Numerikus integrálás

2019. március 11.

Integrálás

A deriválás papíron is automatikusan elvégezhető feladat.

Az analitikus integrálás ezzel szemben problémás

- vannak szabályok, de nem minden integrálható analitikusan
- a szabályokat ugyan be lehet programozni a gépbe (Id. Mathematica)
- ez az ún. *szimbolikus integrálás*
- analitikus alakot ad
- ez nagyon nehéz, mi nem tanuljuk meg hogyan kell
- a legtöbb esetben nem is működik

Numerikus integrálás

Amit mi tanulunk: *numerikus integrálás* (kvadratúra)

- ez nem analitikus alakot ad, hanem konkrét számértékeket

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

- f analitikusan adott függvény, a és b pedig számok

Numerikus integrálás

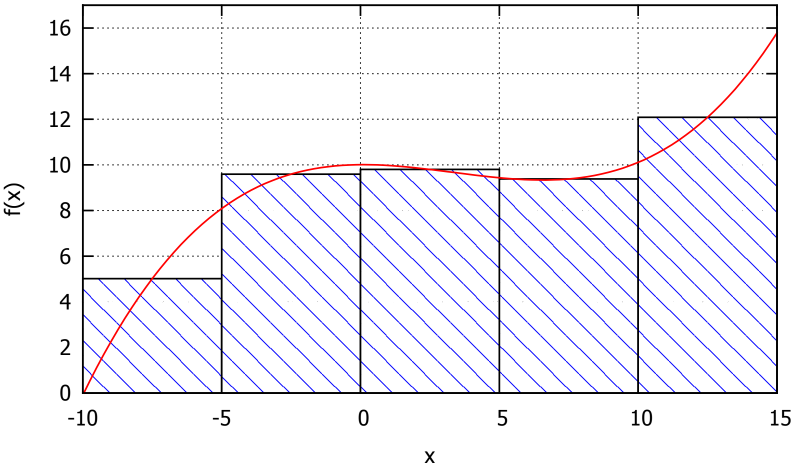
Az eljárás alapötlete

- az integrálandó intervallumot diszkretizáljuk
- a diszkrét pontokban felvett függvényértéket kiszámítjuk
- az függvényértékeket az intervallum hosszával szorozzuk
- az így kiszámolt „területeket” összeadjuk

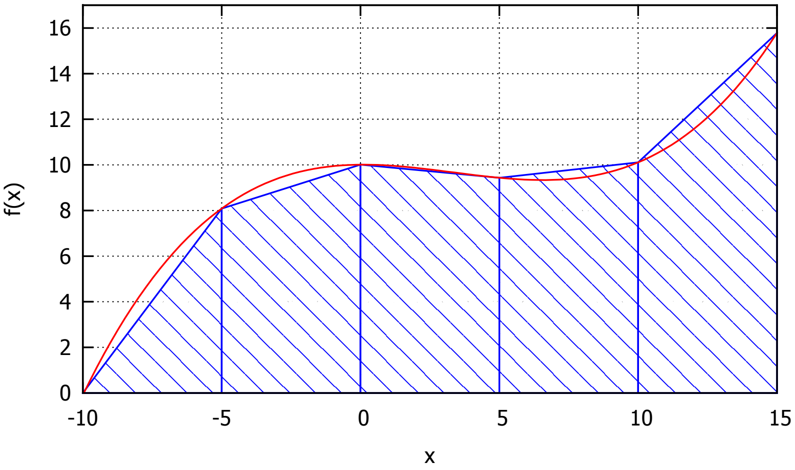
Cél:

- az f függvényt minél kevesebbszer kiértékelve
- minél pontosabban közelítsük az eredményt

Téglalapmódszer



Trapézmódszer



A trapézmódszer

Egyetlen integrálási szakaszra:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{1}{2}f(x_i) + \frac{1}{2}f(x_{i+1})\right] + O(h^3 f'')$$

A trapézszabály valójában a szakaszhatárok közötti lineáris interpoláció

- szakaszonként lineáris függvényekre egzakt
- magasabb rendű függvények esetén a hibája $O(h^3 f'')$ módon skálázik

Az $O(h^m f^{(n)})$ jelölés

Az $O(h^3 f'')$ jelölés jelentése

- a korrekció h^3 megszorozva az integrált függvény második deriváltjának az $[x_1, x_2]$ szakaszon felvett tetszőleges értékével
- ha a második derivált valahol nagyon nagy, akkor a módszer instabil

Az együtthatók meghatározása

Csak egy $[x_1, x_2]$ intervallumot nézünk.

