المكاملة العددية
Lab Work

قسم الفيزياء
كلية العلوم الدقيقة
جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي

السنة أولى
ماستر فيزياء
2022-2023

Becer Zoubir

تهدف هذه التطبيقات لتعلم برمجة طرق المكاملة العددية الشائعة في بعد واحد او ابعاد متعددة. بالتحديد هذه الطرق هي: قاعدة المستطيلات الأمامية Forward Rectangles قاعدة المستطيلات الخلفية Backward Rectangles قاعدة شبه المنحرف Trapezoidal Rule قاعدة النقطة الوسطية Midpoint Rule قاعدة سيمبسون Simpson Rule قاعدة تربيعات غوص Gauss Quadrature .

ملخص طرق المكاملة في بعد واحد

تعطي هذه الطرق حسابا تقريبيا للتكاملات من الشكل:

$$S = \int_a^b f(x)\, dx.$$

حيث $f(x)$ دالة حقيقية للمتغير الحقيقي x معرفة على المجال المغلق $[a, b]$ ومعطاة إما في شكلها الرياضي الصريح او في شكل قيم منفصلة $[x_n,\ f(x_n)]$ مرصودة في جدول. يمكن كتابة هذا التكامل في شكل مجموع تكاملات جزئية بتقسيم المجال $[a, b]$ الى مجالات جزئية عددها N وعليه نكتب:

$$S = \int_a^b f(x)\, dx = \sum_{n=1}^{N} S_n\ ; \quad S_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\, dx\ ; \quad x_{n+1} = x_n + \Delta x_n;\ \Delta x_n = x_{n+1} - x_n; x_1 = a.$$

قاعدة المستطيلات الأمامية Forward Rectangles

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n\ ; \quad S_n = f(x_n)\Delta x_n\ ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n;\ x_{n+1} = x_n + \Delta x_n;\ x_1 = a.$$

في حالة ما اذا كانت الخطوة $\Delta x_n = \Delta x$ ثابتة تأخذ عبارة التكامل الصورة التالية:

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n\ ; \quad S_n = f(x_n)\Delta x\ ; \quad \Delta x = \frac{b-a}{N};\ x_n = a + (n-1)\Delta x.$$

المستطيلات الخلفية Backward Rectangles

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n\ ; \quad S_n = f(x_{n+1})\Delta x_n\ ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n;\ x_{n+1} = x_n + \Delta x_n;\ x_1 = a.$$

قاعدة شبه المنحرف Trapezoidal Rule

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n \; ; \quad S_n = \frac{f(x_n) + f(x_{n+1})}{2} \Delta x_n \; ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n ; \; x_{n+1} = x_n + \Delta x_n ; \; x_1 = a .$$

قاعدة النقطة الوسطية Midpoint Rule

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n \; ; \quad S_n = f(x_{n+\frac{1}{2}}) \Delta x_n \; ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n ; \; x_{n+\frac{1}{2}} = x_n + \frac{1}{2} \Delta x_n ; \; x_1 = a .$$

قاعدة سيمبسون بخطوة واحدة One Step Simpson Rule

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n \; ; \quad S_n = \frac{f(x_n) + 4 f(x_{n+\frac{1}{2}}) + f(x_{n+1})}{6} \Delta x_n \; ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n ; \; x_{n+1} = x_n + \Delta x_n ; \; x_1 = a .$$

قاعدة سيمبسون بخطوتين Two Steps Simpson Rule

هذه القاعدة تستخدم خطوتين متتاليتين ولاشتقاق علاقة بسيطة لها يشترط ثبات الخطوة وان يكون عدد التقسيمات N زوجي.

$$S = \sum_{n=1}^{N/2} S_n \; ; \quad S_n = \frac{f(x_{2n-1}) + 4 f(x_{2n}) + f(x_{2n+1})}{3} \Delta x \; ; \quad \Delta x = \frac{b-a}{N} ; \; x_n = a + (n-1) \Delta x .$$

قاعدة تربيعات غوص Gauss Quadrature.

$$S = \sum_{n=1}^{N} S_n \; ; \quad S_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\, dx = \sum_{m=1}^{M} \omega_m f(x_m) \; ;$$

