Całkowanie numeryczne

Marcin Chwedczuk Gleb Peregud

Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Politechnika Warszawska

29 Listopad 2011

Przypomnienie - Własności całek

Niech $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ będą funkcjami całkowalnymi w sensie Riemanna, niech F będzie funkcją pierwotną f $(F' = f)$, ponadto niech $c \in \mathbb{R}$ wtedy zachodzą następujące równości:

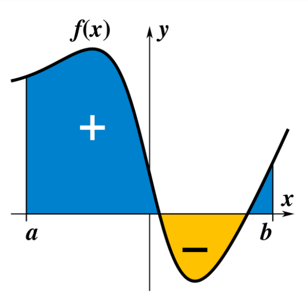
$$\int_a^b f = F(b) - F(a)$$

$$\int_a^b f = -\int_b^a f$$

$$\int_a^b f + g = \int_a^b f + \int_a^b g$$

$$\int_a^b cf = c \int_a^b f$$

Przypomnienie - Własności całek

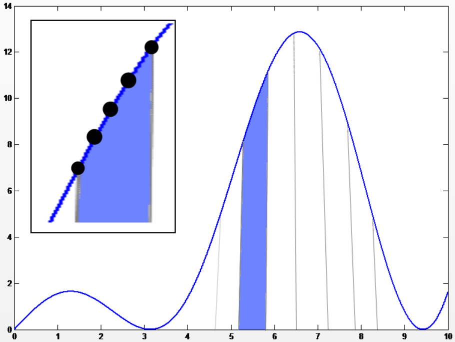


Okazuje się że całka oznaczona z funkcji f na przedziale $[a, b]$ odpowiada polu figury ograniczonej przez proste $x = a$ oraz $x = b$, wykres funkcji f oraz oś X. Przy czym pole figury leżące pod osią X uznajemy za "ujemne"

Idea algorytmów całkowania numerycznego

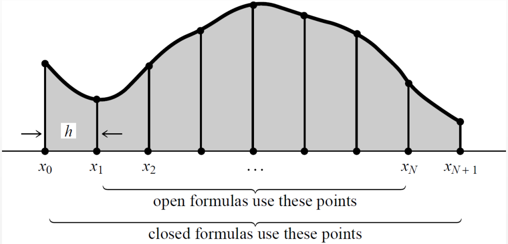
- Zamiast obliczać wartość całki z funkcji $\int_a^b f$ obliczmy pole figury którą tworzy wykres funkcji f z osią X
- Pole to obliczymy dzieląc przedział całkowania $[a, b]$ na wiele wąskich "pasków"
- Oszacujemy pole każdego z tych "pasków" korzystając z wartości funkcji f w kilku (niekoniecznie krańcowych) wybranych punktach - dalej będziemy te punkty nazywać węzłami
- Przekształcenia które na podstawie wartości funkcji w węzłach pozwalają obliczyć pole wycinka nazywamy **kwadraturami prostymi** lub **formułami prostymi**

Idea algorytmów całkowania numerycznego



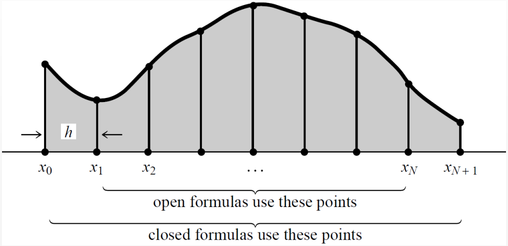
Rysunek: Wykres funkcji $f(x) = x + x\cos(x)$

Oznaczenia, Formuły złożone otwarte i zamknięte



- Formuły proste możemy dodawać do siebie, otrzymamy w ten sposób formuły złożone pozwalające obliczyć wartość całki na całym przedziale $[a, b]$

