AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

PODSTAWY METOD KOMPUTEROWYCH W OBLICZENIACH INŻYNIERSKICH

Wykład 4 – Całkowanie numeryczne

Data

Wszystkie udostępniane materiały, skrypty, notatniki są wyłącznie przeznaczone do użytku prywatnego w celu łatwiejszego opanowania wiedzy.

Nie wolno ich rozprzestrzeniać, ani umieszczać w Internecie.

Całkowanie Numeryczne

Oblicz $\int_a^b f(x)dx$ dla danej funkcji $f(x)$

Całkowanie Numeryczne

Terminologia:

Całkowanie numeryczne polega na przybliżonym obliczaniu całek oznaczonych.

Kwadratura numeryczna, (kwadratura), jest synonimem całkowania numerycznego, w szczególności w odniesieniu do całek jednowymiarowych.

Można się spotkać z określeniem kubatury w odniesieniu do całkowania wielowymiarowego.

Interpretacja geometryczna całki – pole pod wykresem

Całkowanie Numeryczne

Całkowanie numeryczne (kwadratura) jest z natury dokładniejszą procedurą w porównaniu z różniczkowaniem.

Całkowanie numeryczne $\int_a^b f(x)dx$ sprowadza się do aproksymacji sumą:

$$I = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

x_i - węzły całkowania, A_i - wagi, zależne od wybranej metody obliczania numerycznego całek.

Metody całkowania są wyprowadzane z wielomianowej interpolacji funkcji podcałkowej. Dlatego działają najlepiej, jeśli $f(x_i)$ można przybliżyć wielomianem.

Całkowanie Numeryczne

Metody całkowania dzieli się zasadniczo na dwie grupy:

Kwadratury Newtona-Cotesa

- równoodległe węzły
- bardzo dobrze znane metody całkowania: trapezów, Simpsona
- najbardziej przydatne jeżeli funkcja podcałkowa jest:
  - już wyliczona dla węzłów równoodległych
  - możemy ją wyliczyć małym nakładem obliczeniowym
  - dysponujemy danymi pomiarowymi próbowanymi równomiernie

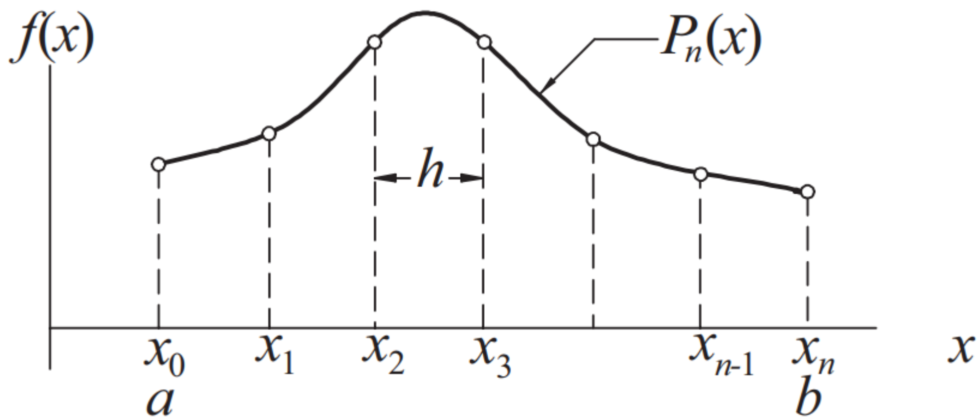
Kwadratury Gaussa

- węzły wybierane tak, aby uzyskać jak wyniki z możliwie największą dokładnością
- wykorzystywana gdy wyznaczenie wartości funkcji podcałkowej wymaga dużych nakładów obliczeniowych
- Umożliwia obliczenie całki dla funkcji posiadającej osobliwości (np. jest nieograniczona, przedział całkowania jest nieskończony lub $\int_0^1 \frac{g(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$)

Całkowanie Numeryczne- kw. NC

Kwadratury Newtona-Cotesa

Spróbujmy obliczyć całkę oznaczoną : $\int_a^b f(x)dx$



Dzielimy przedział całkowania $[a, b]$ na n równych podprzedziałów o szerokości $h = \frac{b-a}{n}$ i oznaczmy odcięte jako $x_0, x_1, \dots, x_n$. Następnie interpolujmy funkcję $f(x)$ wielomianem Lagrange'a stopnia n:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)$$