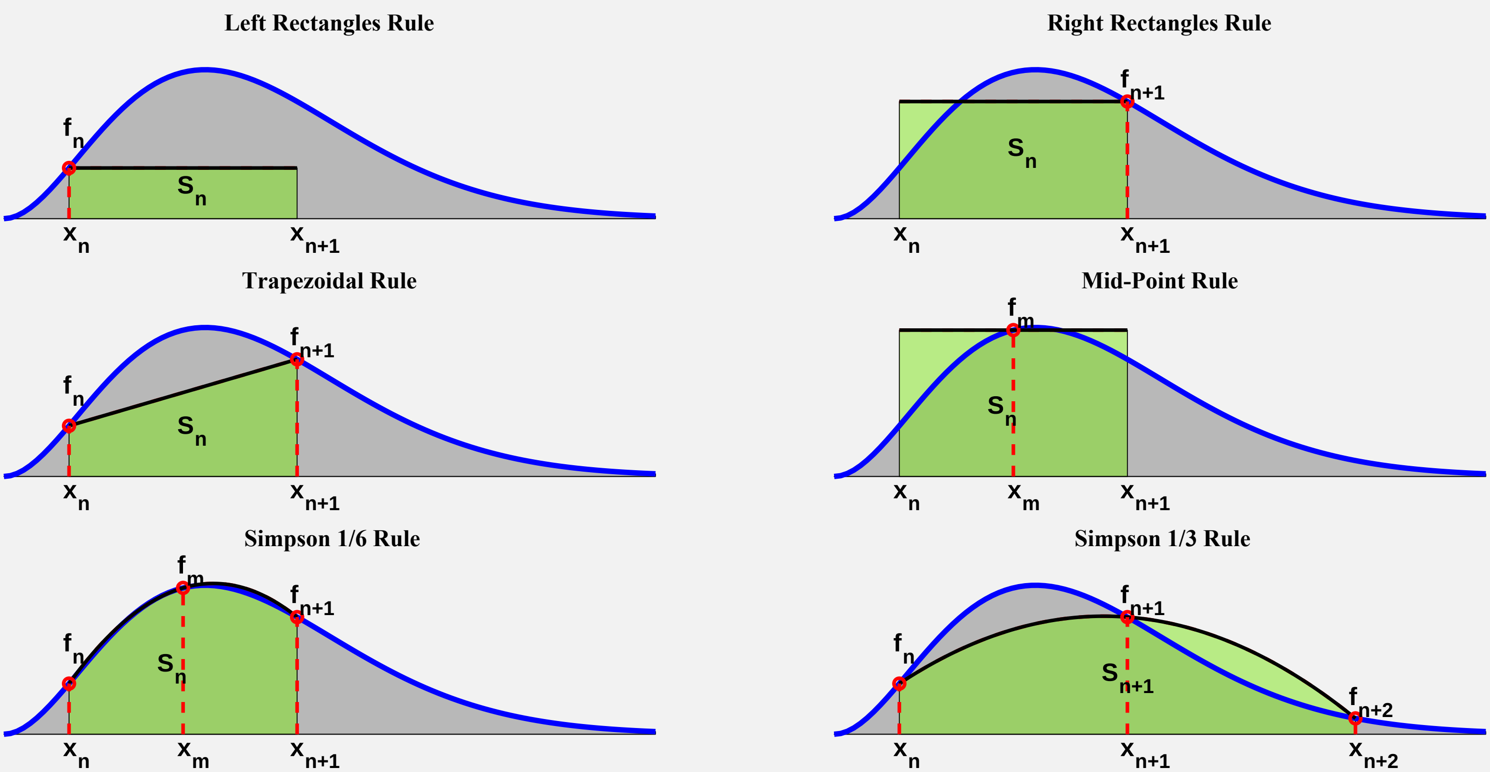
هذه القاعدة تحسب التكامل باستخدام جمع موزون لنقاط معاينة $(x_m; \quad m = 1, ..., M)$ محددة بعناية داخل كل مجال عنصري او على كامل المجال ولهذه النقاط كذلك اوزان مقابلة w_m محددة بذكاء تجعل من هذا الجمع يساوي القيمة الحقيقية لتكامل كثيرات الحدود من الدرجة $2M - 1$.اذا كان للدالة المكاملة شكل مقارب جدا لكثير حدود من الدرجة $2M - 1$ فإن هذا الجمع يأخذ افضل قيمة له. عادة ما يفضل في هذه الطريقة التعبير عن التكامل على الحدود العامة a و b او x_n و x_{n+1} بدلالة تكامل على حدود ثابتة بين -1 و $+1$. يتم تحقيق ذلك عن طريق إستخدام التحول الخطي التالي: $x = \alpha t + \beta$. لاحظ ان اشتراط $x = x_n$ عند $t = -1$ و $x = x_{n+1}$ عند $t = +1$ يفضيا الى $\alpha = (x_{n+1} - x_n)/2 = \Delta x_n/2$ و $\beta = (x_{n+1} + x_n)/2$. وعليه يأخذ التكامل العنصري S_n الشكل التالي

