

Metody numeryczne

Wykład nr 9

Całkowanie numeryczne

Aneta Wróblewska

UMCS, Lublin

May 6, 2024

- **Całkowanie numeryczne**, znane również jako **kwadratura numeryczna**, ma na celu znajdowanie przybliżonej wartości całek oznaczonych, zwłaszcza kiedy analityczne rozwiązania są trudne lub niemożliwe do uzyskania.
- Głównym celem jest obliczenie obszaru pod krzywą funkcji, co odpowiada sumowaniu nieskończenie małych prostokątów pod krzywą.
- Umożliwia efektywne i skuteczne rozwiązywanie problemów w inżynierii i naukach przyrodniczych, gdzie bezpośrednie metody są niepraktyczne.

- **Całkowanie numeryczne** to metoda obliczania przybliżonej wartości całki za pomocą dyskretnych sum.
- **Kwadratura** – tradycyjny termin używany w całkowaniu numerycznym, odnosi się do procesu obliczania wartości całek jednowymiarowych. Dwu- i wielowymiarowe całkowania nazywane są czasami **kubaturami**, choć nazwa kwadratura odnosi się również do całkowania w wyższych wymiarach.
- **Błąd całkowania numerycznego**: różnica między wartością przybliżoną a dokładną wartością całki.

Zastosowania całkowania numerycznego

- Całkowanie numeryczne jest stosowane w wielu dziedzinach, takich jak fizyka, inżynieria, ekonomia i finanse, do modelowania i symulacji systemów fizycznych, ekonomicznych i biologicznych.
- Jest niezbędne w przypadkach, gdzie nie można uzyskać rozwiązania analitycznego, np. w dynamice płynów, optyce czy w metodach elementów skończonych.
- Używane także do obliczania wartości oczekiwanych, prawdopodobieństw i innych parametrów statystycznych.

- **Metoda prostokątów:** najprostsza forma kwadratury, wykorzystuje sumę prostokątów do aproksymacji obszaru pod krzywą.
- **Metoda trapezów:** ulepszona metoda prostokątów, sumuje obszary trapezów zamiast prostokątów.
- **Metoda Simpsona:** używa parabol do aproksymacji obszaru pod krzywą, znacznie zwiększając dokładność w porównaniu do metody trapezów.
- Metody te są łatwe do implementacji i mogą być adaptowane do złożonych problemów całkowania.

W tym wykładzie zapoznamy się z podstawowymi metodami przybliżonego obliczania całek oznaczonych funkcji jednej zmiennej, tj. całek postaci

$$I = \int_a^b f(x)$$

Będziemy zakładać, że funkcja f jest przynajmniej ciągła w domkniętym przedziale $[a, b]$ (oznacza to automatycznie, że funkcja f jest ograniczona w tym przedziale).

- Funkcja pierwotna $F(x)$ funkcji $f(x)$ jest funkcją spełniającą warunek

$$F'(x) = f(x).$$

- Jeśli $F(x)$ jest funkcją pierwotną funkcji $f(x)$, to $F(x) + C$, gdzie C jest dowolną stałą, też jest funkcją pierwotną funkcji $f(x)$.

Klasa takich funkcji pierwotnych jest całką nieoznaczoną funkcji $f(x)$:

$$\int f(x) dx = F(x) + C.$$

- Przypomnijmy, że funkcjami elementarnymi są funkcje: stałe, potęgowe, wykładnicze, logarytmiczne, trygonometryczne i cyklometryczne oraz wszystkie funkcje otrzymane z nich za pomocą skończonej ilości działań arytmetycznych bądź działań składania funkcji.

Przykłady funkcji pierwotnych

- Funkcje pierwotne mogą nie być funkcjami elementarnymi. Na przykład:

$$F(x) = \int e^{-x^2} dx,$$

$$G(x) = \int \frac{\sin x}{x} dx,$$

$$H(x) = \int \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx$$

nie są funkcjami elementarnymi, mimo że funkcje podcałkowe są elementarne.

- Całka oznaczona funkcji $f(x)$ w granicach od a do b jest liczbą

$$\int_a^b f(x) dx = F(x) \Big|_a^b = F(b) - F(a),$$

gdzie $F(x)$ jest dowolną funkcją pierwotną funkcji $f(x)$.

