Numeryczne oblicznanie całek

Michał Goliński

Elementy metod numerycznych

Plan wykładu

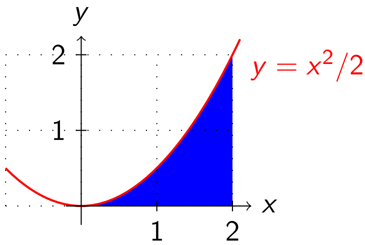
Plan wykładu

Plan wykładu

Plan wykładu

Poznamy metody całkowania numerycznego dla całek funkcji jednej zmiennej:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$



Ważenie

Wyobraźmy sobie, że jesteśmy w stanie w miarę dokładnie narysować wykres całkowanej funkcji. Wtedy możemy wyciąć otrzymany wykres i zakładając, że gęstość papieru jest jednorodna, z użyciem dokładnej wagi otrzymać przybliżenie poszukiwanej całki. Metoda ma w praktyce spory błąd, ale zewzględu na swoją prostotę była naprawdę używana.

Planimetr

Planimetr jest specjalym urządzeniem, które jest w stanie mierzyć powierzchnię. W najczęściej spotykanej wersji składa się z obrotowego ramienia z umieszczonym na nim rysikiem. Rysikiem obiegamy badany kształt. Dzięki elementowi zwanemu kółkiem całkujacym plnimetr jest w stanie zmierzyć pole figury obiegane przez rysik. Dokładnośc zależy od wprawy w używaniu.

Metody Monte-Carlo

Metody Monte-Carlo polegają na zastosowaniu statystki do znalezienia oszacowania poszukiwanej całki. Jako pierwszy na pomysł takiego zastosowania komputerów wpadł polski matematyk Stanisław Ulam pracujący w Stanach nad bombą jądrową i termojądrową.
W najprostszym przypadku metoda polega na losowym wyborze punktów z prostokąta zawierającego figurę, której pole chcemy obliczyć. Mozemy spodziewać się, że gdy liczba punktów będzie duża, to częśc punktów które trafiają do wnętrza figury będzie proporcjonalna do pola tej figury. Oczywiście zawsze możemy mieć pecha, ale prawo wielkich liczb mówi, że nasz intuicja jest poprawna (jeśli liczba punktów dąży do niekończoności, to w granicy dostajemy co trzeba).

Metody Monte-Carlo cd.

Metody Monte-Carlo są szeroko stosowane, nie tylko do przybliżania całek (w tym wielowymiarowych). Ich zaletą jest względna prostota oraz fakt, że dają pewną ilość informacji na wczesnym etapie obliczeń, które można wykorzystac poźniej by poprawić tempo zbieżności (metody adaptacyjne).

Kwadratury

Kwadratury to wzory przybliżające całkę sumą:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = I(f) \cong K(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

W kwadraturze występują tylko wartości funkcji w pewnych punktach i wagi.

Wniosek

Kwadratura (podobnie jak całka) jest funkcjonałem liniowym, tzn. przporządkowuje funkcji liczbę i jest

- *addytywna:* $K(f+g) = K(f) + K(g)$;
- *jednorodna:* $K(af) = aK(f)$, *gdzie* a *to liczba.*

Stąd wynika, że jeżeli $K(f_i) = I(f_i)$ *dla pewnych funkcji* f_i, *to* $K(f) = I(f)$ *dla każdej funkcji* f *z powłoki liniowej funkcji* f_i.

Rząd kwadratury

Definicja

Mówimy, że kwadratura K jest dokładna dla funkcji f, gdy jej wartość dla f jest równa całce

$$K(f) = I(f) \left(= \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \right).$$

Definicja

Mówimy, że kwadratura K jest rzędu n gdy jest dokładna dla wszystkich wielomianów stopnia mniejszego niż n i nie jest dokładna dla pewnego wielomianu stopnia n.

Kwadratury interpolacyjne

Niech f będzie funkcją określoną w przedziale $[a, b]$, którą chcemy całkować. Weźmy $n + 1$ punktów $x_0, x_1, \ldots, x_n$ w przedziale $[a, b]$. Postępujemy następująco:

1. Przybliżamy funkcję f wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a L w wybranych punktach (węzłach).
2. Całka ze znalezionego wielomianu L to przybliżenie szukanej całki z funkcji f.