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x) dx = \frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n) \int_{-1}^{1} f \left[\frac{x_{n+1} - x_n}{2} t + \frac{x_n + x_{n+1}}{2} \right] dt = \frac{\Delta x_n}{2} \int_{-1}^{1} F(t) dt$$

حيث $F(t) = f\left[(x_{n+1}-x_n)t/2 + (x_n+x_{n+1})/2\right]$.
ادى تطبيق هذه الطريقة على المجال $[-1,1]$ الى نقاط t_m واوزان على المجال رصدت في جداول حسب عدد النقاط المختار M. لتوضيف هذه النقاط على المجال المعطى نستخدم التحويل الخطي السابق والذي يفضي للنتائج النهائية التالية:

$$\boxed{\begin{array}{l} S = \sum_{n=1}^{N} S_n \; ; \quad S_n = \dfrac{\Delta x_n}{2} \sum_{m=1}^{M} \omega_m f(x_m) \; ; \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n ; x_{n+1} = x_n + \Delta x_n ; \; x_1 = a ; \\ x_m = \dfrac{\Delta x_n}{2} t_m + x_{n+\frac{1}{2}} . \end{array}}$$

من أجل عدد نقاط M تقرأ القيم t_m وأوزانها الموافقة ω_m من جداول معطاة وتوظف مباشرة في الجمع الموزون السابق.



جدول ١: وسائط طريقة مستطيلات غوص.

M	t_m	w_m	الرتبة (Order)
2	$-1/\sqrt{3}$	1	3
	$1/\sqrt{3}$	1	
3	$-\sqrt{0.6}$	$5/9$	5
	0	$8/9$	
	$\sqrt{0.6}$	$5/9$	
4	-0.8611363116	0.3478548451	7
	-0.3399810436	0.6521451549	
	0.3399810436	0.6521451549	
	0.8611363116	0.3478548451	

$f(x)$	x_1	x_2	x_3	x_4
f_1	0.864331647570159	1.910375697429960	2.995183148739897	4.124262867199374
f_2	1.064072410739394	2.134268270179443	3.259613531562442	4.451602992306452
f_3	0.941160951789604	2.018533384802922	3.163689318396373	4.394380597988114

ملخص طرق المكاملة في ابعاد متعددة

يمكن تعميم طرق المكاملة العددية في بعد واحد الى بعدين او اكثر. للتسهيل نعرض في ما يلي طريقة النقطة الوسطية في بعدين لحساب التكاملات من الشكل:

$$S = \int_{a_1}^{b_1}\int_{a_2}^{b_2} f(x,y)\, dxdy.$$

قاعدة النقطة الوسطية في بعدين Midpoint Rule

في هذه الطريقة يقسم مجال التكامل الى خلايا مستطيلة عن طرق تقسيم كل اتجاه عددا من التقسيمات Nx و Ny مثلا قد تكون منتظمة او غير منتظمة. في الحالة المنتظمة تصبح مساحة كل خلية مساوية الى $\frac{b_y-a_y}{Ny} \times \frac{b_x-a_x}{Nx}$ بهذا يصبح التكامل عبارة عن مجموع تكاملات على الخلايا العنصرية:

$$S = \sum_{n=1}^{N_x}\sum_{m=1}^{N_y} S_{n,m};\ S_{n,m} = \int_{x_n}^{x_{n+1}}\int_{y_m}^{y_{m+1}} f(x,y)dxdy$$
$$S = \sum_{n=1}^{N_x}\sum_{m=1}^{N_y} S_{n,m}\ ; \quad S_{n,m} \approx f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{m+\frac{1}{2}})\Delta x_n \Delta y_m$$
$$\Delta x_n = x_{n+1} - x_n;\ \ x_{n+\frac{1}{2}} = x_n + \frac{1}{2}\Delta x_n;\ \ x_1 = a_x.$$
$$\Delta y_m = y_{m+1} - y_m;\ \ y_{m+\frac{1}{2}} = y_m + \frac{1}{2}\Delta y_m;\ \ y_1 = a_y.$$

