

I. Cel ćwiczenia

Celem czwartego ćwiczenia laboratoryjnego jest zapoznanie się z metodą całkowania numerycznego, która polega na przybliżonym obliczaniu całek oznaczonych. Realizacja przedmiotowych obliczeń w przyszłości ułatwi sformułowanie i realizację dowolnego problemu w środowisku programu Scilab.

II. Realizacja ćwiczenia laboratoryjnego

Uwaga: w czasie realizacji poszczególnych części ćwiczenia laboratoryjnego należy wspomagać się informacjami, które zawarto w podręcznej pomocy programu Scilab, uruchamianej klawiszem **FL**, niezależnie dla każdego aktywnego okna programu, lub rozkazem **help nazwa_instrukcji**, wprowadzaną (po znaku zachęty **-->**) w oknie głównym konsoli.

1. Wprowadzenie do metod całkowania numerycznego

Uwaga: poniżej zaprezentowano informacje, które są przypomnieniem materiału wcześniej zaprezentowanego na przedmiotowym wykładzie. Informacje te stanowią podbudowę teoretyczną do zadań z punktu 2 instrukcji laboratoryjnej.

Całkowanie numeryczne w obszarze jednowymiarowym jest często kojarzone z pojęciem **kwadratury**, którą można wyrazić w postaci zależności przybliżającej wartość liczonej całki:

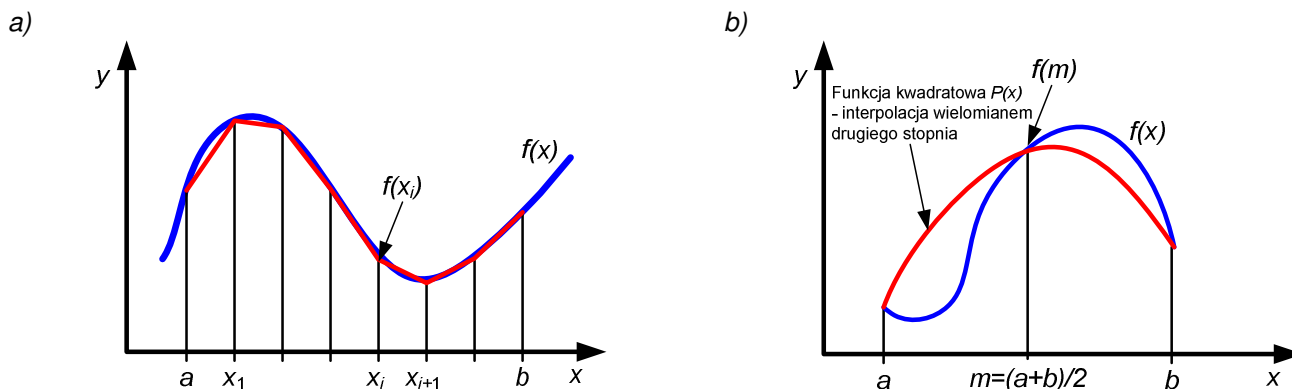
$$D(f) = \int_a^b f(x)dx, \quad P(f) = \sum_{i=0}^n F_i \cdot f(x_i), \quad \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n F_i \cdot f(x_i) \quad (1)$$

gdzie F_i oznacza współczynnik kwadratury, natomiast x_i – węzeł kwadratury.

Jeżeli znane jest dokładne rozwiązanie całki $D(f)$, a także uzyskano rozwiązanie numeryczne $P(f)$, to resztę kwadratury wyraża różnica $R(f)=D(f)-P(f)$.

Na podstawie równania (1) łatwo zauważyć, że proste metody całkowania numerycznego polegają na przybliżeniu całki za pomocą odpowiedniej sumy ważonej wartości całkowanej funkcji w kilku punktach. W celu uzyskania dokładniejszego przybliżenia, przedział całkowania należy podzielić na niewielkie fragmenty pomiędzy granicami przedziału $[a,b]$. Ostateczny wynik całkowania jest sumą wyników całek w poszczególnych fragmentach przedziału $[a,b]$. Najczęściej przedział dzielony jest na równe fragmenty, jednak w zaawansowanych algorytmach, krok podziału dostosowany jest do zmienności całkowanej funkcji, co znacząco poprawia efektywność obliczeń numerycznych (bardziej dokładny wynik obliczeń uzyskany w krótszym czasie).

Ideę całkowania numerycznego funkcji jednej zmiennej łatwo zobrazować na dwóch wybranych metodach: trapezów (Rys. 1-a), lub parabol Simpsona (Rys. 1-b).