Oznaczenia, Formuły złożone otwarte i zamknięte

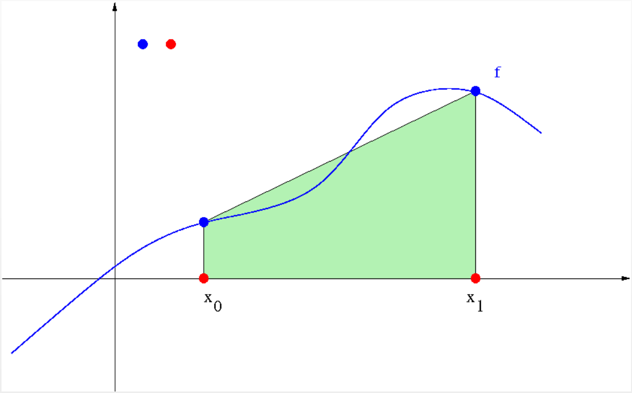


Przyjmijmy następujące oznaczenia:

- f - funkcja podcałkowa
- $[x_0, x_{N+1}]$ - przedział całkowania
- $x_i = x_0 + ih, \ i = 0, 1, \ldots, N+1$
- $f_i = f(x_i)$

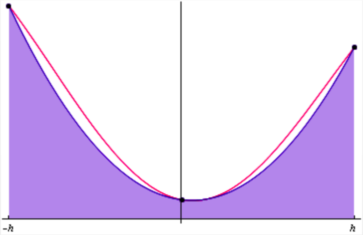
Kwadratury Newtona-Cotes'a - Kwadratura trapezów

$$\int_{x0}^{x1} f = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + O(h^3 f'')$$



Kwadratury Newtona-Cotes'a - Kwadratura Simpsona

$$\int_{x0}^{x2} f = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + O(h^5 f^{(4)})$$



Kwadratury Newtona-Cotes'a

Dwie pozostałe kwadratury mają znaczenie czysto teoretyczne...

Kwadratura Simpsona 3/8

$$\int_{x0}^{x3} f = \frac{h}{8}(3f_0 + 9f_1 + 9f_2 + 3f_3) + O(h^5 f^{(4)})$$

Kwadratura Boole'a

$$\int_{x0}^{x4} f = \frac{h}{45}(14f_0 + 64f_1 + 24f_2 + 64f_3 + 14f_4) + O(h^7 f^{(6)})$$

Formuły ekstrapolacyjne

- Poprzednio przedstawione formuły pozwalają nam dokonać całkowania na dowolnym przedziale zamkniętym $[a, b]$
- Niestety nie każda funkcja podcałkowa jest zdefiniowana na całym przedziale np. funkcja $\frac{1}{x}$ nie jest zdefiniowana w punkcie $x = 0$, a zatem stosując poprzednie formuły nie możemy obliczyć $\int_0^1 \frac{1}{x} dx$
- Dalej założymy że funkcja nie jest definiowana w punkcie x_0, natomiast jest definiowana w punktach $x_1, \ldots, x_n$

Formuły ekstrapolacyjne

- Wartość całki w przedziale $[x_0, x_1]$ postaramy się oszacować za pomocą wartości funkcji w punktach $x_1, \ldots, x_n$

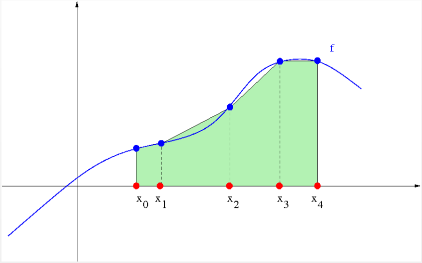
$$\int_{x0}^{x1} f = hf_1 + O(h^2 f')$$

$$\int_{x0}^{x1} f = \frac{h}{2}(3f_1 - f_2) + O(h^3 f'')$$

$$\int_{x0}^{x1} f = \frac{h}{12}(23f_1 - 16f_2 + 5f_3) + O(h^4 f^{(3)})$$

Kwadratura trapezów

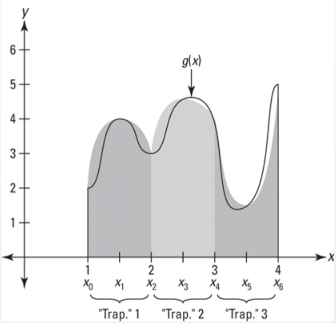
$$\int_{x_0}^{x_{N+1}} f = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$



Rysunek: Poprzez wielokrotne zastosowanie prostej kwadratury trapezów do pod przedziałów $[x_i, x_{i+1}]$ otrzymujemy złożoną kwadraturę trapezów