Całkowanie Numeryczne- kw. NC

Kwadratury Newtona-Cotesa

Podstawiając otrzymujemy:

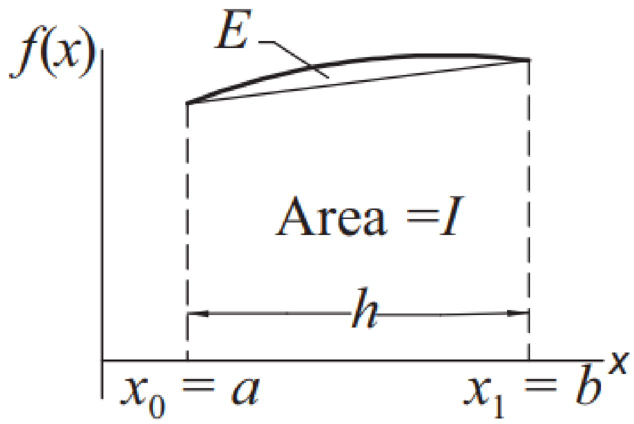
$$I = \int_a^b P_n(x)dx \quad = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b L_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

gdzie $A_i = \int_a^b L_i(x)dx, \quad i = 0,1,\dots,n$

Równanie jest kwadraturą Newtona-Cotesa. W zależności od wartości n rozróżniamy całkowanie:

- metodą trapezów $(n = 1)$
- metodą Simpsona $(n = 2)$
- metodą 3/8 Simpsona $(n = 3)$
- Metoda trapezów może być połączona z ekstrapolacją Richardsona tworząc efektywną metodę całkowania zwaną całkowaniem Romberga.

CN – metoda trapezów



Dla $n = 1$, $L_o(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} = \frac{x-b}{a-b} = \frac{-(x-b)}{h}$

Podstawiając do $A_i = \int_a^b L_i(x)dx, \quad i = 0,1, \dots, n$

Otrzymujemy:

$A_o = \int_a^b L_o(x)dx = \frac{1}{h}\int_a^b (x-b)dx = \frac{1}{2h}(b-a)^2 = \frac{h}{2}$

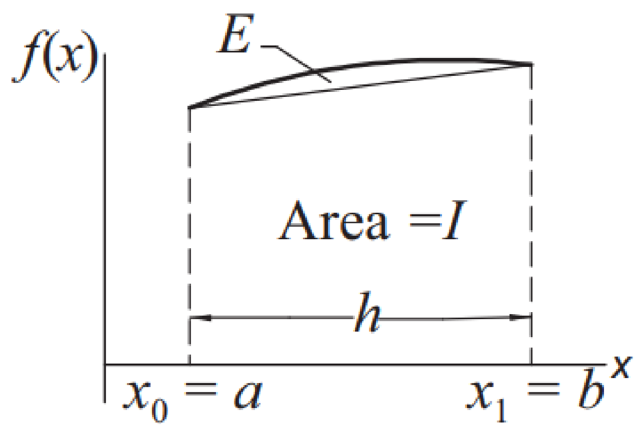
Analogicznie dla $L_1(x) = \frac{x-x_0}{x_1-x_0} = \frac{(x-a)}{h}$

$$A_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \frac{1}{h}\int_a^b (x-a)dx = \frac{1}{2h}(b-a)^2 = \frac{h}{2}$$

Źródło: Kiusalaas, Jaan. *Numerical methods in engineering with Python 3*. CUP, 2013

CN – metoda trapezów

Podstawiając do $I = \int_a^b P_n(x)dx \quad = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

