Algorytmy Numeryczne – Zadanie 3: Całkowanie numeryczne

Celem tego zadania jest poznanie podstawowych metod całkowania numerycznego oraz ich zastosowań. Państwa zadaniem będzie zaimplementowanie, przetestowania oraz porównanie czterech z nich. Dodatkowo użyją Państwo tych metod do obliczenia różnych wartości pól i obwodów obszarów oraz długości krzywych. W zadaniu dodatkowym będą mogli Państwo zapoznać się z metodami przybliżenia całek niewłaściwych na potrzeby rachunku prawdopodobieństwa.

I. WSTĘP

Problem znalezienia wartości całki oznaczonej jest jednym z centralnych problemów analizy matematycznej. Ma on wiele zastosowań nie tylko w rozważaniach matematycznych ale również w wielu innych dziedzinach.

Okazuje się jednak, że problem ten nie jest trywialny. Podstawowa metoda polegająca na znalezieniu funkcji pierwotnej (całki nieoznaczonej) nie zawsze może być użyta. Wynika to z faktu, że funkcja pierwotna z całkowalnej funkcji elementarnej nie musi być funkcją elementarną. Co więcej, samo stwierdzenie czy dana funkcja posiada całkę będącą funkcją elementarną nie jest prostym zadaniem. Ponadto, nawet jeśli taka elementarna funkcja pierwotna istnieje to jej znalezienie może nie być łatwe używając tylko podstawowych metod rachunku całkowego. Jest to sytuacja o wiele trudniejsza niż na przykład przy różniczkowaniu. Dla każdej, różniczkowalnej funkcji elementarnej jej pochodna zawsze jest funkcją elementarną. Istnieją również proste metody pozwalające obliczenie dowolnej pochodnej tego typu.

Z tego powodu często zamiast szukania funkcji pierwotnej i obliczania całki oznaczonej w sposób analityczny stosuje się przybliżone metody całkowania numerycznego. Celem tego zadania będzie zapoznanie się z podstawowymi z tych metod, porównanie ich dokładności oraz przeanalizowanie kilku ich zastosowań.

II. METODY CAŁKOWANIA NUMERYCZNEGO

Znane jest wiele metod obliczania wartości całki oznaczonej w sposób przybliżony. Państwa zadaniem będzie zapoznanie się oraz zaimplementowanie trzech z nich:

A1 metodą prostokątów,

A2 metodą trapezów,

A3 metodą Simpsona oraz

A4 całkując analitycznie wielomiany trzeciego stopnia uzyskane z interpolacji funkcjami sklejanymi (algorytm CSI).

Ponieważ Algorytm A3 wymaga rozwiązania rzadkiego układu równań liniowych mogą Państwo w tym celu wykorzystać część rozwiązania z projektu drugiego lub funkcje wbudowane z odpowiednich bibliotek.

Dla każdej implementacji należy wykonać test dla rożnych ilości podziałów przedziału oraz dla kilku funkcji, których całkę potrafią Państwo policzyć analitycznie.

III. ZASTOSOWANIA

Całki mają niezliczone zastosowania zarówno w matematyce, naukach ścisłych, naukach technicznych jak i innych dziedzinach nauki.

A. Pole powierzchni

Jednym z najbardziej podstawowych zastosowań całek jest liczenie pola. Załóżmy, że funkcja $f : [a, b] \to [0, \infty)$ jest całkowalna. Wtedy wartość całki oznaczonej

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{1}$$

jest równa wartości pola figury ograniczonej z dołu przez oś x, z lewej strony przez prostą $x = a$, z prawej strony przez prostą $x = b$ oraz z góry przez wykres funkcji $f(x)$. Twierdzenie to pozwala nam obliczać (korzystając z całek) pola powierzchni różnego rodzaju obszarów. Państwa zadaniem będzie policzenie w ten sposób pól poniższych figur:

S1 pola koła o promieniu 1 (i wyznaczenie z niego przybliżenia wartości liczby π),

S2 Pole pod wykresem paraboli na przedziale $[0, 1]$,

S3 Pole elipsy (dla kilku elips różnych wartościach półosi a oraz b)

S4 Pole pod wykresem funkcji sinus na przedziale $[0, \pi]$.

