LAK - ćwiczenia nr 3
Całkowanie numeryczne

Celem zajęć jest zaprogramowanie wybranych metod całkowania numerycznego, oraz przedstawienie zastosowania metody Monte Carlo.

1. Całkowanie numeryczne

1.1. Uwagi wstępne

Ogólnie mówiąc metoda kwadratur obliczania całek oznaczonych

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

polega na zastąpieniu w przedziale całkowania $[a, b]$ funkcji podcałkowej $f(x)$ funkcją aproksymującą lub interpolującą $F(x)$ i przyjęciu równości

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b F(x)dx + R_F(x)$$

gdzie $R_F(x)$ oznacza błąd metody całkowania.

1.1.1. Zmiana granic całkowania na przedział $[0, 1]$

Całkę (1) można doprowadzić do postaci, w której granice całkowania są znormalizowane. Prosta zamiana zmiennych $x \to t = \frac{x-a}{b-a}$ prowadzi do zmiany granic całkowania z przedziału $[a, b]$ na $[0, 1]$:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\int_0^1 f\left(a + (b-a)\ t\right)\ dt\,. \tag{2}$$

1.1.2. Zmiana granic całkowania na przedział $[-1, 1]$

Zamiana zmiennych $x \to t = -1 + 2 \cdot \frac{x-a}{b-a}$ prowadzi do zmiany granic całkowania z przedziału $[a, b]$ na $[-1,\ 1]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \left(\frac{b-a}{2}\right)\int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\,t\right)\ dt\,. \tag{3}$$

Wzór (3) jest przydatny szczególnie przy obliczaniu wartości całki metodą opartą na wykorzystaniu ortogonalnych wielomianów Legendre'a, z uwagi na fakt, iż wszystkie pierwiastki tych wielomianów znajdują się właśnie w przedziale $(-1, 1)$.

1.2. Kwadratury Newtona-Coatesa

W kwadraturze Newtona-Coatesa rzędu n przybliżamy funkcję podcałkową $f(x)$ przez **wielomian interpolacyjny Lagrange'a** rzędu n o równoodległych węzłach.

W kwadraturze **prostej** stosuje się jeden wielomian interpolacyjny dla całego przedziału całkowania. Wadą tej metody jest konieczność użycia wielomianu interpolacyjnego wysokiego stopnia. Kwadratury tego typu nie będziemy rozważać na ćwiczeniach.

W przypadku kwadratury **złożonej** przedział całkowania dzieli się na podprzedziały, a następnie w każdym z nich prowadzi się odpowiedni wielomian interpolacyjny.

Elementarnymi (niskiego stopnia) przykładami złożonych kwadratur Newtona-Coatesa są poniżej rozważane metody **prostokątów** i **trapezów**.

1.2.1. Metoda prostokątow

Dla przedziału całkowania $[a, b] = [0, 1]$ definiujemy równomierny podział odcinka przy pomocy punktów tworzących wektor $x = [0, \frac{1}{n}, \frac{2}{n}, ..., \frac{n-1}{n}, 1]$ czyli taki, że $x_i = \frac{i}{n}$, $i = 0, 1, ...n$. Następnie przybliżamy całkę sumą:

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,. \tag{4}$$

Odpowiada to sumie pól prostokątów o wysokościach równych wartości funkcji na prawym krańcu przedziału $[x_{i-1}, x_i]$ i podstawie $1/n$. Zauważ, że nie wykorzystaliśmy wszystkich punktów x_i, których jest $n + 1$.

1.2.2. Metoda trapezów

Wykorzystujemy ponownie ten sam podział odcinka. Tym razem całkę przybliżamy sumą

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \tag{5}$$

Wyrażenia pod znakiem sumy interpretuje się jako pola trapezów o podstawach $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$ i wysokosci $1/n$.

1.3. Metoda Monte Carlo

Istotą metody Monte-Carlo jest odejście od równomiernego podziału przedziału całkowania równoodległymi wartościami x_i. Zamiast tego generuje się zbiór wartości losowych (najczęściej z rozkładu równomiernego), dla których następnie oblicza się odpowiednie wartości $f(x_i)$ całkowanej funkcji, które następnie stanowią podstawę do obliczenia poszukiwanej wartości całki, zgodnie ze wzorem:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\cdot\frac{\sum_{i=1}^{n} f(x_i)}{n}\,. \tag{6}$$

Procedura obliczania wartości całki funkcji $f(x)$ metodą Monte-Carlo (na przedziale $[0, 1]$):
— wygenerowanie `n`-elementowego wektora `x` liczb losowych z przedziału $[0, 1]$, według rozkładu równomiernego (polecenie `rand(1,n)`);
— wygenerowanie `n`-elementowego wektora `y` wartości funkcji $f(x_i)$, dla wartości x_i będących elementami wektora `x`;
— wbliczenie średniej arytmetycznej wartości wektora `y`.

Dla przedziału całkowania $[a, b]$ do losowania zbioru punktów można zastosować funkcję `grand`. W takim przypadku całkowanie funkcji f na przedziale $[-1, 1]$ polega na wylosowaniu np. $n = 1000$ punktów z tego przedziału (z rozkładu równomiernego), obliczenia zbioru wartości funkcji dla tych argumentów, natępnie obliczenia wartości średniej elementów tego zbioru, wreszcie pomnozenia przez długość przedziału całkowania:

```
--> a=-1; b=1; n=10^3;
--> x=grand(1,n,a,b);
--> y=f(x);
--> calka=(b-a)*mean(y)
```

Zadanie 1 (4 pkt.)

Utwórz funkcje `calkujP(f,n)`, `calkujT(f,n)`, `calkujMC(f,n)`do obliczania wartości całek metodami:
— prostokątów,
— trapezów,
— Monte Carlo.
Oblicz wartości następujących całek:
— $C_1 = \int_0^1 \left(x^3 + x^6\right) dx$
(dokładny wynik: $C_1 = \frac{11}{28} \simeq 0.392857$)
— $C_2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-x^2} dx$
(dokładny wynik: $C_2 = \mathrm{erf}(1)$, gdzie $\mathrm{erf}(x)$ to tzw. **funkcja błędu** (**error function**).
Zbadaj jak zmienia się błąd R każdej z metod wraz ze wzrostem liczby węzłów n. Wyniki przedstaw na wykresie $|R_i(n)|$, w skali liniowo-liniowej oraz logarytmiczno-logarytmicznej.

Zadanie 2 (3 pkt.)

Oblicz rzędy zbieżności rozważanych podczas zajęć metod całkowania:
— prostokątów (typu P i S),
— trapezów,
— Monte Carlo.
Uwaga - zagadnienie rzędu zbieżności było omawiane na zajęciach nr 2; wykorzystaj udostępnioną funkcję `mnkw.sci`, obliczającą współczynniki prostej najmniejszych kwadratów.