- Zauważmy, że

$$\int_a^x f(t) dt = F(x)$$

jest pewną funkcją pierwotną funkcji $f(x)$.

Rozwinięcie funkcji podcałkowej w szereg potęgowy

Rozwinięcie funkcji podcałkowej w szereg potęgowy

Problem obliczenia całki można rozwiązać przez rozwinięcie funkcji w szereg potęgowy.

Przykład

Znajdźmy całkę z funkcji e^{-x^2} . Mamy rozwinięcie funkcji eksponencjalnej w szereg potęgowy:

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

dla $x \in (-1, 1)$. Zatem:

$$e^{-x^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{n!}.$$

Stąd:

$$\int e^{-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{(-1)^n x^{2n}}{n!} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)n!},$$

$$\int e^{-x^2} dx \approx \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m x^{2m+1}}{(2m+1)m!}.$$

m musi być dostatecznie duże, aby błąd był dostatecznie mały.

Wartości funkcji $F(x)$

Niech

$$F(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

W poniższej tabeli podane są wartości funkcji $F(x)$ danej wzorem (2) dla argumentów $x = 0.1, 0.2, \dots, 1.0$, obliczone w kolejnych kolumnach programem Maxima oraz według wzoru (1) dla $m = 2$ i dla $m = 3$.

x	Maxima	$m = 2$	$m = 3$
0.1	0.0997	0.0998	0.0998
0.2	0.1974	0.1981	0.1981
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
1.0	0.7468	0.7667	0.7429

Kwadratury interpolacyjne

Kwadratury interpolacyjne

Metody Newtona-Cotesa – zbiór metod numerycznych całkowania, zwanego również kwadraturą.

- Dana jest funkcja $f(x)$ ciągła i ograniczona w przedziale $[a, b]$.
- Przedział $[a, b]$ dzielimy na skończoną liczbę podprzedziałów - kolejne punkty na osi OX:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_i < x_{i+1} < \dots < x_n = b$$

gdzie $i = 0, 1, \dots, n$.

- Zwykle punkty te rozmieszczone są równomiernie:
 $h = x_{i+1} - x_i = \text{const.}$ W takim wypadku $h = \frac{b-a}{n}$. Dla węzłów nierówno oddalonych od siebie mają zastosowanie inne wzory np. kwadratura gaussowska.
- $$\int_{x_0=a}^{x_n=b} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \quad (1)$$

Interpolacyjne przybliżenie całki

- Poszczególne składniki sumy oznaczmy sobie przez σ_i :

$$\sigma_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

- Istotą metody kwadratur interpolacyjnych jest przybliżenie funkcji $f(x)$ w przedziale $[x_i, x_{i+1}]$ (lub odpowiednio poszerzonym) wzorem interpolacyjnym. Stąd:

$$\sigma_i \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} W(x) dx$$

gdzie $W(x)$ jest wielomianem interpolacyjnym.

Interpolacja Lagrange'a w całkowaniu numerycznym

Jeżeli mamy zdefiniowany zestaw równoodległych węzłów interpolacji:

$$a = x_0 < x_1 < x_2, \dots, < x_{n-1} < x_n = b$$

dla funkcji $f(x)$, gdzie x_i są punktami, w których znamy wartości $f(x_i) = y_i$, to całkę:

$$\int_a^b f(x) dx$$

można przybliżyć przez:

$$\int_a^b L_n(x) dx$$

gdzie $L_n(x)$ jest wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a stopnia co najwyżej n , aproksymującym funkcję $f(x)$ w węzłach interpolacji, tj.:

$$L_n(x_0) = y(x_0), L_n(x_1) = y(x_1), \dots, L_n(x_n) = y(x_n)$$

Interpolacja Lagrange'a w całkowaniu numerycznym

Niech $h_n = \frac{b-a}{n}$ będzie długością kroku dzielącą dwa węzły interpolacji. Wprowadzając zmienną pomocniczą t , tak że $x = a + th$, można zapisać:

$$\lambda_i(x) = \lambda_i(a + th) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{t - j}{i - j} = g(t).$$

Interpolacja Lagrange'a w całkowaniu numerycznym

Wtedy przybliżenie całki daje się zapisać jako:

$$\int_a^b L_n(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot \lambda_i(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot \int_a^b \lambda_i(x) dx$$

$$x = a + t \cdot h, \quad f(x_i) = f(a + i \cdot h), \quad x_i = a + i \cdot h$$