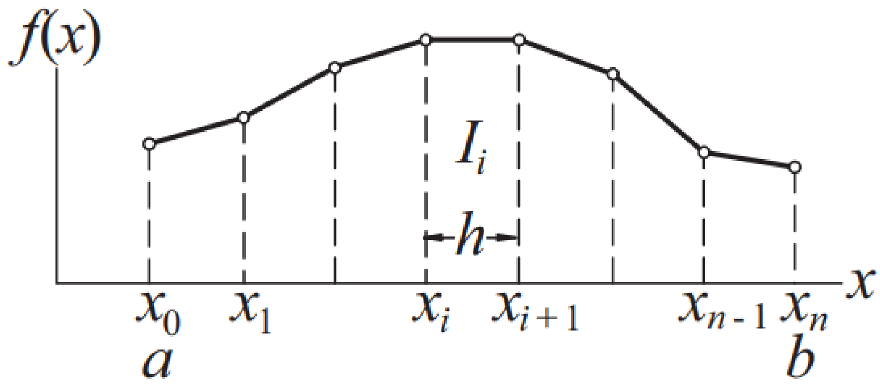


Otrzymujemy:

$$I = (f(a) + f(b))\frac{h}{2}$$

Wzór określa powierzchnię trapezu i jest znany jako metoda trapezów.

Błąd metody wynosi: $\varepsilon = \int_a^b f(x)dx - I$



$$\varepsilon = \frac{1}{2!}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)f''(\gamma)dx =$$

$$= \frac{1}{2}f''(\gamma)\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)f''(\gamma)dx = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\gamma) = -\frac{h^3}{12}f''(\gamma)$$

Źródło: Kiusalaas, Jaan. *Numerical methods in engineering with Python 3*. CUP, 2013

CN – metoda trapezów

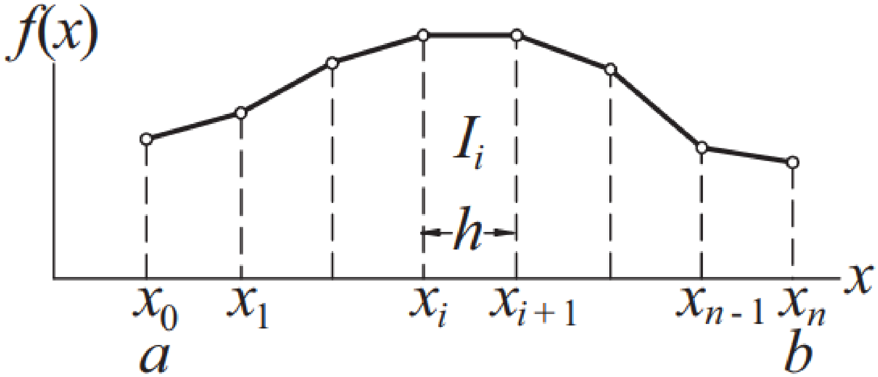
W praktyce, najczęściej metodę trapezów stosuje się odcinkami do całego sygnału.

Dla $i-tego$ odcinka możemy zapisać:

$$I_i = (f(x_i) + f(x_{i+1}))\frac{h}{2}$$

Czyli dla całego przedziału $[a, b]$ możemy zapisać:

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} I_i = (f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))\frac{h}{2}$$



Źródło: Kiusalaas, Jaan. *Numerical methods in engineering with Python 3*. CUP, 2013

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} I_i = (f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))\frac{h}{2}$$

CN – rekursywna metoda trapezów

Niech I_k będzie całką liczoną metodą trapezów z 2^{k-1} przedziałów:

$$I_1 = (f(a) + f(b))\frac{H}{2}, \qquad H = b - a$$

Dla $k = 2$ (dwa przedziały)

$$I_2 = \left(f(a) + 2f\left(a + \frac{H}{2}\right) + f(b)\right)\frac{H}{4} = \frac{1}{2}I_1 + f(a + \frac{H}{2})\frac{H}{2}$$

Dla $k = 3$ (cztery przedziały)

$$I_3 = \left(f(a) + 2f\left(a + \frac{H}{4}\right) + 2f\left(a + \frac{H}{2}\right) + 2f\left(a + \frac{3H}{4}\right) + f(b)\right)\frac{H}{8}$$

$$= \frac{1}{2}I_2 + \left(f\left(a + \frac{H}{4}\right) + f\left(a + \frac{3H}{4}\right)\right)\frac{H}{4}$$

Podsumowując dla $k > 1$ otrzymujemy:

$$I_k = \frac{1}{2}I_{k-1} + \frac{H}{2^{k-1}}\sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left(a + \frac{(2i-1)H}{2^{k-1}}\right)$$

Rekursywna metoda trapezów

CN – rekursywna metoda trapezów

W wersji uproszczonej:

$$I_k = \frac{1}{2} I_{k-1} + \frac{H}{2^{k-1}} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left(a + \frac{(2i-1)H}{2^{k-1}}\right)$$