Rys.1. Istota całkowania: a) metodą trapezów, b) metodą parabol Simpsona

Stosując wzór trapezów dla każdego z przedziałów $[x_{i-1}, x_i]$ dla $i=1..n$, wynik obliczeń całki wyznaczonej metodą trapezów można zapisać w postaci:

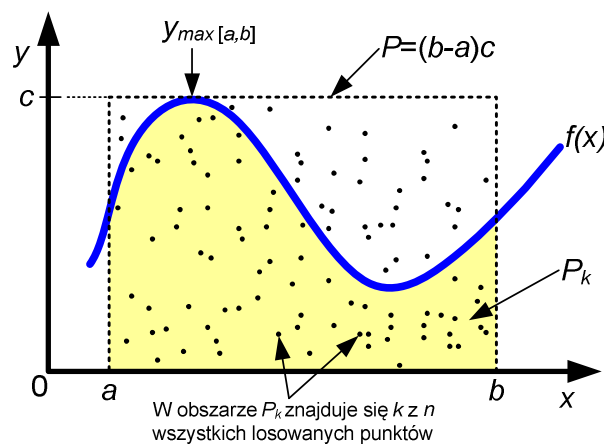
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n} \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right) \quad (2)$$

Zakładając, że n jest liczbą parzystą, stosując wzór parabol dla każdego z przedziałów $[x_{2i}, x_{2i+2}]$ dla $i=0..n-2$, wynik obliczeń całki wyznaczonej metodą parabol Simpsona można zapisać w postaci:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6n} \left(f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) \right) \quad (3)$$

Użytecznym narzędziem w przybliżonym obliczaniu całek oznaczonych jest wykorzystanie probabilistycznej **metody Monte Carlo (MC)**. W tym przypadku należy jednak pamiętać, że wynik takiego całkowania jest zmienną losową. Metoda MC została opracowana i pierwszy raz zastosowana przez John'a von Neumann'a oraz Stanisława Ulama (współtwórcy bomby wodorowej). Idea tej metody opiera się na obliczeniu pola pod wykresem dla funkcji $f(x)>0$ i odjęciu pola nad wykresem dla $f(x)<0$. Istotną rolę w metodzie MC odgrywa losowanie, czyli przypadkowy wybór wielkości charakteryzujących analizowany proces, przy czym losowanie to dokonywane jest zgodnie z rozkładem prawdopodobieństwa, który musi być wcześniej znany.

Klasycznym przykładem całkowania metodą MC jest obliczanie pola figury zdefiniowanejadaną funkcją $f(x)$ - rysunek 2.



Rys.2. Całkowanie funkcji $f(x)$ metodą Monte Carlo

W pierwszym etapie dokonuje się losowania n punktów np. z opisanego na tej funkcji prostokąta, który posiada współrzędne, zawarte w granicach przedziału $[a,b]$ całkowanej funkcji $f(x)$. Po wylosowaniu każdego z tych punktów należy sprawdzić, czy jego współrzędne należą do pola figury podcałkowej P_k . Wynikiem losowania jest informacja, że z n wszystkich prób k było trafionych, zatem pole figury podcałkowej (czyli wynik całkowania) można wyznaczyć z zależności:

$$P_k = P \frac{k}{n} \quad (4)$$

gdzie P jest polem prostokąta, który posiada współrzędne, zawarte w granicach przedziału $[a,b]$ całkowanej funkcji $f(x)$.

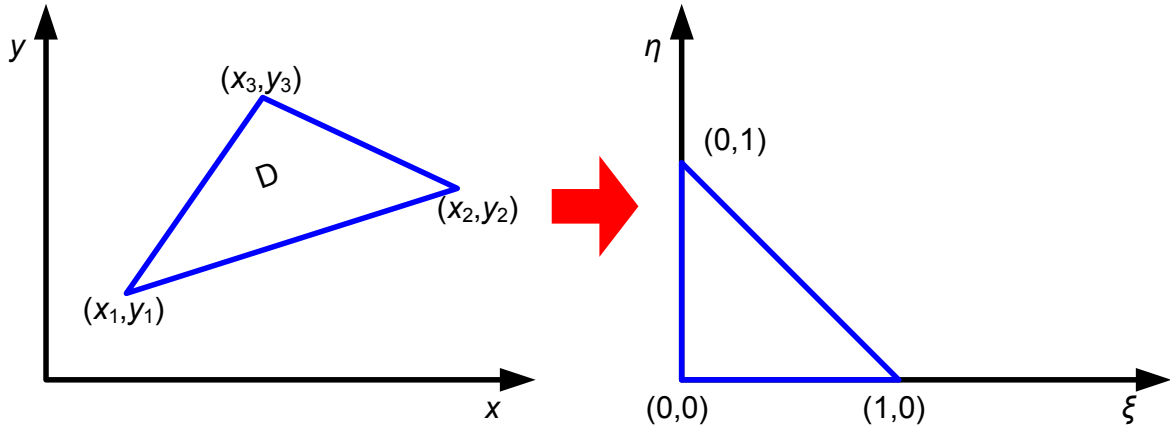
Możliwość zastosowania metody MC wynika bezpośrednio z prawa wielkich liczb (PWL), zgodnie z którym iloraz liczby zdarzeń spełniających zadane kryterium (k) i całkowitej liczby zdarzeń (n) jest równy prawdopodobieństwu spełnienia tych kryteriów. Można zatem stwierdzić, że jeżeli zliczonych zostanie **dostatecznie dużo** punktów k , które trafiły w obszar całkowanej funkcji, to stosunek k/n powinien być równy wspomnianemu prawdopodobieństwu.

