Metody numeryczne

Całkowanie

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Całkowanie numeryczne

1. Kilka uwag ogólnych
2. Kwadratury Newtona–Cotesa
3. Metoda Romberga
4. Kwadratury Gaussa
5. Trudności i możliwości w całkowaniu numerycznym
6. Całkowanie metodą Monte Carlo

Kilka uwag ogólnych (1)

Problem: $\int_a^b \mathrm{d}x g(x)$

(a, b - pewne skończone wartości)

Możliwe rozwiązanie: zastąp $g(x)$ przez funkcję interpolującą $\varphi(x)$

Kilka uwag ogólnych (2)

Niech

$x_k,\, k = 0, \ldots, n$	-	węzły interpolacji
$\varphi(x)$	-	wielomian interpolacyjny Lagrange'a

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{n} g(x_k)\Phi_k(x)$$

gdzie

$$\Phi_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)}$$

Kilka uwag ogólnych (3)

$$\begin{aligned}\int_a^b \mathrm{d}x g(x) &\simeq \int_a^b \mathrm{d}x \varphi(x) = \int_a^b \mathrm{d}x \sum_{k=0}^{n} \Phi_k(x) g(x_k) \\ &= \sum_{k=0}^{n} g(x_k) \int_a^b \mathrm{d}x \Phi_k(x) \equiv \sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k)\end{aligned}$$

Jeśli $|g(x) - \varphi(x)| < \epsilon$ i $x \in [a, b]$, to

$$|\int_a^b \mathrm{d}x g(x) - \sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k)| = |\int_a^b \mathrm{d}x (g(x) - \varphi(x))| \leq \epsilon(b-a)$$

$\Rightarrow$ całkę możemy obliczyć z dowolną dokładnością, jeżeli tylko $g(x)$ daje się przybliżyć dowolnie dokładnie.

Kilka uwag ogólnych (4)

Definicja Wyrażenie

$$\int_a^b \mathrm{d}x g(x) \simeq \sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k), \quad x \in [a, b]$$

nazywamy kwadraturą. Argumenty x_k nazywamy węzłami kwadratury.

Niech

$$I(g) = \int_a^b \mathrm{d}x g(x), \quad S(g) = \sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k)$$

Definicja Błędem przybliżenia całki $I(g)$ sumą $S(g)$ nazywamy

$$E(g) = S(g) - I(g)$$

Kilka uwag ogólnych (5)

Definicja Mówimy, że kwadratura jest rzędu r, jeżeli

(a) $I(W) = S(W)$ dla wszystkich wielomianów $W(x)$ stopnia mniejszego niż r,

(b) istnieje wielomian stopnia r $(r \geq 1)$ taki, że $I(W) \neq S(W)$.

Kilka uwag ogólnych (6)

Twierdzenie 1 *Kwadratura*

$$\int_a^b \mathrm{d}x g(x) \simeq \sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k), \quad x \in [a,b]$$

jest zbieżna dla każdej funkcji $f(x) \in C([a,b])$ wtedy i tylko wtedy, gdy:

1. *jest ona zbieżna dla każdego wielomianu,*
2. *istnieje liczba M niezależna od N taka, że*

$$\sum_{k=0}^{N} |A_k| \leq M$$

dla $n = 1, 2, \ldots$.

Kilka uwag ogólnych (7)

Niech

$$g(x) = p(x)f(x)$$

Wówczas (zastępując $f(x)$ wielomianem Lagrange'a)

$$\int_a^b \mathrm{d}x g(x) = \int_a^b \mathrm{d}x p(x)f(x) = \sum_{k=0} A_k f(x_k)$$

gdzie

$$A_k = \int_a^b \mathrm{d}x p(x)\Phi_k(x)$$

Kilka uwag ogólnych (8)

Twierdzenie 2 *Rząd kwadratury*

$$\begin{aligned}\int_a^b \mathrm{d}x p(x) f(x) &= \sum_{k=0} A_k f(x_k) \\ A_k &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x) \Phi_k(x)\end{aligned}$$

wynosi co najmniej $N+1$.

Kilka uwag ogólnych (9)

Dowód Niech $g(x)$ - wielomian stopnia co najwyżej N. Jeżeli wielomian ten zapiszemy w postaci wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a W_N z węzłami $x_0, \ldots x_n$, to

$$I(g) = I(W_N) = S(W_N) = S(g),$$

czyli rząd kwadratury rzeczywiście wynosi co najmniej $N+1$. Załóżmy teraz, że rząd kwadratury wynosi $N+1$. Jest ona wtedy dokładna dla wszystkich wielomianów stopnia mniejszego niż N, a zatem również dla wielomianów $g(x) = \Phi_i(x)$. Stąd

$$I(\Phi_i) = \int_a^b \mathrm{d}x p(x)\Phi_i(x) = \sum_{k=0}^{N} A_k \Phi_i(x_k) = A_i \qquad \blacksquare$$

Kwadratury Newtona–Cotesa

Niech

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

Zastępując funkcję podcałkową wielomianem interpolacyjnym otrzymamy

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

gdzie ($x = a + sh$)

$$A_k = \int_a^b \mathrm{d}x \Phi_k(x) = \int_a^b \mathrm{d}x \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} = h \int_0^n \mathrm{d}s \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{s - i}{k - 1} \equiv h\alpha_k$$

Wzór trapezów (1)

Dla $n = 1$ mamy

$$\alpha_0 = \int_0^1 \mathrm{d}s \frac{s-1}{0-1} = \frac{1}{2}, \quad \alpha_1 = \int_0^1 \mathrm{d}s \frac{s-0}{1-0} = \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$ **wzór trapezów**

$$\int_a^b \mathrm{d}x f(x) \simeq h \sum_{k=0}^{1} \alpha_k f(x_k) = \frac{h}{2}[f_0 + f_1]$$

