є критичною. Гнучкість та адаптивність алгоритму роблять його придатним для обробки великих обсягів даних та паралельних обчислень.

Подальші дослідження можуть бути спрямовані на удосконалення гібридного алгоритму, включаючи розробку нових методів інтеграції, оптимізацію обробки великих даних та покращення взаємодії між Maple і Python. Також перспективним є вивчення можливостей застосування запропонованого підходу до інших типів обчислювальних задач, таких як диференціальні рівняння та оптимізаційні проблеми.

Література:

1. Cordero A., Torregrosa J. R., Vassileva M. P. A family of modified Ostrowski's methods with optimal eighth order of convergence. *Applied mathematics letters*. 2011. Vol. 24, no. 12. P. 2082–2086. <https://doi.org/10.1016/j.aml.2011.06.002>.
2. Faires J. D., Burden R. Numerical analysis. 9th ed. Cengage Learning, 2010. 895 p.
3. Gowda S. Symbolic-numeric programming in scientific computing: Massachusetts Institute of Technology, 2024. 117 p.
4. Iravanian S., Gowda S., Rackauckas C. Hybrid Symbolic-Numeric and Numerically-Assisted Symbolic Integration. *Proceedings of the 2024 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*. 2024. P. 410–418.
5. Python guide documentation. Self publishing, 2018. 123 p.
6. Sacco R., Saleri F., Quarteroni A. Numerical mathematics: 37 2007. Springer. 655 p.
7. Software W. M. Maple user manual. [Waterloo, Ont.] : Maplesoft, 2023. 358 p.
8. Symbolic-numeric integration of rational functions / R. H. C. Moir et al. *Numerical algorithms*. 2019. Vol. 83, no. 4. P. 1295–1320. <https://doi.org/10.1007/s11075-019-00726-6>.
9. Symbolic-numeric integration of univariate expressions based on sparse regression / Iravanian S. et al. *ACM Communications in Computer Algebra*. 2022. Vol. 56, no. 2. P. 84–87.
10. Гринько А.Р., Луньова М.В. Використання математичного пакету Maple для аналізу енергії хвиль у тришаровій гідродинамічній системі. *Наукові записки молодих учених*. 2018. № 1. 8 с.
11. Гуртовий Ю.В., Луньова М.В. Використання систем комп'ютерної математики під час вивчення теми «Методи чисельного інтегрування». *Наукові записки. Серія: Педагогічні науки*. 2024. №. 214. <https://doi.org/10.36550/2415-7988-2024-1-214-150-155>

References:

1. Cordero, A., Torregrosa, J. R., & Vassileva, M. P. (2011). A family of modified Ostrowski's methods with optimal eighth order of convergence. *Applied Mathematics Letters*, 24(12), 2082–2086. <https://doi.org/10.1016/j.aml.2011.06.002> [in English].
2. Faires, J. D., & Burden, R. (2010). *Numerical analysis* (9th ed.). Cengage Learning [in English].
3. Gowda, S. (2024). Symbolic-numeric programming in scientific computing. *Massachusetts Institute of Technology* [in English].
4. Iravanian, S., Gowda, S., & Rackauckas, C. (2024). Hybrid Symbolic-Numeric and Numerically-Assisted Symbolic Integration. *Proceedings of the 2024 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*, 410–418 [in English].
5. *Python guide documentation*. (2018). Self publishing [in English].
6. Sacco, R., Saleri, F., & Quarteroni, A. (2007). *Numerical mathematics: 37*. Springer [in English].
7. Software, W. M. (2023). *Maple user manual*. Maplesoft [in English].
8. Moir, R.H.C., Corless, R. M., Maza, M. M., & Xie, N. (2019). Symbolic-numeric integration of rational functions. *Numerical algorithms*, 83(4), 1295–1320. <https://doi.org/10.1007/s11075-019-00726-6> [in English].
9. Iravanian, S. et al. (2022). Symbolic-numeric integration of univariate expressions based on sparse regression. *ACM Communications in Computer Algebra*. 56(2), 84–87 [in English].
10. Hrynko, A.R., & Lunova, M.V. (2018). Vykorystannya matematychnoho paketu Maple dlya analizu enerhiyi khvyl' u trysharoviy hidrodynamichniy systemi [Using the Maple mathematical package for wave energy analysis in a three-layer hydrodynamic system]. *Naukovi zapysky molodykh uchenykh – Scientific notes of young scientists*, 1, 8 p. [in Ukrainian].
11. Hurtovyi, Y., & Lunyova, M. (2024). Vykorystannya system komp'yuternoї matematyky pid chas vyvchennia temy «Metody chyselnoho intehruvannia» [Use of computer mathematics systems when studying the subject "Methods of numerical integration"]. *Naukovi zapysky. Serii: Pedagogichni nauky – Academic Notes Series Pedagogical Science*, 1(214). <https://doi.org/10.36550/2415-7988-2024-1-214-150-155> [in Ukrainian].