Całkowanie numeryczne w obszarze wielowymiarowym Ω jest kojarzone z pojęciem **kubatury**, która jest wielowymiarowym odpowiednikiem złożonych kwadratur:

$$\int \dots \int_{\Omega} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \quad (5)$$

W celu zrozumienia całkowania numerycznego funkcji wielu zmiennych można posłużyć się jednym z prostszych zastosowań powyższego problemu - kubaturami Gaussa, dedykowanymi do obliczania całek podwójnych po obszarze opisanym siatką trójkątów (tzw. przykład całki podwójnej po trójkącie).

Z samego początku należy założyć istnienie ciągłej funkcji dwóch zmiennych $f(x,y)$, ograniczonej w obszarze trójkątnym D (Rys. 3).



Rys.3. Zmiana układu współrzędnych w całkowaniu po trójkącie

Wprowadzając podstawienie normalizujące wyjściowy trójkąt D do trójkąta prostokątnego, równoramiennego o wierzchołkach $(0,0)$, $(1,0)$, $(0,1)$, można zapisać tożsamości:

$$\begin{aligned} x &= x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta \\ y &= y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta \end{aligned} \quad (6)$$

Zmiana układu współrzędnych wymaga pomnożenia funkcji podcałkowej przez tzw. jacobian przekształcenia:

$$\begin{aligned} J &= \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix} \\ J &= (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1) \\ |J| &= 2|D| \end{aligned} \quad (7)$$

gdzie $|D|$ oznacza pole wyjściowego trójkąta D .

Funkcja podcałkowa dla trójkąta znormalizowanego przyjmuje postać:

$$F(\xi, \eta) = |J| f[x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta, y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta] \quad (8)$$

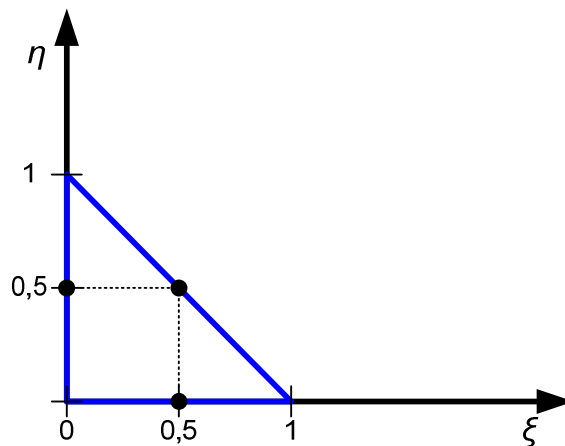
Końcową zależność do obliczania całki podwójnej po trójkącie można zapisać w postaci:

$$\int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} F(\xi, \eta) d\eta = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n F(\xi_i, \eta_i) w_i \quad (9)$$

gdzie (ξ_i, η_i) oznacza współrzędne punktów Gaussa, w_i – współczynnik kwadratury, natomiast n – liczbę punktów Gaussa.

Przykładowe współrzędne i wagi dla trzech punktów Gaussa przedstawiono na rysunku 4.

n	ξ_i	η_i	w_i
3	1/2	1/2	1/3
	0	1/2	1/3
	1/2	0	1/3



Rys.4. Współrzędne i wagi dla trójpunktowej kubatury Gaussa

2. Całkowanie funkcji jednej zmiennej

2.1. Całkowanie metodą kwadratur

Zadanie do rozwiązania

Korzystając z następujących, wbudowanych funkcji programu Scilab: a) **integrate()** - obliczanie całki metodą kwadratur, b) **intsplin()** - obliczanie całki z funkcji sklejanej interpolującej zbiór punktów, c) **inttrap()** - obliczanie całki z funkcji interpolującej zbiór punktów za pomocą metody trapezów, dokonać obliczenia wyrażenia:

$$\int_{-5}^5 f(x) dx \text{ dla } f(x) = \frac{8}{4+x^2}$$

Obliczenia należy poprzedzić zdefiniowaniem funkcji $f(x)$ za pomocą instrukcji **function()**. Następnie należy wykreślić przebieg funkcji w przedziale całkowania. Po wykonaniu obliczeń należy porównać i skomentować otrzymane wyniki.