Wzór trapezów (2)

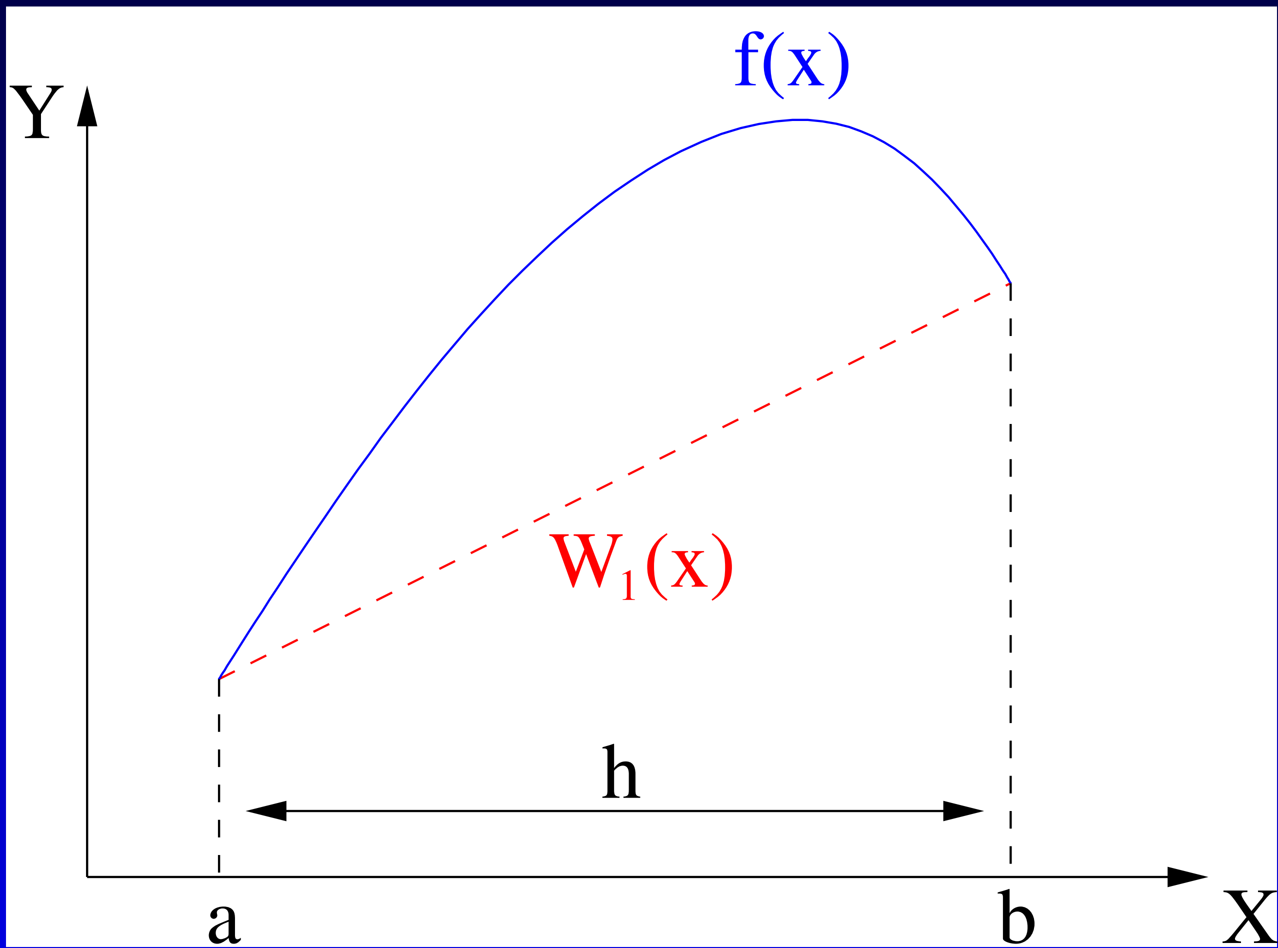
Jeśli $f(x) \in C^2([a,b])$, błąd interpolacji wielomianem stopnia n wynosi:

$$|\epsilon(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_n(x)|,$$

Stąd

$$|E(f)| = \frac{1}{12}h^3 f^{(2)}(\xi_1), \;\; \xi_1 \in (a,b), \;\; h = b - a$$

Wzór trapezów (3)



Wzór Simpsona (1)

Dla $n = 2$ mamy

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \int_0^2 \mathrm{d}s \frac{s-1}{0-1}\frac{s-2}{0-2} = \frac{1}{3}\\ \alpha_1 &= \int_0^2 \mathrm{d}s \frac{s-0}{1-0}\frac{s-2}{1-2} = \frac{4}{3}\\ \alpha_2 &= \int_0^2 \mathrm{d}s \frac{s-0}{2-0}\frac{s-1}{2-1} = \frac{1}{3}\end{aligned}$$