في حالة ما اذا كانت التقسيمات متساوية في كل اتجاه تأخذ عبارة التكامل الصورة التالية:

$$S = \sum_{n=1}^{N_x}\sum_{m=1}^{N_y} S_{n,m}\ ; \quad S_{n,m} = f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{m+\frac{1}{2}})\Delta x \Delta y$$
$$\Delta x = x_{n+1} - x_n;\ \ x_{n+\frac{1}{2}} = a_x + (n - \frac{1}{2})\Delta x.$$
$$\Delta y = y_{m+1} - y_m;\ \ y_{m+\frac{1}{2}} = a_y + (m - \frac{1}{2})\Delta y.$$

بالتعميم الى d بعد وبخطوات Δ متساوية في جميع الاتجاهات نجد

$$S = \Delta^d \sum_{n_1=1}^{N_1}\cdots\sum_{n_d=1}^{N_d} S_{n_1,\cdots,n_d}\ ; \quad S_{n_1,\cdots,n_d} = f(x_{n_1+\frac{1}{2}}, \cdots, x_{n_d+\frac{1}{2}})$$
$$\Delta x = x_{n+1} - x_n;\ \ x_{n+\frac{1}{2}} = a + (n - \frac{1}{2})\Delta;\ \ n = n_1 : n_d$$

تقدير الخطأ

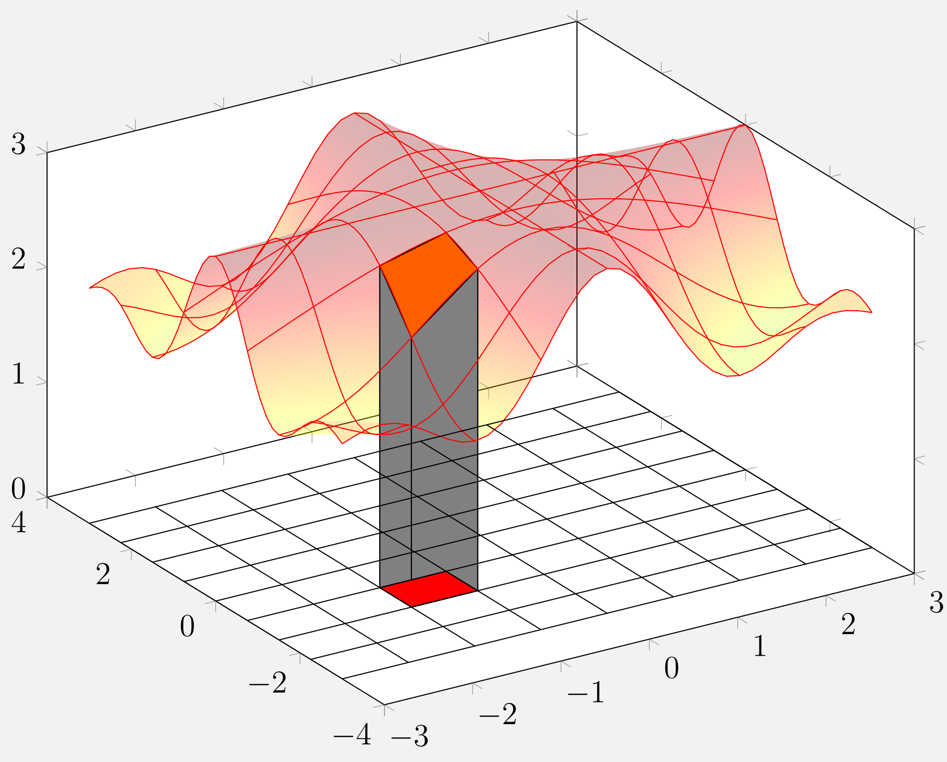
نحسب اولا الخطا المحلي ثم المطلق بالعلاقتين:

$$\epsilon = \sum_{n=1}^{N_x}\sum_{m=1}^{N_y}\epsilon_{n,m};\ \epsilon_{n,m} = \int_{x_n}^{x_{n+1}}\int_{y_m}^{y_{m+1}} f(x,y)dxdy - f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{m+\frac{1}{2}})\Delta x_n \Delta y_m$$

$$x_{n+\frac{1}{2}} = \widetilde{x}_n = x_n + \frac{1}{2}\Delta x_n.$$

$$y_{m+\frac{1}{2}} = \widetilde{y}_m = y_m + \frac{1}{2}\Delta y_m.$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{n,m} &= \int_{x_n}^{x_{n+1}}\int_{y_m}^{y_{m+1}} f(x,y)dxdy - f(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m)\Delta x_n\Delta y_m\\ &= \int_{x_n}^{x_{n+1}}\int_{y_m}^{y_{m+1}} dxdy\left\{f(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m) + (x-\widetilde{x}_n)f_x(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m) + \frac{(x-\widetilde{x}_n)^2}{2!}f_{xx}(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m)\right.\\ &+ (y-\widetilde{y}_m)f_y(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m) + \frac{(y-\widetilde{y}_m)^2}{2!}f_{yy}(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m)\\ &\left.+(x-\widetilde{x}_n)(y-\widetilde{y}_m)f_{xy}(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m) + \ldots\right\} - f(\widetilde{x}_n,\widetilde{y}_m)\Delta x_n\Delta y_m.\end{aligned}$$