Można przedstawić jako

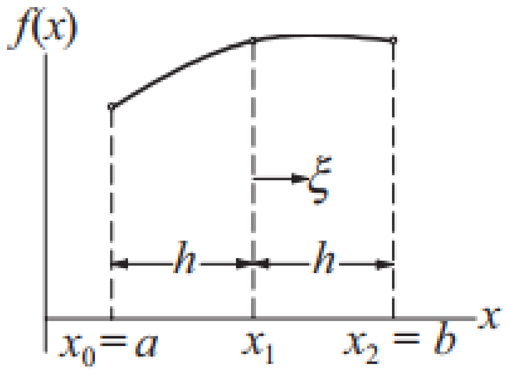
$$I(h) = \frac{1}{2} I(2h) + h \sum f(x_{new})$$

gdzie

$$h = \frac{H}{n}$$

CN – metoda Simpsona

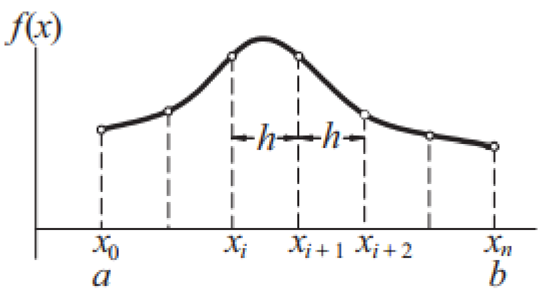
Metodę Simpsona opiera się na przybliżaniu funkcji całkowanej przez interpolację wielomianem drugiego stopnia i można ją otrzymać z wyrażenia Newtona-Cotesa dla $n = 2$



$$I = \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]\frac{h}{3}$$

Przedział całkowania jest dzielony n parzystych przedziałów o szerokości $h = \frac{b-a}{n}$ każdy.

Dla dwóch sąsiednich przedziałów otrzymujemy:



$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx \approx \left(f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right)\frac{h}{3}$$

Źródło: Kiusalaas, Jaan. *Numerical methods in engineering with Python 3*. CUP, 2013

CN – metoda Simpsona

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx \approx \left(f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right)\frac{h}{3}$$

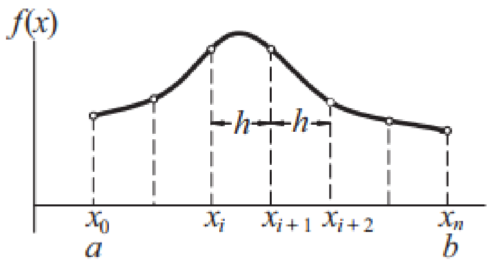
podstawiając:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_m} f(x)dx = \sum_{i=0,2,..}^{n} \left(\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx\right)$$

finalnie:

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

$$= \left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right)\frac{h}{3}$$



Źródło: Kiusalaas, Jaan. *Numerical methods in engineering with Python 3*. CUP, 2013

CN – metoda Simpsona

Błąd metody:

$$\varepsilon = \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\gamma)$$

Metoda Simpsona wymaga parzystej liczby przedziałów jeżeli tak nie jest to pierwszy lub ostatni przedział może być wyliczony jako:

$$I = (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3))\frac{3h}{8}$$

A pozostałe z metody 1/3.

CN – kwadratury Gaussa

IDEA: wprowadzamy większą liczbę równo rozmieszczonych węzłów w przedziale, wyznaczamy wielomian interpolacyjny i całkujemy go analitycznie.

Większość metod całkowania numerycznego bazuje na przybliżeniu:

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n)$$

Jak widać jedyne co jest potrzebne do policzenia całki to znajomość punktów $x_0, x_1, \dots, x_n$ definiujących przedziały całkowania oraz wagi $A_0, A_1, \dots, A_n$.

Przypominając, dla ustalonych $x_0, x_1, \dots, x_n$ można wykorzystać interpolację Lagrange:

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x), gdzie \quad l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)$$

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

CN – kwadratury Gaussa

Poprawne wartości dla całkowania otrzymamy dla każdego wielomianu stopnia co najwyżej n.