czyli

$$\int_a^b \mathrm{d}x f(x) \simeq \frac{h}{3}[f_0 + 4f_1 + f_2]$$

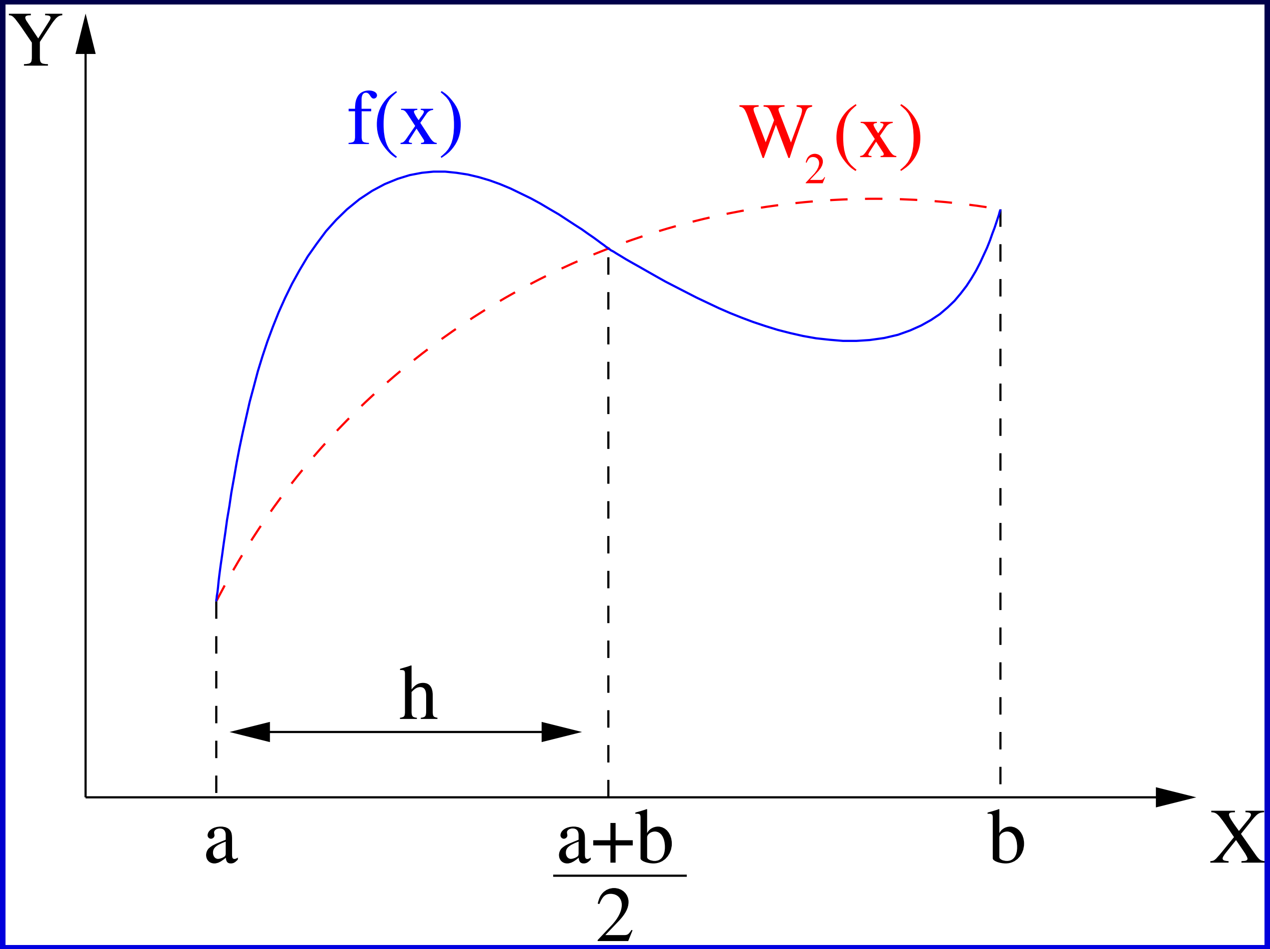
Wzór Simpsona (2)

Błąd przybliżonej wartości całki wynosi:

$$|E(f)| = \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi_1),$$

gdzie $\xi_1 \in (a, b)$, $h = \frac{b-a}{2}$

Wzór Simpsona (3)



Inne wzory Newtona–Cotesa (1)

Ogólnie dla wszystkich n naturalnych:

$$\int_a^b \mathrm{d}x f(x) \simeq f \sum_{k=0}^{n} \alpha_k f_k = \frac{b-a}{nt} \sum_{k=0} \sigma_k f_k,$$

przy czym

- $h = \frac{b-a}{n}$
- t jest dobrane tak, aby liczby $\sigma_k = t\alpha_k$ były liczbami całkowitymi

Dla $f \in C^\infty([a,b])$:

$$|E(f)| = h^{p+1} K f^{(p)}(\xi)$$

gdzie $\xi \in (a,b)$, a p i K zależą od n

Inne wzory Newtona–Cotesa (2)

n	σ_k	nt	Błąd	Nazwa
1	1 1	2	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	wzór trapezów
2	1 4 1	6	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	wzór Simpsona
3	1 3 3 1	8	$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi)$	wzór "trzech ósmych"
4	7 32 12 32 7	90	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	wzór Milne'a
5	19 75 50 50 75 19	288	$h^7 \frac{275}{12096} f^{(6)}(\xi)$	-
6	41 216 27 272 27 216 41	840	$h^9 \frac{9}{1400} f^{(8)}(\xi)$	wzór Weddle'a

Dla większych wartości n pojawiają się współczynniki ujemne

$\Rightarrow$ wzory przestają być numerycznie użyteczne (kwadratura nie zawsze jest zbieżna)

Kwadratury złożone Newtona–Cotesa

Błąd kwadratur Newtona–Cotesa jest proporcjonalny do pewnej potęgi długości przedziału całkowania

$\Rightarrow$ jeżeli przedział całkowania jest duży, kwadratura (nawet niskiego stopnia) może nie zapewnić żadnej dokładności

Wyjście:

1. podziel przedział całkowania $[a, b]$ na pewną liczbę podprzedziałów,
2. w każdym podprzedziale zastosuj kwadraturę niskiego rzędu i zsumuj wyniki.

Definicja Kwadraturę będącą sumą kwadratur nazywamy kwadraturą złożoną.