Interpolacja Lagrange'a w całkowaniu numerycznym

Zmieniając zmienną oraz granice całkowania, otrzymujemy:

$$\int_a^b L_i(x) dx = h \cdot \int_0^n g(t) dt.$$

Ostatecznie, korzystając z aproksymacji Newtona-Cotesa dla $n + 1$ równoodległych węzłów:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot h \cdot \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{t-j}{i-j} dt.$$

Wyróżniamy dwa główne rodzaje wzorów Newtona-Cotesa:

- **Otwarte**, które pomijają wartości funkcji w skrajnych punktach przedziału.
- **Zamknięte**, które uwzględniają wartości funkcji we wszystkich punktach, włącznie ze skrajnymi.

Zamknięty wzór Newtona-Cotesa

Dla zamkniętego wzoru Newtona-Cotesa rzędu n :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

gdzie $x_i = h \cdot i + x_0$, a $h = \frac{x_n - x_0}{n}$, i w_i to wagi uzyskane z wielomianów bazowych Lagrange'a.

Przykładami wzoru zamkniętego są wzory metody trapezów i Simpsona.

Otwarty wzór Newtona-Cotesa

Dla otwartego wzoru Newtona-Cotesa rzędu n :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} w_i f(x_i)$$

Wagi są wyznaczone podobnie jak w przypadku zamkniętego wzoru.

Przykładem wzoru otwartego jest wzory metody prostokątów.

Zastosowania i błędy wzorów Newtona-Cotesa

Wzory te umożliwiają przybliżenie wartości całki na podstawie wartości funkcji w dyskretnych punktach. Dokładność wzoru zależy od rzędu użytego wzoru oraz od rozmiaru kroku h . Błąd przybliżenia maleje z mniejszym krokiem h .

Wzory Newtona-Cotesa mogą być stosowane zarówno w formie otwartej, jak i zamkniętej, w zależności od dostępności danych w skrajnych punktach przedziału. Przy odpowiednim doborze kroku h i liczby podprzedziałów, można efektywnie przybliżyć wartość całki określonej funkcji.

Metoda prostokątów

Metoda prostokątów

Jeśli $W(x) = f(x_i)$ dla $x \in [x_i, x_{i+1}]$, funkcję podcałkową $f(x)$ przybliżamy wzorem interpolacyjnym ograniczonym do pierwszego składnika.

Oznacza to zastąpienie funkcji $f(x)$ na odcinku $[x_i, x_{i+1}]$ linią poziomą o wartości y_i . W przypadku węzłów równoodległych mamy zazwyczaj $y_i = f(x_i + h/2)$

Dla przybliżenia mamy:

$$\sigma_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} y_i dx$$

Obliczając wartość całki:

$$\sigma_i \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} y_i dx = [y_i x]_{x_i}^{x_{i+1}} = y_i(x_{i+1} - x_i) = y_i h$$

Otrzymujemy zatem:

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=0}^{n-1} y_i$$

Przybliżona wartość całki jest sumą prostokątów, odpowiadającą sumie prostokątów o podstawie h i wysokości y_i .

Metoda prostokątów - przykład

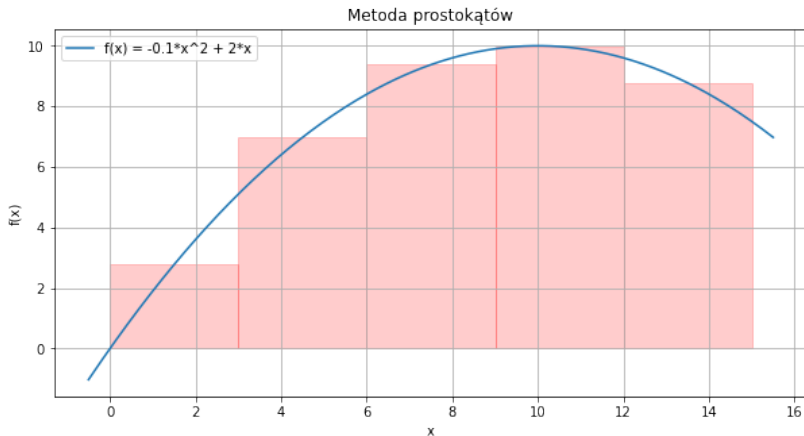
Dana jest funkcja

$$f(x) = -0.1x^2 + 2x$$

Obliczmy wartość całki oznaczonej w przedziale $[0, 15]$ metodą prostokątów, dzieląc przedział na odcinki długości 3.