Okazuje się, że ta procedura prowadzi do wzoru będącego kwadraturą (tzw. kwadraturą interpolacyjną).

Kwadratury interpolacyjne cd.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong \int_a^b L(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)\right) \mathrm{d}x$$
$$= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \underbrace{\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x}_{A_k} = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

Wniosek

Tak skonstruowana kwadratura oparta o $n+1$ węzłów jest rzędu przynajmniej $n+1$, bo z własności interpolacji Lagrange'a wynika, że gdy f jest wielomianem stopnia n, to w powyższej procedurze $L = f$.

Symetria

Normalnie nie będziemy liczyć współczynników A_k jako $\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$. Wzór ten jednak o razu mówi nam, że współczynniki mają pewną symetrię o ile mają ją węzły kwadratury:

Fakt

Niech w powyższym schemacie $x_k = a + b - x_{n-k}$ dla $k = 0, 1, \ldots, n$. Wtedy $A_k = A_{n-k}$.

Symetria cd.

Dowód

Przy powyższych założeniach mamy dla $x \in [a, b]$ i wielomianów bazowych Lagrange'a:

$$l_k(x) = l_{n-k}(b + a - x).$$

Podstawiamy w całce $t = b + a - x$.

$$\begin{aligned} A_k &= \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x \\ &= -\int_b^a l_k(b + a - t)\,\mathrm{d}t = \int_a^b l_{n-k}(t)\,\mathrm{d}t = A_{n-k}. \end{aligned}$$

Podstawienie afiniczne

Załóżmy, że mamy kwadraturę $K(f) \cong \int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$. Wtedy dla całki na dowolnym przedziale $[a, b]$ i funkcji $\phi(x) = a + (b - a)x$ mamy:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{\phi(0)}^{\phi(1)} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 f(\phi(x))\phi'(x)\,\mathrm{d}x \cong (b - a)K(f(\phi)).$$

Powyższy wzór pozwala wyprowadzić wzór dla kwadratury na przedziale $[0, 1]$, a potem przenosić go na dowolny iny przedział. Dla przykładu, poznamy wzór trapezów:

$$\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x \cong \frac{1}{2}\left(f(0) + f(1)\right).$$

Stąd

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong \frac{b-a}{2}(f(a) + f(0)).$$

Kwadratury Newtona-Cotesa

Kwadratury Newtona-Cotesa powstają, gdy w powyższym schemacie weźmiemy punkty **równoodległe**.

Definicja

Zamkniętą kwadraturą Newtona-Cotesa nazywamy kwadraturę powstającą przez przybliżanie wielomianem interpolacyjnym w węzłach

$$a, a+h, a+2h, \ldots, a+nh = b,$$

gdzie $h = \frac{b-a}{n}$.

Kwadratury Newtona-Cotesa cd.

Definicja

Otwartą kwadraturą Newtona-Cotesa nazywamy kwadraturę powstającą przez przybliżanie wielomianem interpolacyjnym w węzłach

$$a+h, a+2h, \ldots, a+(n-1)h$$

gdzie $h = \frac{b-a}{n}$ (czyli jak dla kwadratury zamkniętej, ale pomijamy a i b).

Wyprowadzanie wzorów

Chcemy znaleźć współczynniki dla kwadratury $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ konstruowanej wg schematu z wielomianem Lagrange'a. Najprościej wyprowadzać wzory na kwadratury dla przypadku $[a,b]=[0,1]$. Teoretycznie moglibyśmy całkować wielomiany l_k (odpowiednią bazę Lagrange'a), ale jest to bardzo niepraktyczne. Dużo łatwiej zauważyć, że nasz kwadratura z samej konstrukcji jest dokładna dla wielomianów stopnia co najwyżej n.

Prowadzi to do układu równań ze współczynnikami A_k jako niewiadomymi. Metoda ta nazywa się metodą współczynników nieoznaczonych.