Kwadratura Simpsona

$$\int_{x_0}^{x_{N+1}} f = h\left[\frac{1}{3}f_0 + \frac{4}{3}f_1 + \frac{2}{3}f_2 + \ldots + \frac{4}{3}f_N + \frac{1}{3}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^4})$$



Rysunek: Poprzez wielokrotne zastosowanie reguły Simpsona do pod przedziałów $[x_i, x_{i+1}]$ otrzymujemy rozszerzoną regułę Simpsona

Złożone formuły otwarte

Otwarta formuła bazująca na kwadraturze trapezów

$$\int_{x_0}^{x_{N+1}} f = h\left[\frac{3}{2}f_1 + f_2 + \ldots + f_{N-1} + \frac{3}{2}f_N\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

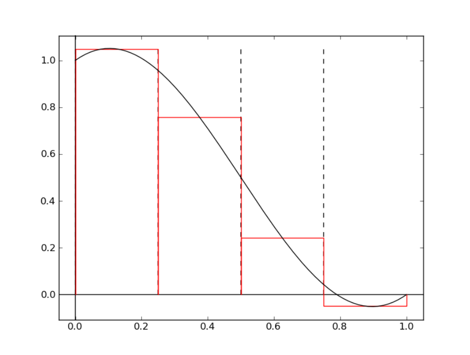
Otwarta formuła bazująca na regule Simpsona

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_N} f(x)dx = h\Bigg[&\frac{23}{12}f_2 + \frac{7}{12}f_3 + f_4 + f_5 + \\ &\cdots + f_{N-3} + \frac{7}{12}f_{N-2} + \frac{23}{12}f_{N-1}\Bigg] \\ &+ O\left(\frac{1}{N^3}\right)\end{aligned}$$

Złożone formuły otwarte

Kwadratura prostokątów (kwadratura punktu środkowego)

$$\int_{x_0}^{x_{N+1}} f = h\left[f_{\frac{1}{2}} + f_{\frac{3}{2}} + \ldots + f_{\frac{N-2}{2}} + f_{\frac{N}{2}}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$



Algorytmy

Algorytm kwadratury trapezów

```
#define FUNC(x) ((*func)(x))

float trapzd(float (*func)(float),
             float a, float b, int n) {
    float x, tnm, sum, del;
    static float s;
    int it, j;
    if (n == 1) {
        return (s=0.5*(b-a)*(FUNC(a)+FUNC(b)));
    } else {
        for (it=1, j=1; j < n-1; j++) it <<= 1;
        tnm = it; del = (b - a) / tnm;
        x = a + 0.5*del;
        for (sum=0.0, j=1;j<=it;j++,x+=del)
            sum+=FUNC(x);
        s=0.5*(s+(b-a)*sum/tnm);
        return s;
    }
}
```

Algorytm przyrostowy kwadratury trapezów

```
#define EPS 1.0e-5
#define JMAX 20

float qtrap(float (*func)(float), float a, float b)
{
    int j;
    float s,olds=0.0;

    for (j=1;j<=JMAX;j++) {
        s=trapzd(func,a,b,j);
        if (j > 5)
            if (fabs(s-olds) < EPS*fabs(olds) ||
                (s == 0.0 && olds == 0.0)) return s;
        olds=s;
    }
    error("Too␣many␣steps␣in␣routine␣qtrap");
}
```

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

Złożona kwadratura trapezów:

$$\int_a^b f = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

Złożona kwadratura trapezów:

$$\int_a^b f = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S_N = \int_a^b f$$

$$N = 2 * k$$

$$S_N = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

Złożona kwadratura trapezów:

$$\int_a^b f = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S_N = \int_a^b f$$

$$N = 2 * k$$

$$S_N = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S_{\frac{N}{2}} = h\left[\frac{2}{2}f_0 + 2f_2 + 2f_4 + \ldots + 2f_{N-3} + 2f_{N-1} + \frac{2}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

$$S_N = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S_{\frac{N}{2}} = h\left[\frac{2}{2}f_0 + 2f_2 + 2f_4 + \ldots + 2f_{N-3} + 2f_{N-1} + \frac{2}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S = \frac{4}{3}S_N - \frac{1}{3}S_{\frac{N}{2}}$$