Złożony wzór trapezów (1)

Stosując wzór trapezów dla przedziału $[x_i, x_{i+1}]$ otrzymujemy

$$S_i(f) = \frac{h}{2}\left[f_i + f_{i+1}\right]$$

Stąd

$$\begin{aligned} S(f) &= \sum_{i=0}^{n-1} S_i(f) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}\left[f_i + f_{i+1}\right] \\ &= h\left(\frac{f_0}{2} + f_1 + \ldots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2}\right) \end{aligned}$$

Złożony wzór trapezów (2)

Jeżeli $f(x) \in C^2([a,b])$, to

$$|E(f)| = \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(2)}(\xi_i) = \frac{(b-a)^3}{12n^2}\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(2)}(\xi_i)$$

Czynnik $\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(2)}(\xi_i)$ jest średnią arytmetyczną wartości drugiej pochodnej w punktach ξ_i

$$\Rightarrow |E(f)| = \frac{(b-a)^3}{12n^2} f^{(2)}(\xi)$$

$\Rightarrow$ błąd kwadratury złożonej jest dużo mniejszy niż odpowiedniej kwadratury prostej

$\Rightarrow$ zwiększając liczbę węzłów możemy dowolnie zmniejszać błąd

Złożony wzór Simpsona (1)

Niech

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad n \text{ parzyste}$$

W każdym z podprzedziałów $[x_{2i}, x_{2i+2}]$ stosujemy wzór Simpsona:

$$S_{2i}(f) = \frac{h}{3}\left[f_{2i} + 4f_{2i+1} + f_{2i+2}\right]$$

Stąd wynika:

$$S(f) = \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} S_{2i}(f) =$$

$$\frac{h}{3}[f_0 + f_n + 2(f_2 + f_4 + \ldots + f_{n-2}) + 4(f_1 + f_3 + \ldots + f_{n-1})]$$

Złożony wzór Simpsona (2)

Błąd tej kwadratury wynosi

$$|E(f)| = \frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)$$

o ile tylko $f(x) \in C^4([a,b])$.

Złożony wzór Simpsona (3)

Przykład

```
      DOUBLE PRECISION FUNCTION SIMPSON(A,XDEL,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(1)
      N1=N-1
      XINT=A(1)
      P=2.D0
      PH=-2.D0
      DO 10 I=2,N1
      PH=-PH
      P=P+PH
10    XINT=XINT+A(I)*P
      XINT=(XINT+A(N))*XDEL/3.D0
      RETURN
      END
```

Złożony wzór Simpsona (4)

Przykład

$$\int_0^1 \mathrm{d}x \exp(x)$$

n	Wzór trapezów	Wzór Simpsona
4	1,72722190	1,71831884
8	1,72051859	1,71828415
16	1,71884112	1,71828197
32	1,71842166	1,71828183
64	1,71831678	1,71828182

Dla porównania, dokładny wynik to $\int_0^1 \mathrm{d}x e^x = 1,71828182$.

Metoda Romberga (1)

Twierdzenie 3 *(wzór sumacyjny Eulera-Maclaurina) Jeżeli $f \in C^{2m+1}([a, b])$, to złożony wzór trapezów ma rozwinięcie:*

$$T(h) = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2},$$

gdzie τ_i są stałymi niezależnymi od h, a $\alpha_{m+1}(h)$ jest funkcją ograniczoną zmiennej h, tzn.

$$|\alpha_{m+1}| \leq M < \infty$$

dla każdego $h = \frac{b-a}{n}$ (n całkowite).

Metoda Romberga (2)

Dowód Niech $h = \frac{b-a}{n}$. Zamiast funkcji $f(x)$ rozważmy funkcję

$$g(t) = f(a + th).$$

Dalej, rozważmy całkę

$$\int_0^1 \mathrm{d}t S_1(t) g'(t)$$

gdzie $S_1(t)$ - funkcja o okresie 1, złożona kawałkami liniowo z wielomianu Bernoulliego $B_1(x) = x - \frac{1}{2}$.

Metoda Romberga (3)

Dowód (ciąg dalszy)

Ponieważ zachodzi

$$\begin{aligned} B_k'(x) &= kB_{k-1}(x), \quad k \geq 1 \\ B_0(x) &= 1 \\ \int_0^1 \mathrm{d}x B_k(x) &= 0 \end{aligned}$$

więc całkując przez części otrzymamy

$$\begin{aligned} \int_0^1 \mathrm{d}t S_1(t) g'(t) &= \int_0^1 \mathrm{d}t B_1(t) g'(t) \\ &= \frac{1}{2}\left[g(1) + g(0)\right] - \int_0^1 \mathrm{d}t g(t) \end{aligned}$$

Metoda Romberga (4)

Dowód (ciąg dalszy)

Podobnie

$$\begin{aligned}\int_i^{i+1} \mathrm{d}t S_1(t) g'(t) &= \int_0^1 \mathrm{d}t B_1(t) g'(t+i) \\ &= \frac{1}{2}\left[g(i+1)+g(i)\right] - \int_i^{i+1} \mathrm{d}t g(t)\end{aligned}$$

dla $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Zatem

$$\frac{g(0)}{2} + g(1) + \ldots + g(n-1) + \frac{g(n)}{2} - \int_0^n \mathrm{d}t g(t) = \int_0^n \mathrm{d}t S_1(t) g'(t)$$

Metoda Romberga (5)

Dowód (ciąg dalszy)

Całkując $2m$ razy przez części otrzymamy

$$\frac{g(0)}{2} + g(1) + \ldots + g(n-1) + \frac{g(n)}{2} - \int_0^n \mathrm{d}t g(t)$$
$$= \sum_{k=1}^{m} (-1)^{k+1} \frac{B_k}{(2k)!} \left[g^{(2k-1)}(n) - g^{(2k-1)}(0) \right] + R_{m+1}$$

z resztą

$$R_{m+1} = -\frac{1}{(2m+2)!} \int_0^n \mathrm{d}t [S_{2m+2}(t) - S_{2m+2}(0)] g^{(2m+2)}(t)$$

Przy tym $B_k = (-1)^{k+1} B_{2k}(0)$ to tzw. liczby Bernoulliego.