Obliczenia bardzo upraszcza fakt, że współczynniki A_k są symetryczne: $A_k = A_{n-k}$.

Przykład

Dla przykładu znajdziemy wzór na zamkniętą kwadraturę N-C opartą na 4 węzłach. Czyli

$$K(f) = A_0 f(0) + A_1 f(1/3) + A_2 f(2/3) + A_3 f(1).$$

Kwadratura ta jest dokładna dla wielomianów stopnia co najwyżej 3. W szczególności jest dokładna dla funkcji $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$, $f(x) = x^3$.

Przykład cd.

Dostajemy równania:

$$
\begin{aligned}
A_0 + A_1 + A_2 + A_3 &= K(1) = I(1) = \int_0^1 \mathrm{d}x = 1 \\
\frac{1}{3}A_1 + \frac{2}{3}A_2 + A_3 &= K(x) = I(x) = \int_0^1 x\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2} \\
\frac{1}{9}A_1 + \frac{4}{9}A_2 + A_3 &= K(x^2) = I(x^2) = \int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3} \\
\frac{1}{27}A_1 + \frac{8}{27}A_2 + A_3 &= K(x^3) = I(x^3) = \int_0^1 x^3\,\mathrm{d}x = \frac{1}{4}
\end{aligned}
$$

Przykład cd.

Ponieważ wiemy, że $A_2 = A_1$ i $A_0 = A_3$, to z drugiego i trzeciego równania dostajemy:

$$A_0 + A_1 = \frac{1}{2}$$
$$A_0 + \frac{5}{9}A_1 = \frac{1}{3}$$

Stąd $A_0 = A_3 = \frac{1}{8}$ i $A_1 = A_2 = \frac{3}{8}$. Ostatecznie

$$\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x \cong \frac{1}{8}f(0) + \frac{3}{8}f\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{3}{8}f\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{1}{8}f(1).$$

Kwadratury N-C niskich rzędów

Poniższe kwadratury przybliżają $\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$.

wzór	błąd
$\frac{1}{2}f(0)+\frac{1}{2}f(1)$	$-\frac{1}{12}f''(\xi)$
$\frac{1}{6}f(0)+\frac{2}{3}f(1/2)+\frac{1}{6}f(1)$	$-\frac{1}{2880}f^{(4)}(\xi)$
$\frac{1}{8}f(0)+\frac{3}{8}f(1/3)+\frac{3}{8}f(2/3)+\frac{1}{8}f(1)$	$-\frac{1}{6480}f^{(4)}(\xi)$
$\frac{7}{90}f(0)+\frac{32}{90}f(1/4)+\frac{12}{90}f(1/2)+\frac{32}{90}f(3/4)+\frac{7}{90}f(1)$	$-\frac{1}{1935360}f^{(6)}(\xi)$

Kwadratury wysokich rzędów, kwadratury złożone

Teoretycznie moglibyśmy obliczyć potrzebne współczynniki dla kwadratur N-C dowolnie dużego rzędu. W praktyce nie są one używane. Od pewnego momentu częśc współczynników jest ujemna, co powoduje błędy w obliczeniach numerycznych. Ponadto, podobnie jak przy interpolacji nie jest prawdą, że nawet bez błędów numerycznych błąd kwadratur N-C dąży do 0 przy zwiększaniu liczby punktów.

Znacznie lepszym rozwiązaniem są tzw. kwadratury złożone – dzielimy przedział całkowania na małe, równe podprzedziały, a na każdym z nich stosujemy wzór N-C niskiego rzędu. Tutaj błąd dąży do zera (przynajmniej w teorii) wraz ze wzrostem liczby podprzedziałów.