العمل التطبيقي

ليكن التكامل التالي:

$$\boxed{S = \int_0^1 x^2\, dx.}$$

1. احسب رياضيا القيمة الفعلية لهذا التكامل.
2. اكتب برنامج فورترون لحساب قيمة التكامل المعطى بطرق المكاملة السابقة باستخدام عدد تقسيمات $N = 10$.
3. اعد برمجة البرنامج باستخدلم برامج جزئية من نوع `function`
4. قارن بين دقة هذه الطرق من اجل نفس عدد التقسيمات $N = 10$.
5. عدل في البرنامج السابق ليحسب البرنامج الخطأ بدلالة عدد التقسيمات $N = 2^k$ حيث يأخذ k القيم $1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11$.
6. بين ان الخطأ يتغير اما وفقا لـ $1/N$ او $1/N^2$ او $1/N^3$ حسب الطريقة المختارة وذلك عن طريق رسم الاخطاء بدلالة عدد التقسيمات باستخدام برنامج للرسم متوفر لك.

لنعتبر الان التكامل التالي:

$$\boxed{S = \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} xy \sin(xy) dx\, dy.}$$

1. اعتمادا على البرنامج السابق اكتب برنامج فورترون لحساب قيمة التكامل المعطى بطريقة النقطة الوسطية باستخدام عدد تقسيمات $N_x = N_y = N = 40$ لكل اتجاه.
2. عدل في البرنامج لحساب حجم كرة نصف قطرها $R = 1$ في $d = 10$ ابعاد باستخدام $N = 300$ لكل اتجاه.
3. بين ان الخطأ يتغير وفقا لـ $1/N$ من اجل عدد تقسيمات $N_x = N_y = N = 2^k$ و $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. يعطي حجم كرة نصف قطرها R في d بعد بالعلاقة:

$$\boxed{\begin{aligned} V_d &= \int_{x_1^2+\ldots+x_d^2 \leq R^2} dx_1 \ldots dx_d \\ &= 2\int dx_1 \ldots dx_{d-1} \sqrt{R^2 - x_1^2 - \ldots - x_{d-1}^2} \\ &= \int_{x_1^2+\ldots+x_d^2 \leq R^2} r^{d-1} dr d\Omega_{d-1} \\ &= \frac{R^d}{d} \int d\Omega_{d-1} \\ &= \frac{R^d 2\pi^{\frac{d}{2}}}{d\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \end{aligned}}$$

$$\boxed{\Gamma(1) = 1, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \Gamma(n+1) = n\Gamma(n)}$$

وسطحها بالعلاقة

$$\boxed{\begin{aligned} S_{d-1} &= \int_{x_1^2+\ldots+x_d^2 = R^2} dx_1 \ldots dx_d \\ &= R^{d-1} \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}. \end{aligned}}$$

4. ارسم لوغاريتم القيمة المطلقة للخطأ المطلق (الكلي) بدلالة لوغاريتم N.

5. اعد برمجة البرنامج باستخدام الميزة التراجعية للدالة المكاملة باستخدام التعليمة: `recursive` والشكل التراجعي لعبارة الحجم

$$\begin{aligned}
V_d &= \int_{-R}^{+R} dx_d \int_{x_1^2+\ldots+x_{d-1}^2 \leq R^2-x_d^2} dx_1 \ldots dx_{d-1} \\
&= \int_{-R}^{+R} dx_d \int_0^{\sqrt{R^2-x_d^2}} r^{d-2} dr \int d\Omega_{d-2} \\
&= \frac{V_{d-1}}{R^{d-1}} \int_{-R}^{+R} dx_d \left(R^2 - x_d^2\right)^{\frac{d-1}{2}} .
\end{aligned}$$

6. احسب حجوم الكرات في الابعاد $d = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$ وقارنها بالقيم الحقيقية الموافقة.