Keressük az intervallum integráljának közelítését a következő alakban:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\alpha f(x_1) + \beta f(x_2)\right]$$

Behelyettesítve $f(x) = 1$ nullad, illetve $f(x) = x$ elsőrendű polinomot – emlékezve, hogy $h = x_2 - x_1$ – egyenletrendszert kapunk α-ra és β-ra:

$$\begin{aligned} x_2 - x_1 &= h\left[\alpha + \beta\right] \\ \frac{x_2^2 - x_1^2}{2} &= h\left[\alpha x_1 + \beta x_2\right] \end{aligned}$$

Ez pont a trapézformula:

$$\Rightarrow \quad \alpha = \frac{1}{2} \qquad \beta = \frac{1}{2}$$

Integrálás polinomok segítségével

A trapézmódszer látványosan jobb, mint a téglalap módszer:

- N helyett $N+1$ függvénykiértékelés, ugyanakkor
- láthatóan sokkal nagyobb pontosság
- hevesen változó függvény esetén N-et nagyon meg kellene növelni

Az eljárás elvileg folytatható

- az integrálandó szakaszokat polinomokkal közelítjük
- a polinomokat tudjuk integrálni, de
- tudjuk, hogy magas rendben problémákat okoznak

Zárt Newton–Cotes-formulák

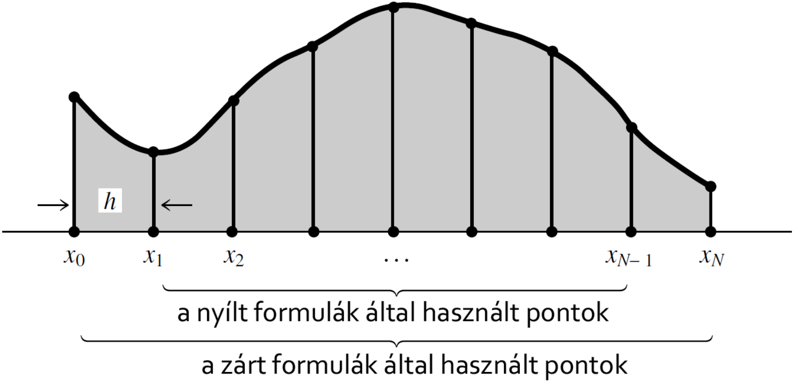
Legyen adott az f jó tulajdonságokkal bíró függvény, és az $[a, b]$ intervallum, amin integrálnunk kell. Legyen

- N az integrálási szakaszok száma, és
- $h = \frac{b-a}{N}$ az integrálási szakaszok hossza
- N–C-formuláknál a szakaszok hossza mindig azonos

Egy-egy intervallumban közelítsük a függvény k-ad rendű polinommal.

- ehhez intervallumonként $k + 1$ helyen kell f-et kiértékelni
- de az intervallumok összeérnek
- összes kiértékelések száma: $Nk + 1$

Zárt és nyílt formulák



A Simpson-szabály

Például másodrendben:

- az eredeti h hosszú intervallumot két egyenlő részre osztjuk
- $x_{i+\frac{1}{2}}$ az intervallum felezőpontja

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left[\frac{1}{3}f(x_i) + \frac{4}{3}f(x_{i+1/2}) + \frac{1}{3}f(x_{i+1})\right] + O(h^5 f^{(4)})$$

Ez előző alapján azt várnánk, hogy ez $O(h^4)$ pontos, de a szerencse folytán két tag pont kiejti egymást.