Kwadratury złożone

Dla przykładu wyprowadzimy wzór na złożoną kwadraturę trapezów. Zgodnie ze wzorem na podstawianie mamy, że prosta kwadratura trapezów wygląda następująco:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)).$$

Aby obliczyć całkę z użyciem kwadratury złożonej, weźmy $n \in \mathbb{N}$. Dla podprzedziałów długości $h = \frac{b-a}{n}$ mamy:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong \sum_{k=1}^{n} \frac{h}{2}(f(a+(k-1)h)+f(a+kh))$$
$$= h\left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + \frac{f(b)}{2}\right).$$

Wprowadzenie

We wzorze kwadratury $K(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ dysponujemy $2(n+1)$ stopniami swobody: $n+1$ współczynników A_k i $n+1$ węzłów x_k. W kwadraturach N-C ustaliliśmy węzły równoodległe i dostaliśmy kwadraturę dokładną dla wielomianów stopnia n. Okazuje się, że przy odpowiednim wyborze węzłów kwadratura może być dokładna dla wielomianów do stopnia $2n+1$. Kwadratury te tzw. kwadratury Gaussa.

Przyjrzymy się ogólniejszemu zagadnieniu niż obliczenie całki. Niech w będzie funkcją ciagłą i dodatnią, tzw. wagą. Spróbujemy znaleźć kwadraturę $K(f)$ przybliżającą całkę

$$\int_a^b f(x)w(x)\,\mathrm{d}x.$$

Klasyczne przypadki to:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \quad \text{kwadratury Gaussa-Legandre'a}$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \quad \text{kwadratury Gaussa-Czebyszewa}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad \text{kwadratury Gaussa-Hermite'a}$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)e^{-x}\,\mathrm{d}x \quad \text{kwadratury Gaussa-Laguerre'a}$$

Twierdzenie

Niech q *będzie wielomianem stopnia* $n+1$ *takim, że dla każdego wielomianu* p *stopnia co najwyżej* n *mamy:*

$$\int_a^b q(x)p(x)w(x)\,\mathrm{d}x = 0.$$

Jeśli $x_0, x_1, \ldots, x_n$ *są zerami wielomianu* q*, to kwadratura interpolacyjna* $K(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ *oparta na tych punktach jest dokładna dla wszystkich wielomianów stopnia nie większego niż* $2n+1$*. Kwadraturę tę nazywamy kwadraturą Gaussa.*

Uwaga

Można pokazać, że q *ma rzeczywiście* $n+1$ *różnych pierwiastków w przedziale* (a, b)*.*

Dowód

Niech f będzie dowolnym wielomianem stopnia $2n+1$. Dzielimy f przez q z resztą: $f = qp + r$. Wtedy p i r są stopnia co najwyżej n oraz $f(x_k) = r(x_k)$. Ponieważ kwadratura interpolacyjna jest zawsze dokładna dla wielomianów stopnia nie większego niż n, mamy:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)w(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a^b (q(x)p(x) + r(x))w(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_a^b r(x)w(x)\,\mathrm{d}x = K(r) = K(f),\end{aligned}$$

gdzie ostatnia równośc wynika z faktu, że K bierze pod uwagę tylko wartości w punktach x_k.

Fakt

Współczynniki kwadratury Gaussa są zawsze liczbami dodatnimi.

Dowód

Zadanie domowe.

Wielomiany ortogonalne

Pozostaje znaleźć nam wielomian q spełniający warunki twierdzenia. Zauważmy, że

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)w(x)\,\mathrm{d}x$$

jest iloczynem skalarnym na przestrzeni funkcji ciągłych (generuje przestrzeń Hilberta oznaczaną $L_2(w)$).
W tej przestrzeni możemy przeprowadzić ortogonalizację Grama-Shmidta startując od ciągu

$$1, x, x^2, x^3, \ldots.$$

Otrzymany ciąg wielomianów nazywamy wielomianami ortogonalnymi. Wielomiany te mają wiele interesujących własności i w wielu przypadkach zostały *explicite* obliczone.

Wielomiany ortogonalne cd.

Dla $w(x) = 1$ na przedziale $[-1, 1]$ wielomiany ortogonalne nazywamy wielomianami Legendre'a. Kilka pierwszych to:

$$p_0(x) = 1$$
$$p_1(x) = x$$
$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$
$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$
$$p_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$$
$$p_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{5}{21}x$$

Dla przykładu wielomian $p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$ ma pierwiastki $\pm\sqrt{3/5}$ i 0. Proste rachunki pozwalają obliczyć potrzebne współczynniki i prowadzą do kwadratury:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \cong \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right).$$