Uzyskujemy w ten sposób wartość całki równą 113.625. Dokładny wynik to 112.5.

Metoda prostokątów - przykład



Metoda trapezów

Metoda trapezów polega na przybliżeniu funkcji podcałkowej wzorem interpolacyjnym z dokładnością do dwóch pierwszych składników:

- $W(x) = f(x_i) + q\Delta y_i$, gdzie Δy_i to różnica skończona pierwszego rzędu.
- Oznacza to aproksymację prostą przechodzącą przez punkty $(x_i, f(x_i))$, $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$.

Wyprowadzenie wzoru sprowadza się to do policzenia powierzchni trapezu o podstawach $f(x_i)$, $f(x_{i+1})$ i wysokości h :

$$\sigma_i = \frac{1}{2}h(y_{i+1} + y_i)$$

Sumując kolejne pola σ_i dla całego przedziału $[a, b]$ otrzymujemy:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}h \sum_{i=0}^{n-1} (y_{i+1} + y_i) = h \left[\frac{1}{2}(y_0 + y_n) + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right]$$

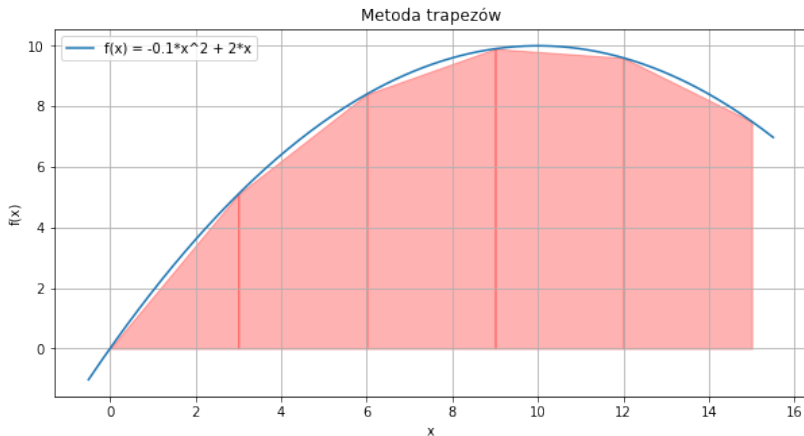
Przybliżona wartość całki jest sumą trapezów.

Powyższy wzór jest dokładny, jeżeli f jest wielomianem stopnia co najwyżej pierwszego. W innych przypadkach błąd przybliżenia wynosi:

$$\delta = \frac{1}{12} |f''(\xi)| (b - a)^3,$$

gdzie ξ jest pewną liczbą z przedziału (a, b) , zaś $h = (b - a)/n$.

Metoda trapezów - przykład



Metoda Simpsona

Metoda Simpsona pozwala uzyskać bardziej precyzyjne wyniki niż metoda trapezów.

- Pola trapezów są zastępowane polami pod parabolami.
- Każde dwa pola trapezów są zastępowane jednym polem pod parabolą.
- Parabola jest wyznaczona przez trzy punkty: u , v i w .

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n/2-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} W(x) dx$$

Metoda Simpsona - przybliżenie

Przybliżenie wartości całki oznaczonej S_n jest sumą pól pod parabolami:

$$S_n = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{n-1})) \right. \\ \left. + 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{n-2})) + f(x_n) \right]$$

gdzie:

- $h = \frac{b-a}{n}$
- $x_i = a + ih$ dla $i = 0, 1, \dots, n$
- n jest parzyste

Błąd przybliżenia wynosi:

$$\epsilon = \left| f^{(4)}(\xi) \right| \frac{(b-a)h^4}{180}$$

gdzie:

- $f^{(4)}(\xi)$ to czwarta pochodna funkcji f w punkcie $\xi \in (a, b)$
- $h = \frac{b-a}{n}$

Wzór z założenia jest dokładny dla wielomianów stopnia co najwyżej 3 stopnia.