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

$$S_N = h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_N + \frac{1}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S_{\frac{N}{2}} = h\left[\frac{2}{2}f_0 + 2f_2 + 2f_4 + \ldots + 2f_{N-3} + 2f_{N-1} + \frac{2}{2}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

$$S = \frac{4}{3}S_N - \frac{1}{3}S_{\frac{N}{2}}$$

$$\int_{x_0}^{x_{N+1}} f = h\left[\frac{1}{3}f_0 + \frac{4}{3}f_1 + \frac{2}{3}f_2 + \ldots + \frac{4}{3}f_N + \frac{1}{3}f_{N+1}\right] + O(\frac{1}{N^4})$$

Złożona kwadratura Simpsona!

Algorytm przyrostowy kwadratury Simpsona

```
#define EPS 1.0e-5
#define JMAX 20

float qsimp(float (*func)(float), float a, float b) {
    int j;
    float s,st,ost=0.0,os=0.0;

    for (j=1;j<=JMAX;j++){
        st=trapzd(func,a,b,j);
        s=(4.0*st-ost)/3.0;
        if (j > 5)
            if (fabs(s-os) < EPS*fabs(os) ||
                (s == 0.0 && os == 0.0)) return s;
        os=s;
        ost=st;
    }
    error("Too␣many␣steps␣in␣routine␣qsimp", 10);
}
```

Algorytm Romberga

Metoda bazuje na ekstrapolacji Richardsona, i jest definiowana następująco:

$$R(0,0) = \frac{1}{2}(b-a)(f(a)+f(b))$$

$$R(n,0) = \frac{1}{2}R(n-1,0) + h_n \sum_{k=1}^{2^{n-1}} f(a+(2k-1)h_n)$$

$$R(n,m) = \frac{4^m R(n,m-1) - R(n-1,m-1)}{4^m - 1}$$

where

$$n \geqslant 1, m \geqslant 1$$

$$h_n = \frac{b-a}{2^n}$$

Algorytm Romberga

- $R(0,0)$ - kwadratura trapezów
- $R(n,0)$ - złożona kwadratura trapezów na $2^n + 1$ węzłach
- $R(n,1)$ - złożona kwadratura Simpsona na $2^n + 1$ węzłach
- $R(n,2)$ - złożona kwadratura Boole'a na $2^n + 1$ węzłach
- Rozwinięcia po m eliminują coraz więcej najbardziej znaczących wyraz błędu.
- Dalsze rozwinięcia po m nie są już kwadraturami Newtona-Cotes'a, ale są stabilniejsze.
- Rozwinięcia po n zwiększają ilość węzłów.

Algorytm Romberga

```
#define MAX 6
double romb(float (*func)(float), float a, float b) {
    double s[MAX];
    int m,n;
    double var;
    for (m = 0; m < MAX; m++) s[m] = 1;
    for (n = 0; n < MAX; n++) {
        for (m = 0; m <= n; m++) {
            if (m==0) {
                var = s[m];
                s[m] = trapzd(func, a, b, n);
            } else {
                s[n]= ( pow(4 , m-1) * s[m-1] - var )
                    / (pow(4, m-1) - 1);
                var = s[m]; s[m]= s[n];
            }
        }
    }
    return s[MAX-1];
}
```

Całki niewłaściwe

- Wartość funkcji nieokreślona na jednej z granic
- Górna lub dolna granica to nieskończoność
- Funkcja jest nieskończona, ale całkowalna na jednej z granic
- Funkcja jest nieskończona, ale całkowalna w znanym miejscu w przedziale całkowania
- Funkcja jest nieskończona, ale całkowalna w nieznanym miejscu w przedziale całkowania

Całki niewłaściwe - podejście - punkty środkowe

- Podstawa - otwarta formuła bazująca na kwadraturze punktów środkowych:

$$\int_{x_1}^{x_{N+1}} f = h\left[\frac{3}{2}f_1 + f_2 + \ldots + f_{N-1} + \frac{3}{2}f_N\right] + O(\frac{1}{N^2})$$

- Potrajamy, zamiast podwajać
- $$S = \frac{9}{8}S_N - \frac{1}{9}S_{\frac{N}{2}}$$