A magasabb rend nem feltétlen jelent nagyobb pontosságot

- csak ha az f függvény kellően sima, azaz
- a magasabb rendű deriváltak kicsik

Még magasabb rend? Csökken-e a hiba?

Simpson-féle $\frac{3}{8}$-ados szabály:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$\frac{h}{3}\left[\frac{3}{8}f(x_i) + \frac{9}{8}f(x_{i+1/3}) + \frac{9}{8}f(x_{i+2/3}) + \frac{3}{8}f(x_{i+1})\right] + O(h^5 f^{(4)})$$

Bode-féle szabály:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$\frac{h}{4}\left[\frac{14}{45}f(x_i) + \frac{64}{45}f(x_{i+1/4}) + \frac{24}{45}f(x_{i+1/2}) + \frac{64}{45}f(x_{i+3/4}) + \frac{14}{45}f(x_{i+1})\right]$$

$$+O(h^7 f^{(6)})$$

A felösszegzett trapézszabály

Állítsuk elő a integrált trapézok összegéből:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= h\left[\frac{1}{2}f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_N) + \frac{1}{2}f(x_{N+1})\right] + \\ &+ O\left(\frac{(b-a)^3 f''}{N^2}\right)\end{aligned}$$

Itt most $[a, b]$ intervallumon integrálunk

- ez N *egyenlő*, $h = \frac{b-a}{N}$ intervallumra van osztva
- $N + 1$ függvénykiértékelés szükséges

A hiba N^{-2}-vel skálázik

- ha a felosztások számát duplájára növeljük, akkor a hiba negyedére csökken
- de az is kell, hogy f'' értéke sehol se legyen túl nagy

Magasabb rendű felösszegzett formulák

Az interpolálásra magasabb rendű függvényeket használunk

- pl. köbös spline
- a köbös spline integrálját analitikusan ismerjük
- az együtthatók meghatározása eléggé elbonyolódik...

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\tfrac{3}{8}f_1 + \tfrac{7}{6}f_2 + \tfrac{23}{24}f_3 + f_4 + f_5 \right.$$

$$\left. \ldots + f_{N-4} + f_{N-3} + \tfrac{23}{24}f_{N-2} + \tfrac{7}{6}f_{N-1} + \tfrac{3}{8}f_N\right]$$

$$+O\left(\frac{1}{N^4}\right)$$

Nyílt integrálási formulák

Előfordul, hogy a függvény nem értékelhető ki az integrálási szakasz egyik vagy másik végpontjában

- ekkor a zárt formulák nem működnek
- nyílt formulákat kell használni

Például a trapéz szabály alapján:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[f_{1/2} + f_{3/2} + \ldots + f_{N-1/2}\right] + O(1/N^2)$$

- ez kísértetiesen hasonlít a sima téglányösszegre (mert az)
- a hibája ezért nem is túl jó
- de vannak magasabb rendű változatai

Improprius integrálok

Ha az egyik vagy másik integrálási határ $\pm\infty$

- változóhelyettesítést kell alkalmazni

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right)\,\mathrm{d}t$$

- feltétel: $ab > 0$
- ha mindkét határ végtelen, vagy a határok előjele nem azonos, akkor két részre kell vágni, és úgy integrálni

Romberg-integrálás

Integráljuk a függvényt úgy, hogy egyre nagyobb számú szakaszra osztjuk az integrálási tartományt

- nézzük az integrál konvergenciáját, ahogy $h \to 0$
- a numerikusan számolt integrál értékeiből extrapolálunk

A módszer differenciálegyenletekre is működik

- Richardson-extrapoláció
- ügyesen választva a lépéshosszakat minimalizálható a függvénykiértékelések száma

Az integrál iteratív meghatározása

Állítsuk elő az integrált az $[a, b]$ intervallum felosztogatásával

- kiindulás: trapézszabály a teljes $[a, b]$ intervallumra
- ez lesz az első közelítés

$$I_1 = s_1 = (b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

- minden lépésben felezzük az intervallumokat
- és tekintjük az aktuális $h = \frac{b-a}{2}$ és a felezőpontban vett függvényérték szorzatát

$$s_2 = \frac{b-a}{2} f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

- ezzel javíthatjuk az integrál első becslését:

$$I_2 = \frac{1}{2}I_1 + s_2$$

Az integrál iteratív meghatározása

Eredmény az előző diáról:

$$s_2 = \frac{b-a}{2} f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} I_1 + s_2$$