Metoda Romberga (6)

Dowód (ciąg dalszy)

Ponieważ $g(t) = f(a + th)$, więc mamy

$$\begin{aligned} \int_0^n \mathrm{d}t g(t) &= \frac{1}{h}\int_a^b \mathrm{d}x f(x) \\ g^{(k)}(t) &= h^k f^{(k)}(a + th), \quad k = 0, 1, \ldots \end{aligned}$$

oraz

$$\frac{g(0)}{2} + g(1) + \ldots + g(n-1) + \frac{g(n)}{2}$$
$$= \frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \ldots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2} = \frac{T(h)}{h}.$$

Metoda Romberga (7)

Dowód (ciąg dalszy)

Stąd wynika

$$T(h) = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2},$$

gdzie

$$\begin{aligned} \tau_k &= \frac{(-1)^{k+1} B_k}{(2k)!}[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)], \quad k = 1, \ldots, m, \\ \alpha_{m+1}(h) &= \frac{-1}{(2m+2)!} \int_a^b \mathrm{d}x\, f^{(2m+2)}(x) \left[S_{2m+2}\left(\frac{x-a}{h}\right) - S_{2m+2}(a) \right]. \end{aligned}$$

S_{2m+2} jest ciągłą funkcją okresową, istnieje więc kres górny dla $|\alpha_{m+1}(h)|$ niezależny od h. Tym samym twierdzenie jest udowodnione. ∎

Metoda Romberga (8)

Dzielimy $[a, b]$ na 2^i równych części ($i = 0, 1, \ldots$):

$$\begin{aligned} h_i &= \frac{b-a}{2^i} \\ x_{i,k} &= a + kh_i \\ f_{i,k} &= f(x_{i,k}) \end{aligned}$$

Złożony wzór trapezów:

$$T_{0,i} = h_i \left[\sum_{k=0}^{2i} f_{i,k} - \frac{1}{2} \left(f(a) - f(b) \right) \right]$$

Metoda Romberga (9)

Mamy

$$I(f) - T_{0,i} = \sum_{k=1}^{\infty} \tau_{0,k} h_i^{2k}$$

$\Rightarrow$ wyraz wiodący błędu jest rzędu h_i^2

Niech

$$T_{1,i} = T_{0,i+1} + \frac{T_{0,i+1} - T_{0,i}}{2^2 - 1}$$

Wówczas

$$I(f) - T_{1,i} = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^{\infty} \tau_{0,k} (2^2 h_{i+1}^{2k} - h_i^{2k})$$

Metoda Romberga (10)

Wprowadźmy wielkość

$$\tau_{1,k} = \frac{1}{3}\left(\frac{2^2}{2^{2k}} - 1\right)\tau_{0,k}$$

Ponieważ $\tau_{1,1} = 0$, otrzymujemy

$$I(f) - T_{1,i} = \sum_{k=2}^{\infty} \tau_{1,k} h_i^{2k}$$

$\Rightarrow$ wiodący wyraz błędu jest rzędu h_i^4

Metoda Romberga (11)

Ogólnie

$$T_{m,i} = T_{m-1,i+1} + \frac{T_{m-1,i+1} - T_{m-1,i}}{2^{2m} - 1}$$

Jeżeli $f(x) \in C^{2m+2}([a,b])$, to

$$I(f) - T_{m,i} = Ch^{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi),$$

gdzie $\xi \in (a,b)$, a C jest pewną stałą.

Metoda Romberga (12)

$T_{m,i}$ można przedstawić w postaci kombinacji liniowej $T_{0,1}, \ldots, T_{0,m+i}$, a zatem

$$T_{m,i} = h \sum_{j=0}^{2^{m+i}} d_{m,j} f(a + jh), \quad h = \frac{b-a}{2^{m+i}}$$

$d_{m,j}$ są dodatnie dla wszystkich m, j

$\Rightarrow$ $T_{m,i}$ są zbieżnymi kwadraturami o węzłach równoodległych

Metoda Romberga (13)

$$
\begin{array}{llllllll}
T_{0,0} & & & & & & \\
T_{0,1} & T_{1,0} & & & & & \\
T_{0,2} & T_{1,1} & T_{2,0} & & & & \\
T_{0,3} & T_{1,2} & T_{2,1} & T_{3,0} & & & \\
T_{0,4} & T_{1,3} & T_{2,2} & T_{3,1} & T_{4,0} & & \\
T_{0,5} & T_{1,4} & T_{2,3} & T_{3,2} & T_{4,1} & T_{5,0} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ldots
\end{array}
$$

- elementy pierwszej kolumny ze złożonego wzoru trapezów
- po obliczeniu m pierwszych elementów z 1. kolumny możemy wyznaczyć m pierwszych wierszy
- na ogół zbieżność ciągu $T_{m,0}$ szybsza niż $T_{0,m}$

Wielomiany ortogonalne (1)

Niech

$\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$	-	ciąg wielomianów ortogonalnych z wagą $p(x)$ na przedziale $[a,b]$
$P_n(x)$	-	wielomian stopnia n

$$(P_r, P_s) = \int_a^b \mathrm{d}x p(x) P_r(x) P_s(x) = 0, \quad r \neq s$$

Wielomiany ortogonalne (2)

Twierdzenie 4 *Wielomiany ortogonalne na przedziale* $[a, b]$ *mają tylko pierwiastki rzeczywiste, jednokrotne, leżące w* (a, b).