Wyznaczmy całkę w przedziale $[-2,2]$ i węzłach $-1,0,1$:

$$l_0(x) = \prod_{j=1}^{2} \left(\frac{x - x_j}{x_0 - x_j} \right) = \frac{1}{2} x(x-1)$$

Analogicznie $l_1(x) = -(x+1)(x-1)\ \ i\ l_2(x) = \frac{1}{2} x(x+1)$

Wagi otrzymujemy całkując te funkcje:

$$A_0 = \int_{-2}^{2} l_0(x) dx = \frac{1}{2} \int_{-2}^{2} (x^2 - x) dx = \frac{8}{3}$$

Analogicznie, $A_1 = -\frac{4}{3}, A_1 = -\frac{8}{3}$

$$\int_{-2}^{2} f(x) dx \approx \frac{8}{3} f(-1) - \frac{4}{3} f(0) + \frac{8}{3} f(1)$$

CN – kwadratury Gaussa

Kwadratury Gaussa są zwykle podawane w przedziałach [0,1] lub [-1,1]. Inne przedziały możemy uzyskać wykorzystując liniową transformację zmiennych całkujących.

Załóżmy, że wzór całkowania numerycznego jest postaci:

$$\int_c^d f(t)dt \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(t_i)$$

Jeżeli potrzebujemy zmienić przedział całkowania np. na [*a*,*b*], definiujemy funkcję liniową $\lambda(t)$ taką, że jeżeli *t* odpowiada przedziałowi [*c*,*d*] to $\lambda(t)$ przedziałowi [*a,b*]:

$$\lambda(t) = \left(\frac{b-a}{d-c}\right)t + \left(\frac{ad-bc}{d-c}\right)$$

czyli podstawiając: $\mathrm{x} = \lambda(t)\ to\ dx = \lambda'^{(t)}dt = \left(\frac{b-a}{d-c}\right)dt$:

$$\int_c^d f(t)dt \approx \frac{b-a}{d-c}\sum_{i=0}^{n} A_i f\left(\left(\frac{b-a}{d-c}\right)t_i + \left(\frac{ad-bc}{d-c}\right)\right)$$

CN – kwadratury Gaussa

W poprzednim przykładzie arbitralnie wybraliśmy węzły całkowania. Okazuje się, że odpowiedni dobór węzłów może znacząco zwiększyć dokładność całkowania.

Niech q będzie wielomianem stopnia $n+1$ takim, że:

$$\int_a^b x^k q(x)dx = 0\,, \qquad (0 \leq k \leq n)$$

Niech $x_0, x_1, \dots, x_n$ będą zerami wielomianu q, wtedy

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

Gdzie $x_0, x_1, \dots, x_n$ stanowią węzły kwadratury dla wszystkich wielomianów stopnia co najwyżej $2n+1$. Węzły leżą w otwartym przedziale (a, b)

CN – kwadratury Gaussa

Zależność na kwadraturę wynikającą z twierdzenia nazywa się kwadraturą Gaussa lub Gaussa-Legendre.

Są różne wzory dla każdego przedziału [*a*,*b*] i każdej wartości *n.*

Przykład Znajdźmy kwadraturę Gaussa z 3 węzłami Gaussa i 3 wagami dla całki $\int_{-1}^{1} f(x)dx$

1. Musimy znaleźć wielomian q spełniający twierdzenie i wyznaczyć jego pierwiastki. Stopień wielomianu q jest 3 czyli q ma postać: $q(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3\, x^3$

2. Sprawdźmy warunek $\int_{-1}^{1} q(x)dx = \int_{-1}^{1} xq(x)dx = \int_{-1}^{1} x^2q(x)dx = 0$

CN – kwadratury Gaussa

Przykład Znajdźmy kwadraturę Gaussa z 3 węzłami Gaussa i 3 wagami dla całki $\int_{-1}^{1} f(x)dx$

3. Jeżeli przyjmiemy $c_0 = c_2 = 0$ to $q(x) = c_1 x + c_3 x^2$:
$$\int_{-1}^{1} q(x)dx = \int_{-1}^{1} x^2 q(x)dx = 0$$

4. Ponieważ całka z funkcji nieparzystej w symetrycznym przedziale wynosi zero, to $c_1 \ i \ c_3$ wyznaczamy z zależności : $\int_{-1}^{1} x(c_1 x + c_3 x^3)dx = 0$