- az $\frac{1}{2}$ együttható onnan adódik, hogy az intervallum a felére csökkent
- a függvényt mindig csak az új osztópontokban kell kiszámolni
- az előző közelítés eredményét mindig felhasználjuk
- addig kell folytatni, amíg az előző iterációtól való eltérés egy adott hiba alá nem csökken

Romberg-integrálás

Az értékeket egy táblázatba rendezzük:

$$\begin{array}{llll} R_{0,0} & & & \\ R_{1,0} & R_{1,1} & & \\ R_{2,0} & R_{2,1} & R_{2,2} & \\ R_{3,0} & R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} \end{array}$$

- minden sor első eleme az $[a, b]$ intervallumra trapézszabállyal kiszámolt integrál

$$R_{0,0} = \frac{1}{2}(b-a)\left[f(a) + f(b)\right]$$

- a sor többi elemét a balra/fent levő elemekből számoljuk
- a sor utolsó eleme lesz az extrapolált érték

- addig kell folytatni, amíg a sor utolsó két elemének különbsége a hibahatár alá nem csökken: $|R_{n,n} - R_{n,n-1}| < \epsilon$
- minden sor elején újra kell számolni az integrált
- de az előző sorbeli függvénykiértékelések felhasználhatók

A Romberg-integrálás formulái

- minden sor első eleme az $[a, b]$ intervallumra trapézszabállyal kiszámolt integrál

$$R_{0,0} = \frac{1}{2}(b-a)\left[f(a) + f(b)\right]$$

- a következő sor nulladik elemét h finomításával kapjuk
- felhasználjuk a korábbi függvénykiértékeléseket

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

- a sor többi elemét extrapoláljuk az előző sor alapján

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

Függvények szingularitással

Ha egy függvénynek valahol szingularitása van

- csak ha a szingularitás integrálható
- megfelelő feldarabolással a határra vihető

Pl. ha a divergencia a pontban hatvány jellegű

- $(x-a)^\gamma$, ahol $0<\gamma<1$
- ekkor változóhelyettesítéssel

$$x = t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a, \quad \text{azaz} \quad t = (x-a)^{1-\gamma}$$

- erre jutunk

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{1-\gamma}\int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}}\, f\Big(t^{\frac{1}{1-\gamma}}+a\Big)\,\mathrm{d}t$$

Függvények kifejtése valamilyen bázison

Számítási szempontból néha előnyös lehet

- a függvény kifejtjük függvények ortogonális bázisán
- polinomok, Fourier-bázis, Legendre-polinom stb.

A bázisfüggvények egzakt integrálját tudjuk

- az adott függvény integrálja előáll az ismert integrálok és a kifejtési együtthatók szorzatának összegeként

Gauss-formulák

Ha az integrálandó függvény előáll egy polinom és egy speciális függvény szorzataként

$$\int_a^b W(x) f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{N} w_j f(x_j),$$

- ahol $f(x)$ polinom alakú
- $W(x)$ általában valamilyen integrálható szingularitást tartalmazó függvény
- a w_j együtthatókat és x_j értékeket polinomegyenletek megoldásaként kapjuk

Néhány $W(x)$ függvény

- Gauss–Csebisev:

$$W(x) = (1 - x^2)^{-1/2} \qquad -1 < x < 1$$

- Gauss–Laguerre:

$$W(x) = x^\alpha e^{-x} \qquad 0 < x < \infty$$

- Gauss–Hermite:

$$W(x) = e^{-x^2} \qquad -\infty < x < \infty$$

- Gauss–Jacobi:

$$W(x) = (1 - x)^\alpha (1 - x)^\beta \qquad -1 < x < 1$$

Többdimenziós integrálok

Nehéz probléma

- a függvényt nagyon sok pontban kell kiértékelni
- ha egy dimenzióban 100 pont kellett, akkor három dimenzióban 10^6 pont kell!