Dowód Załóżmy, że pierwiastki wielomianu $P_k(x)$ nie spełniają powyższych warunków. Niech $\xi_1, \ldots, \xi_m$ będą rzeczywistymi, różnymi pierwiastkami wielomianu z przedziału (a, b) o nieparzystych krotnościach. Mamy $m < k$. Niech

$$W(x) = (x - \xi_1) \ldots (x - \xi_m)$$

Przedstawmy $W(x)$ w postaci kombinacji liniowej wielomianów $P_0(x), \ldots, P_m(x)$:

$$W(x) = a_0 P_0(x) + \ldots + a_m P_m(x)$$

Wielomiany ortogonalne (3)

Dowód (ciąg dalszy)

Mamy

$$(W, P_k) = \sum_{i=0}^{m<k} a_i (P_i, P_k) = 0.$$

Z drugiej strony $W(x)P_k(x) \geq 0$ w przedziale $[a, b]$, a zatem

$$(W, P_k) > 0,$$

co prowadzi do sprzeczności. ∎

Wielomiany ortogonalne (4)

Przykład W przedziale $[a, b] = [-1, 1]$ wielomianami ortogonalnymi z wagą $p(x) = 1$ są wielomiany Legendre'a

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

Wielomiany ortogonalne (5)

Przykład W przedziale $[a, b] = [-1, 1]$ ciąg wielomianów ortogonalnych z wagą $p(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$, $(\alpha, \beta > -1)$ tworzą wielomiany Jacobiego:

$$J_n(x;\alpha,\beta) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{d^n}{dx^n}[(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}]$$

W szczególności, gdy $\alpha = \beta = -\frac{1}{2}$, mówimy o wielomianach Czebyszewa pierwszego rodzaju:

$$T_n(x) = \cos(a \arccos x)$$

Wielomiany ortogonalne (6)

Przykład Wielomiany Laguerre'a

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})$$

są wielomianami ortogonalnymi z wagą $p(x) = e^{-x}$ w przedziale $[0, \infty)$.

Przykład Wielomiany Hermite'a

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

są wielomianami ortogonalnymi z wagą $p(x) = e^{-x^2}$ na przedziale $(-\infty, \infty)$.

Kwadratury Gaussa (1)

Szukamy kwadratury

$$
\begin{aligned}
S(f) &= \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k) \\
A_k &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x) \Phi_k(x)
\end{aligned}
$$

o najwyższym możliwym rzędzie

Kwadratury Gaussa (2)

Twierdzenie 5 *Nie istnieje kwadratura postaci*

$$\begin{aligned} S(f) &= \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k) \\ A_k &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x) \Phi_k(x) \end{aligned}$$

rzędu wyższego niż $2(N+1)$.

Kwadratury Gaussa (3)

Dowód Niech $W(x) = \omega_{N+1}^2(x)$, gdzie

$$\omega_{N+1}(x) = (x - x_0) \ldots (x - x_N).$$

Mamy

$$\begin{aligned} I(W) &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x) W(x) > 0 \\ S(W) &= \sum_{k=0}^{N} A_k W(x_k) = 0 \end{aligned}$$

Istnieje zatem wielomian stopnia $2(N+1)$, dla którego kwadratura nie jest dokładna. $\blacksquare$

Kwadratury Gaussa (4)

Twierdzenie 6 *Niech $p(x)$ będzie funkcją wagową dodatnią w przedziale $[a, b]$. Jeżeli punkty $x_0, \ldots, x_N$ są pierwiastkami wielomianu $P_{N+1}(x)$ z ciągu wielomianów ortogonalnych na $[a, b]$ z wagą $p(x)$, to kwadratura*

$$\begin{aligned} S(f) &= \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k) \\ A_k &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x) \Phi_k(x) \end{aligned}$$

jest rzędu $2(N+1)$.

Kwadratury Gaussa (5)

Dowód Niech

$W(x)$ - wielomian stopnia $2N+1$

$Q(x)$ - iloraz z dzielenia $W(x)/P_{N+1}(x)$

$R(x)$ - reszta z dzielenia $W(x)/P_{N+1}(x)$

$$W(x) = Q(x)P_{N+1}(x) + R(x)$$

$Q(x)$ oraz $R(x)$ mają stopień $\leq N$, zatem z warunku ortogonalności otrzymamy

$$\begin{aligned}\int_a^b \mathrm{d}x p(x)W(x) &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x)Q(x)P_{N+1}(x) + \int_a^b \mathrm{d}x p(x)R(x)\\ &= \int_a^b \mathrm{d}x p(x)R(x)\end{aligned}$$

Kwadratury Gaussa (6)

Dowód (ciąg dalszy)

Ponadto

$$\sum_{i=0}^{N} A_i f_i = \sum_{i=0}^{N} A_i \left\{ Q(x_i) P_{N+1}(x_i) + R(x_i) \right\} = \sum_{i=0}^{N} A_i R(x_i)$$

ponieważ $P_{N+1}(x_i) = 0$.

Kwadratura jest co rzędu co najmniej $(N+1)$, a więc jest dokładna dla $R(x)$,

$$\sum_{i=0}^{N} A_i R(x_i) = \int_a^b \mathrm{d}x p(x) R(x),$$

co kończy dowód. ∎

Kwadratury Gaussa (7)

Twierdzenie 7 *Wszystkie współczynniki A_k w kwadraturach Gaussa są dodatnie.*

Dowód Rozważmy wielomian stopnia $2N$

$$R_i(x) = [(x - x_0) \ldots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \ldots (x - x_N)]^2$$

gdzie $i = 0, 1, \ldots, N$. Mamy

$$0 < \int_a^b \mathrm{d}x p(x) R_i(x) = \sum_{k=0} R_i(x_k) = A_i R_i(x_i)$$

a więc rzeczywiście współczynniki A_i muszą być dodatnie. ∎

Kwadratury Gaussa (8)

$\Rightarrow$ kwadratury Gaussa są zbieżne dla każdej funkcji ciągłej

Jeżeli $f \in C^{2N+2}([a,b])$, to

$$|E(f)| = \frac{1}{(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\xi) \int_a^b \mathrm{d}x p(x) \omega_{N+1}^2(x),$$

przy czym $\xi \in (a,b)$.