5. Wygodnym rozwiązaniem jest przyjęcie np. $c_1 = -3 \ i \ c_3 = 5$:
$$q(x) = 5x^3 - 3x$$

6. Oczywiście pierwiastkami równania oraz jednocześnie węzłami Gaussa jest $-\sqrt{\frac{3}{5}}, 0. \sqrt{\frac{3}{5}}$

CN – kwadratury Gaussa

Przykład Znajdźmy kwadraturę Gaussa z 3 węzłami Gaussa i 3 wagami dla całki $\int_{-1}^{1} f(x)dx$

7. Żeby wyznaczyć wagi $A_0, A_1 i\ A_2$wykorzystamy procedurę wyznaczania nieokreślonych współczynników. Potrzebujemy określić współczynniki w równaniu

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + A_1 f(0) + A_2 f\left(\sqrt{3/5}\right)$$

8. Ponieważ całkowanie jest procesem liniowym, powyższe równanie będzie dla wielomianów stopnia ≤ 2: $1, x, x^2$

f		
1	$\int_{-1}^{1} dx = 2$	$A_0 + A_1 + A_2$
x	$\int_{-1}^{1} x\,dx = 0$	$-\sqrt{\frac{3}{5}}A_0 + \sqrt{\frac{3}{5}}A_2$
x^2	$\int_{-1}^{1} x^2\,dx = \frac{2}{3}$	$\frac{3}{5}A_0 + \frac{3}{5}A_2$

CN – kwadratury Gaussa

Przykład Znajdźmy kwadraturę Gaussa z 3 węzłami Gaussa i 3 wagami dla całki $\int_{-1}^{1} f(x)dx$

f		
1	$\int_{-1}^{1} dx = 2$	$A_0 + A_1 + A_2$
x	$\int_{-1}^{1} x\,dx = 0$	$-\sqrt{\frac{3}{5}}A_0 + \sqrt{\frac{3}{5}}A_2$
x^2	$\int_{-1}^{1} x^2\,dx = \frac{2}{3}$	$\frac{3}{5}A_0 + \frac{3}{5}A_2$

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2 \\ A_0 \qquad\quad - A_2 = 0 \\ A_0 \qquad\quad + A_2 = \frac{10}{9} \end{cases}$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

Przykładowo $\int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5}$

CN – kwadratury Gaussa

Wielomiany Legendre

Istnieją efektywne metody generowania specjalnych wielomianów, których pierwiastki są wykorzystywane jako węzły kwadratur.

Jeżeli ograniczymy się do całki $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ i wybierzemy q_n takie. że $q_n(1) = 1$ wtedy, takie wielomiany będziemy nazywać wielomianami Legendre'a.

Pierwsze z nich to:

$$
\begin{aligned}
q_0(x) &= 1 \\
q_1(x) &= x \\
q_2(x) &= \tfrac{3}{2}x^2 - \tfrac{1}{2} \\
q_3(x) &= \tfrac{5}{2}x^3 - \tfrac{3}{2}x
\end{aligned}
$$

Kolejne możemy generować z zależności rekurencyjnej:

$$q_n(x) = \left(\frac{2n-1}{n}\right) x q_{n-1}(x) - \left(\frac{n-1}{n}\right) q_{n-2}(x) \qquad (n \geqq 2)$$

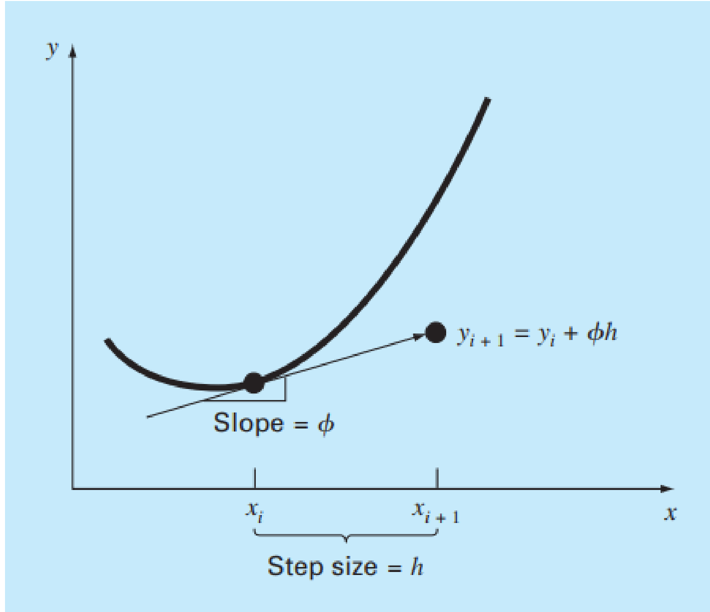
TABLE 6.1 Gaussian Quadrature Nodes and Weights