W podpunktach, w których znane są wzory jawne na dane pole należy porównać je z wartością otrzymaną z przybliżenia całką.

B. Długość krzywej

Kolejnym użytecznym zastosowaniem całek jest liczenie długości krzywych zadanych wzorem. Załóżmy, że dana jest krzywa zadana funkcją różniczkowalną $f(x)$. Wtedy długość L_K krzywej $K(x) := [x, f(x)]$ na przedziale $[a, b]$ dana jest wzorem

$$L_K = \int_a^b \sqrt{1 + (f'(x))^2} \mathrm{d}x. \tag{2}$$

Tutaj Państwa zadaniem będzie policzenie w ten sposób długości poniższych krzywych:

L1 obwód koła o promieniu 1 (i wyznaczenie z niego przybliżenia wartości liczby π),

L2 obwód elipsy (dla kilku elips różnych wartościach półosi a oraz b)

L3 długość krzywej sinus na przedziale $[0, 2\pi]$.

Podobnie jak w przypadku pól jeśli znane są wzory jawne na dane pole należy porównać je z wartością otrzymaną z przybliżenia całką.

C. *Przykład zastosowania w rachunku prawdopodobieństwa

Uwaga: zadania z tej sekcji nie są obowiązkowe ale ich wykonanie może podnieść punktację, w przypadku jakiś braków w innych częściach rozwiązani projektu.

Ostatnim przykładem zastosowań, który omówimy jest zastosowanie całek w rachunku prawdopodobieństwa. W przypadku zmiennych losowych ciągłych całki są podstawowym narzędziem obliczania prawdopodobieństw.

Uwaga: w sekcji tej nie będziemy wnikać w formalne detale techniczne. Osoby zainteresowane zachęcam do zajrzenia do dowolnej książki do rachunku prawdopodobieństwa.

Zdecydowanie najczęściej używanym rozkładem prawdopodobieństwa jest tak zwany rozkład normalny (nazywany też rozkładem Gaussa). Funkcja gęstości rozkładu normalnego $f(x)$ (w przypadku standardowym gdzie wartość średnia wynosi zero a wariancja wynosi jeden) ma postać

$$f(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{3}$$

W celu obliczenia prawdopodobieństwa w rozkładzie normalnym konieczne jest liczenie całek oznaczonych postaci

$$\int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{4}$$

Okazuje się jednak, że funkcja f jest przykładem funkcji całkowalnej, której funkcja pierwotna nie jest funkcją elementarną. Dlatego, w większości przypadków nie możemy liczyć jej wartości analitycznie i musimy korzystać z metod numerycznych.

Państwa zadaniem będzie oszacowanie wartości I zadanej przez całkę niewłaściwą

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{5}$$

Ponieważ mamy tu do czynienia z całką niewłaściwą będzie to wymagać przemyślenia algorytmu numerycznego. Nie można oczywiście równo podzielić nieskończonego przedziału. Nie możemy również otrzymać przedziałów o dowolnie dużych końcach ze względu na ograniczenia komputer. Dlatego możliwym podejściem jest zastąpienie w praktyce nieskończoności odpowiednio dużymi liczbami.

Zauważmy również, że dominująca wartość całki dla tej konkretnej funkcji będzie pochodzić z argumentów niezbyt odległych od zera. Dlatego obliczenia należy przeprowadzić w dwóch wersjach:

I1* z równym podziałem,

I2* najpierw dzieląc przedział całkowania na trzy pod przedziały $(-\infty, -c)$, $[-c, c]$ oraz (c, ∞) a następnie obliczać numerycznie całki dla każdego pod przedziału osobno przy czym w środkowym należy zastosować większą gęstość podziałów.