Kwadratury Gaussa-Legendre'a (1)

Niech $p(x) = 1$ oraz $[a, b] = [-1, 1]$

$\Rightarrow$ wielomianami ortogonalnymi są wielomiany Legendre'a

Współczynniki i błąd kwadratury Gaussa–Legendre'a wyrażają się wzorami

$$
\begin{aligned}
A_k &= -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}(x_k)P'_{N+1}(x_k)} \\
E(f) &= \frac{2^{2N+3}[(N+1)!]^4}{(2N+3)[(2N+2)!]^3} f^{(2N+3)}(\xi)
\end{aligned}
$$

gdzie $-1 < \xi < 1$ oraz x_k - pierwiastki wielomianu $P_{N+1}(x)$

Kwadratury Gaussa-Legendre'a (2)

W przypadku dowolnego przedziału całkowania $[a, b]$:

$$\begin{aligned} \int_a^b \mathrm{d}t f(t) &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}\right) \\ &\simeq \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^{N} A_k f(t_k), \end{aligned}$$

gdzie

$$t_k = \frac{b-a}{2} x_k + \frac{b+a}{2}$$

i x_k zdefiniowane jest jak powyżej

Kwadratury Gaussa-Legendre'a (3)

N	k	Węzły x_k	Współczynniki A_k
1	0	$x_0 = -0,5773502692\ldots$	$A_0 = 1$
	1	$x_1 = 0,5773502692\ldots$	$A_1 = 1$
2	0	$x_0 = -0,7745966692\ldots$	$A_0 = 5/9$
	1	$x_1 = 0$	$A_1 = 8/9$
	2	$x_2 = 0,7745966692\ldots$	$A_2 = 5/9$
3	0	$x_0 = -0,8611363116\ldots$	$A_0 = 0,3478548451\ldots$
	1	$x_1 = -0,3399810436\ldots$	$A_1 = 0,6521451549\ldots$
	2	$x_2 = 0,3399810436\ldots$	$A_2 = 0,6521451549\ldots$
	3	$x_3 = 0,8611363116\ldots$	$A_3 = 0,3478548451\ldots$

Kwadratury Gaussa-Legendre'a (4)

Przykład Obliczyć całkę

$$\int_{-0{,}25}^{0{,}25} \mathrm{d}x e^x$$

dla $N = 1$. Mamy

$$\begin{aligned} \int_{-0{,}25}^{0{,}25} \mathrm{d}x e^x &\simeq \frac{1}{4}\left[\exp\left(\frac{x_0}{4}\right) + \exp\left(\frac{x_1}{4}\right)\right] \\ &= \frac{1}{4}[\exp(-0,1443375673) + \exp(0,1443375673)] \\ &= 0,505217 \end{aligned}$$

Dla porównania, wynik dokładny jest równy $2\sinh 0,25 = 0,505224$.

Kwadratury Gaussa-Legendre'a (5)

Przykład Dla $N = 2$ mamy

$$\int_0^1 \mathrm{d}x e^x = 1,718181104$$

Ciekawostka Pod adresem

`http://www.efunda.com/math/num_integration/findgausslegendre.cfm`

można obliczyć węzły i wagi kwadratury Gaussa–Legendre'a on–line.

Trudności i możliwości w całkowaniu numerycznym (1)

Jeśli funkcja podcałkowa jest osobliwa lub “prawie osobliwa”, spróbuj zmodyfikować problem.

Środki zaradcze:

- zamiana zmiennych
- całkowanie przez części
- wyłączanie łatwo całkowalnego składnika zawierającego osobliwości (uwaga: możliwe znoszenie się składników!)
- specjalne wzory całkowe (konstruowane metodą czynników nieoznaczonych)

Trudności i możliwości w całkowaniu numerycznym (2)

Przykład Niech

$$I(f) = \int_0^1 \mathrm{d}x \sqrt{x} e^x.$$

Funkcja podcałkowa jest nieskończona dla $x = 0$. Niech $x = t^2$. Wówczas

$$I(f) = 2 \int_0^1 \mathrm{d}t \exp(t^2)$$

i całka ta daje się już łatwo obliczyć numerycznie.

Całkowanie metodą Monte Carlo (1)

$f(x)$ - funkcja całkowalna w $[a,b]$

Szukamy całki

$$\int_a^b \mathrm{d}x f(x) = \int_a^b \mathrm{d}x \left(\frac{f(x)}{h(x)}\right) h(x)$$

Ale

$$\int_a^b \mathrm{d}x \left(\frac{f(x)}{h(x)}\right) h(x) = \left\langle \frac{f(x)}{h(x)} \right\rangle,$$

jeżeli tylko $h(x)$ ma własności gęstości prawdopodobieństwa na przedziale $[a,b]$, tzn.

$$\int_a^b \mathrm{d}x h(x) = 1.$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (2)

Metoda Monte Carlo:

- wybierz losowo M punktów x_i o rozkładzie $h(x)$
- na podstawie tej próbki utwórz wartość średnią funkcji $\frac{f(x)}{h(x)}$ w przedziale $[a, b]$

$$\int_a^b \mathrm{d}x \left(\frac{f(x)}{h(x)} \right) h(x) \simeq \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \left(\frac{f(x_i)}{h(x_i)} \right)$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (3)