n	Nodes x_i	Weights A_i
1	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
	$+\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
2	$-\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$
	0	$\frac{8}{9}$
	$+\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$
3	$-\sqrt{\frac{1}{7}(3-4\sqrt{0.3})}$	$\frac{1}{2}+\frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}$
	$-\sqrt{\frac{1}{7}(3+4\sqrt{0.3})}$	$\frac{1}{2}-\frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}$
	$+\sqrt{\frac{1}{7}(3-4\sqrt{0.3})}$	$\frac{1}{2}+\frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}$
	$+\sqrt{\frac{1}{7}(3+4\sqrt{0.3})}$	$\frac{1}{2}-\frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}$
4	$-\sqrt{\frac{1}{9}\left(5-2\sqrt{\frac{10}{7}}\right)}$	$0.3\left(\frac{-0.7+5\sqrt{0.7}}{-2+5\sqrt{0.7}}\right)$
	$-\sqrt{\frac{1}{9}\left(5+2\sqrt{\frac{10}{7}}\right)}$	$0.3\left(\frac{0.7+5\sqrt{0.7})}{2+5\sqrt{0.7}}\right)$
	0	$\frac{128}{225}$
	$+\sqrt{\frac{1}{9}\left(5-2\sqrt{\frac{10}{7}}\right)}$	$0.3\left(\frac{-0.7+5\sqrt{0.7}}{-2+5\sqrt{0.7}}\right)$
	$+\sqrt{\frac{1}{9}\left(5+2\sqrt{\frac{10}{7}}\right)}$	$0.3\left(\frac{0.7+5\sqrt{0.7}}{2+5\sqrt{0.7}}\right)$

Cheney, E. Ward, and David R. Kincaid. *Numerical mathematics and computing*. Cengage Learning, 2012.

Metoda Eulera

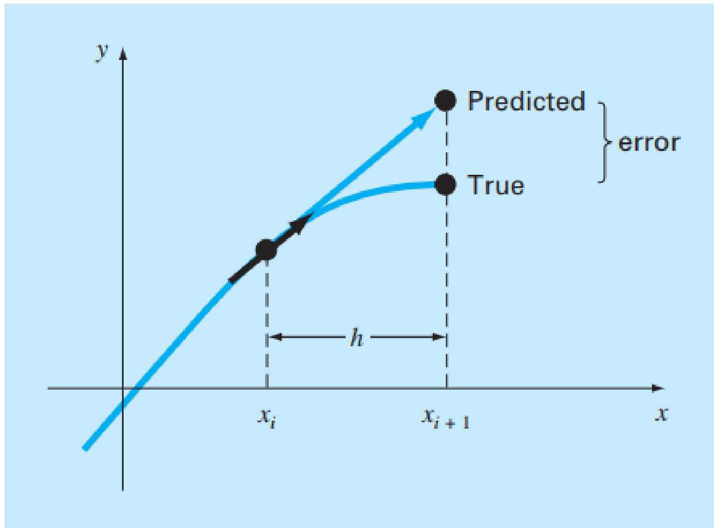
Pierwsza pochodna zapewnia bezpośrednie oszacowanie nachylenia w punkcie x_i: $\Phi = f(x_i, y_i)$ gdzie $\Phi = f(x_i, y_i)$ jest równaniem różniczkowym wyliczonym dla x_i i y_i.



Możemy zapisać:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h$$

To wyrażenie nosi nazwę metody Euler lub Euler-Cauchy'ego.



Nowa wartość y jest przewidywana na podstawie nachylenia (równego pierwszej pochodnej w punkcie x) ekstrapolacją liniową w przedziale o szerokości h