Uwaga: Można w sprytny sposób (bez liczenia funkcji pierwotnej) pokazać analitycznie, że $I = 1$, jednak wymaga to specjalistycznego i dość skomplikowanego podejścia. Ponownie osoby zainteresowane dowodem odsyłam do odpowiedniej literatury np. https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_integral.

IV. HIPOTEZY

H1 Metoda A2 daje dokładniejsze wyniki niż metoda A1.

H2 Metoda A3 daje dokładniejsze wyniki niż metoda A2.

H3 Metoda A4 daje dokładniejsze wyniki niż metoda A3.

H4 Dla wszystkich metod błędy maleją wraz ze wzrostem liczby punktów węzłowych rozmieszczonych równomiernie na zadanym przedziale.

H5 Zastosowanie metod całkowania numerycznego pozwalają przybliżyć wartość liczby π z większą dokładnością niż metody z projektu 1.

H6* Zastosowanie nierównomiernego podziału punktów węzłowych pozwala z większą dokładnością przybliżyć wartość całki niewłaściwej (porównanie punktów I1 oraz I2).

V. DODATKOWE INFORMACJE

A. Praca zespołowa

Zadanie można wykonać w zespole dwu lub trzy osobowym. W takim przypadku proszę dokładnie oznaczy jaki był zakres pracy członków zespołu. W oddaniu projektu musi uczestniczyć cały zespół.

B. Wymagania dodatkowe

W przypadku implementacji metod A1 – A4 należy wykonać testy dla kilku (co najmniej trzech) istotnie różnych funkcji. Powinni Państwo dobrać te funkcje tak aby byli w stanie Państwo obliczyć analitycznie całkę z danej funkcji oraz wartość całki oznaczonej na danym przedziale. Dodatkowo należy zrobić dla każdej z funkcji test dla różnych liczb podziałów danego przedziału. Umożliwi to porównanie i wyznaczenie błędów dla danych metod. Na tej postawie należy odpowiedzieć na hipotezy H1 – H4.

W przypadku zadań S1 – S4 oraz L1 – L3 wystarczy przeprowadzić jeden test, wybierając możliwie dużą liczę przedziałów. Jeżeli dla danego podpunktu znany jest wzór jawny należy porównać wartość otrzymaną z obliczeń numerycznych z w wartością dokładną otrzymaną analitycznie. Na końcu należy odpowiedzieć na hipotezę H5 porównując odpowiedni wynik z tymi z projektu 1.

Dla zadań dodatkowych I1*, I2* trzeba przeprowadzić testy dla różnych liczby podziałów przedziału ale porównywać te same ilości podziałów dla podpunktów I1* oraz I2* odpowiednio. Dodatkowo należy sprawdzić kilka wartości stałej c. Pozwoli to dopowiedzieć na hipotezę H6*.

VI. DLA ZAINTERESOWANYCH

Jak zauważyliśmy we wstępie, całkowanie symboliczne czyli problem znalezienia dokładnej postaci funkcji pierwotnej danej funkcji elementarnej nie jest łatwym zadaniem.

W 1968 roku Robert Henry Risch stworzył algorytm, który (przy pewnych założeniach) dla dowolnej funkcji elementarnej jest w stanie stwierdzić czy jego funkcja pierwotna jest funkcją elementarną a jeśli tak to ją wyznaczyć. Algorytm ten, znany dziś jako algorytm Rischa, działa poprzez zamianę problemu całkowania na pewne problemy z dziedziny algebry. jest on jednak niezwykle skomplikowane i trudny w implementacji. Z tego powodu do dziś nie istnieje jego pełna implementacja. Jednak w wielu programach, pakietach i bibliotekach matematycznych można znaleźć częściową implementację algorytmu Rischa lub innych bazujących na nim algorytmach.

Zainteresowane osoby zachęcam do zapoznania się z artykułem na Wikipedii: https://en.wikipedia.org/wiki/Risch_algorithm jak również poszukania innych źródeł na ten temat.