Az integrálási határok is bonyolultak

- egy dimenzióban intervallum
- magasabb dimenzióban egy $d-1$ dimenziós felület
- a tartomány lehet konkáv, nem összefüggő stb.

Ha az integrandusnak és a tartománynak van valamilyen szimmetriája, akkor van remény a gyors integrálásra

- pl.: gömbszimmetrikus
- ilyenkor az integrálás átírható egy dimenzióra (csak r szerint)

Többdimenziós integrálás felbontása

Ha az integrálási tartomány egyszerű, és a függvény nagyon sima

- használható többdimenziós Gauss-kvadratúra (nem vesszük), vagy
- az integrálás elvégezhető egydimenziós integrálok sorozataként

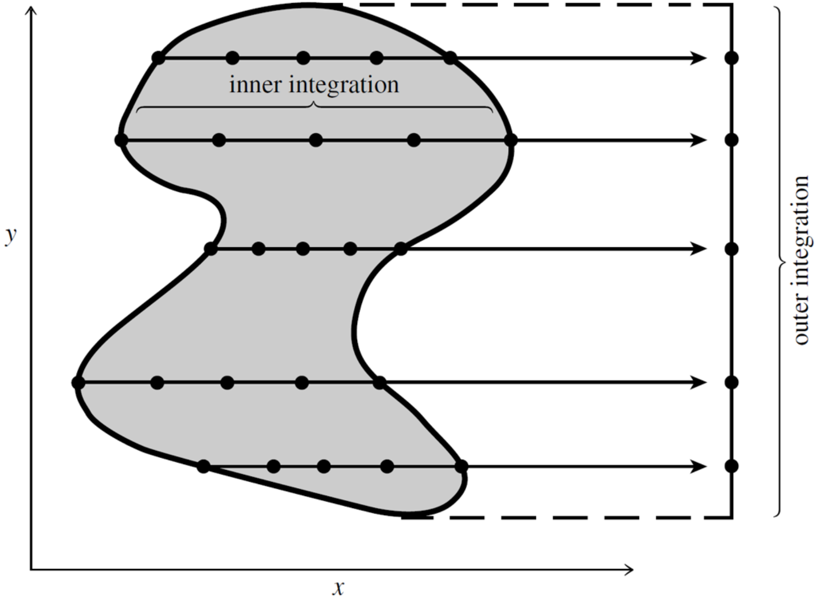
Átírva egydimenziós integrálokra:

$$
\begin{aligned}
I &= \iiint_R \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\; f(x,y,z) = \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} \mathrm{d}y \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} \mathrm{d}z\; f(x,y,z)
\end{aligned}
$$

Itt ügyelni kell a határokra

- x mentén haladva minden egyes függvénykiértékeléskor valójában egy kétdimenziós integrált kell elvégezni
- a „belső ciklus" nagyon drága lesz

Többdimenziós integrálás



Példa: integrálás két dimenzióban

Az f függvényt az origóra centrált egységkörön belül szeretnénk integrálni

- a kör egyenletéből a határvonal $y = \pm\sqrt{1-x^2}$
- ezzel:

$$\iint_R \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\; f(x,y) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}} \mathrm{d}y\; f(x,y)$$

A többdimenziós integrálás algoritmusa

Algoritmus az előző problémára

$$\iint_R \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\; f(x,y) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}} \mathrm{d}y\; f(x,y)$$

- felosztjuk a $[-1, 1]$ intervallumot N részre
- ciklussal végigmegyünk a felosztáson, ekkor x_i és x_{i+1} értéke mindig ismert
- elvégezzük a belső integrált az x_i és x_{i+1} értékek mellett
- ahogy haladunk x-ben, úgy folyamatosan felösszegzünk

Nem egyszerű:

- annyi egymásba ágyazott ciklus lesz, ahány dimenziós az integrál
- a legbelső ciklus egy egydimenziós integrált számol
- ügyelni kell a határra; nem mindig konvex vagy összefüggő