Twierdzenie 8 *(Prawo wielkich liczb) Niech $x_1, \ldots, x_M$ będą zmiennymi losowo wybranymi zgodnie z funkcją gęstości prawdopodobieństwa $h(x)$, spełniającą warunek*

$$\int \mathrm{d}x h(x) = 1.$$

Zakładamy, że istnieje całka

$$I = \int \mathrm{d}x h(x) g(x).$$

Wówczas dla każdego $\epsilon > 0$

$$\lim_{M\to\infty} P\left\{ I - \epsilon \leq \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} g(x_i) \leq I + \epsilon \right\} = 1$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (4)

Twierdzenie 9 *(Mocne prawo wielkich liczb)*

$$P\left\{\lim_{M\to\infty}\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}g(x_i)=I\right\}=1$$

Twierdzenie 10

$$|E(f)|\propto\frac{1}{\sqrt{M}}$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (5)

Próbkowanie bezpośrednie (x_i są równomiernie rozłożone w całym przedziale $[a, b]$):

$$h(x) = \frac{1}{b-a}$$

Stąd

$$\int_a^b \mathrm{d}x \left(\frac{f(x)}{h(x)}\right) h(x) \simeq \frac{b-a}{M} \sum_{i=1}^{M} \left(\frac{f(x_i)}{h(x_i)}\right)$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (6)

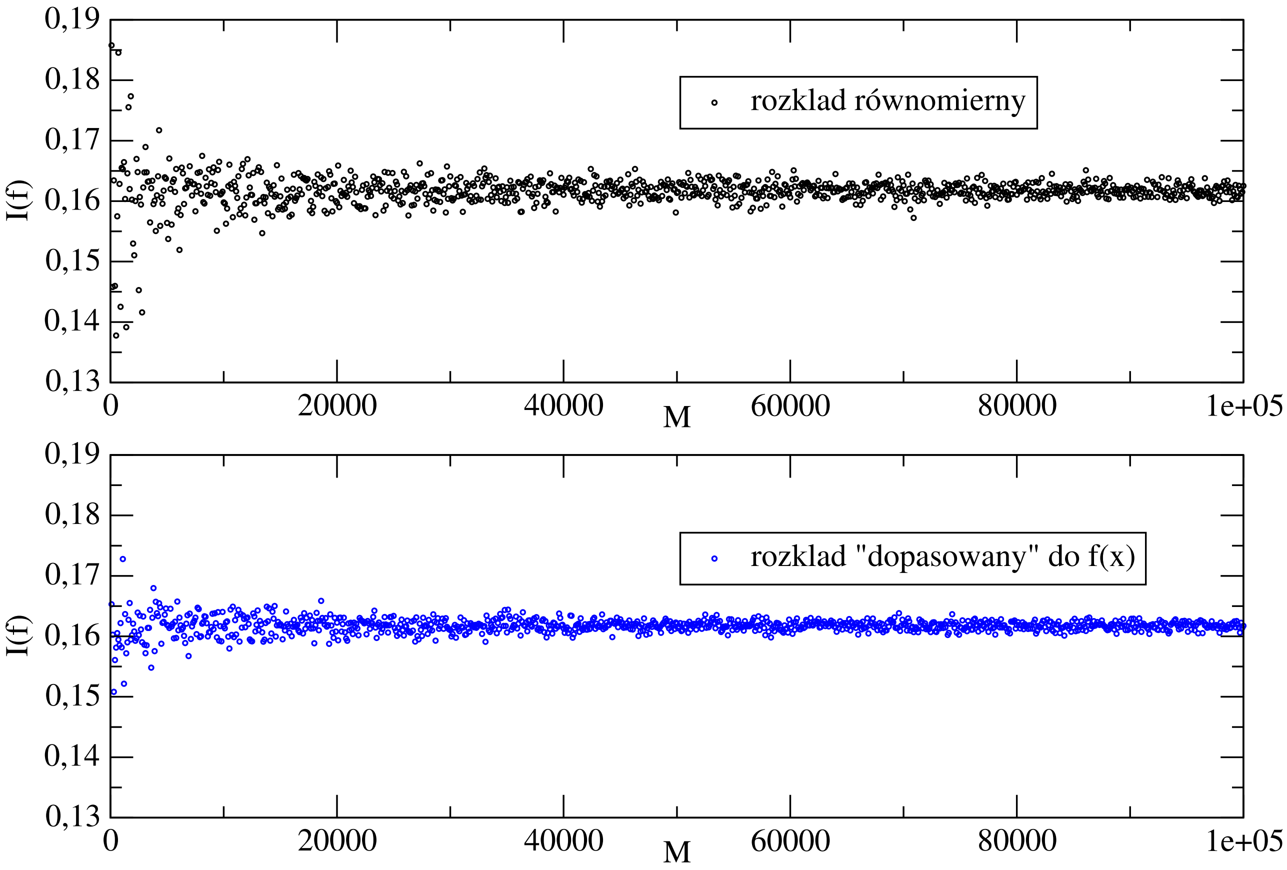
Przykład Obliczmy całkę

$$\int_0^1 \mathrm{d}x \exp\{-30x^2\}$$

metodą Monte Carlo, stosując dwie różne funkcje rozkładu prawdopodobieństwa:

$$\begin{aligned} h_1(x) &= \frac{1}{b-a} = 1, \;\; x \in [0,1] \\ h_2(x) &= \begin{cases} 2, & 0 \le x \le \frac{1}{2} \\ 0, & x > \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

Całkowanie metodą Monte Carlo (7)



Całkowanie metodą Monte Carlo (8)