Całki niewłaściwe - podejście - zmiana przestrzeni

- $$ab > 0$$
$$\int_a^b f(x)dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f(\frac{1}{t})dt$$

Całki niewłaściwe - podejście - zmiana przestrzeni

- $$ab > 0$$
  $$\int_a^b f(x)dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f(\frac{1}{t})dt$$

- $$ab < 0 \wedge a \neq -\inf$$
  $$\int_a^b f(x)dx = \int_a^v f(x)dx + \int_{1/v}^{1/a} \frac{1}{t^2} f(\frac{1}{t})dt \quad \text{where } v > 0$$

Całki niewłaściwe - podejście - zmiana przestrzeni

- W przypadku funkcji nieskończonej, ale całkowalnej w dolnej granicy:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{1-\gamma}\int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a)dt$$

Całki niewłaściwe - podejście - zmiana przestrzeni

- W przypadku funkcji nieskończonej, ale całkowalnej w dolnej granicy:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{1-\gamma}\int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a)dt$$

- ... w górnej granicy:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{1-\gamma}\int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(b - t^{\frac{1}{1-\gamma}})dt$$

- I tak dalej.

Całki wielowymiarowe

Problemy:

- Ilość pracy szybko rośnie
- Skomplikowane granice

Rozwiązania:

- Monte-Carlo
- Iteracyjnie zmniejszać liczbę wymiarów
- Sparse grids

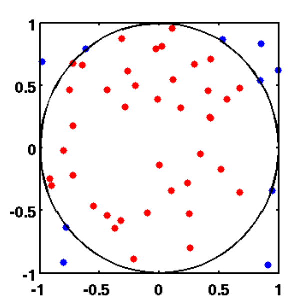
Całki wielowymiarowe

Iteracyjne podejście, przykład:

$$\int\int\int dxdydzf(x,y,z) = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dx \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz\, f(x,y,z)$$

Całki wielowymiarowe

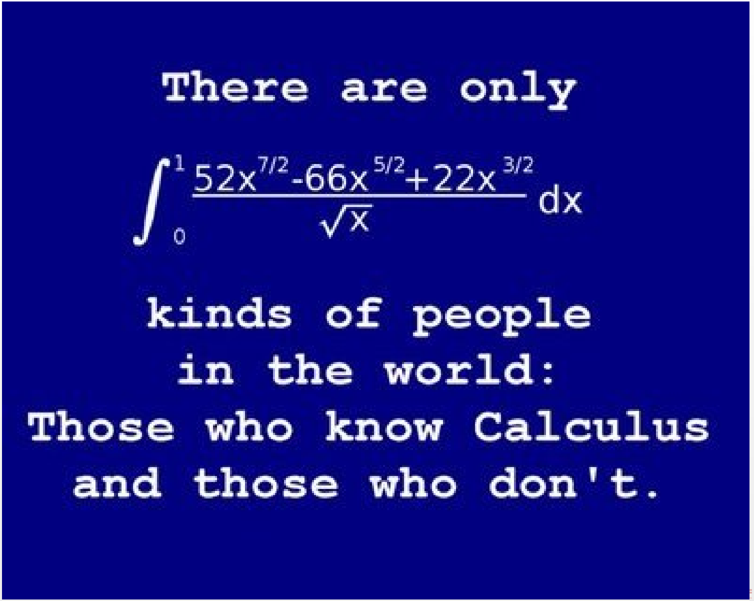
Monte-Carlo



$$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \ldots \int_{a_n}^{b_n} dx_n \, f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \approx \frac{|V|}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\bar{x}_i)$$

- Kwadratury Gaussa
- Kwadratury Gaussa-Legendre
- Kwadratury Gaussa-Chebysheva
- Kwadratury Gaussa-Hermite'a
- Kwadratury Gaussa-Laguerre
- Kwadratury Gaussa-Jacobi

THE END


There are only
$\int_0^1 \frac{52x^{7/2}-66x^{5/2}+22x^{3/2}}{\sqrt{x}}\,dx$
kinds of people
in the world:
Those who know Calculus
and those who don't.

Bibliografia

- Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing* Wydanie drugie

Zakończenie

Pytania ?

Zakończenie

Dziękujemy za uwagę