Pomoc

- Funkcja **integrate()** umożliwia numeryczne obliczanie całek oznaczonych z dowolnych wyrażeń. Wyrażeniem może być dowolny, poprawny składniowo łańcuch, np. o postaci '**a*b/c**', może nim być także nazwa funkcji, która jest wbudowana lub zdefiniowana przez użytkownika. Składnia:

integrate(f, v, x0, x1 [, ea [, er]])

gdzie:

f - całkowane wyrażenie,

v - łańcuch określający zmienną całkowania (wartości ewentualnych, innych zmiennych występujących w całkowanym wyrażeniu muszą być określone w chwili całkowania),

x0 i **x1** - granice całkowania,

ea i **er** - dopuszczalny błąd bezwzględny (domyślnie 0) i względny (domyślnie 10^{-8}).

Całkowane wyrażenie może zawierać warunki logiczne (**if ... then ... else**), co pozwala na uniknięcie ewentualnego dzielenia przez zero lub zastąpienie wartości nieokreślonej czy nieskończoności.

- Funkcja `intsplin()` służy do całkowania danych doświadczalnych za pomocą interpolacji funkcjami sklejanymi (`spline`). Składnia:

`intsplin([x,] s)`

gdzie:

x - rosnący wektor wartości odciętych (jeśli argument ten zostanie pominięty to program Scilab przyjmie w jego miejsce wektor `[1:size(s, '*')]`),

s - wektor wartości rzędnych.

- Funkcja `inttrap()` służy do całkowania danych doświadczalnych metodą trapezów. Składnia:

`inttrap([x,] s)`

gdzie:

x - rosnący wektor wartości odciętych (argument opcjonalny),

s - wektor wartości rzędnych.

Jeśli w wywołaniu polecenia wektor **x** nie zostanie podany, to w jego miejsce zostanie użyty wektor postaci `[1:size(s, '*')]`.

2.2. Całkowanie metodą Monte Carlo

Zadanie do rozwiązania

Korzystając z metody Monte Carlo, należy dokonać obliczenia następujących wyrażeń:

a) $\int_{-5}^5 f(x)dx$ dla $f(x) = \frac{8}{4+x^2}$

b) $\int_{-5}^5 f(x)dx$ dla $f(x) = |x \cdot \sin(x)|$

Obliczenia należy poprzedzić przygotowaniem schematów algorytmów całkowania. Obliczyć zadane całki (P_k) dla różnej liczby losowań n , a w dalszej kolejności należy wykreślić zależności uzyskanych wyników całkowania w funkcji liczby losowań $P_k(n)$. Po wykonaniu obliczeń należy skomentować otrzymane wyniki.

Pomoc

- Losowanie macierzy **z** o rozmiarze **m**-wierszy i **n**-kolumn z rozkładem jednostajnym w przedziale [**Low**, **High**):

`z=grand(m, n, "unf", Low, High)`

3. Całkowanie funkcji wielu zmiennych

3.1. Całkowanie funkcji dwóch zmiennych metodą kubatur Gaussa – implementacja algorytmu w oprogramowaniu numerycznym

Zadanie do rozwiązania

Korzystając z trójpunktowego wzoru (9) dla kubatur Gaussa, rozwiązać analitycznie następującą całkę podwójną:

$$\iint_D (x+3y-1) dx dy$$

dla trójkąta D o wierzchołkach: (1,1), (3,2), (2,3).

3.2. Całkowanie funkcji dwóch zmiennych metodą kubatur Gaussa –funkcja `int2d()`

Zadanie do rozwiązania

Korzystając z wbudowanej funkcji programu Scilab: `int2d()` – obliczanie całki z funkcji 2 zmiennych po obszarze opisanym siatką trójkątów, dokonać obliczenia wyrażenia z zadania punktu 3.1:

$$\iint_D (x+3y-1) dx dy$$

dla trójkąta D o wierzchołkach: (1,1), (3,2), (2,3).

Obliczenia należy poprzedzić zdefiniowaniem funkcji $f(x,y)$ za pomocą instrukcji `function()`. Następnie należy wykreślić przebieg funkcji w przedziale całkowania. Po wykonaniu obliczeń należy porównać i skomentować otrzymane wyniki z punktu 3.1 i 3.2.

Pomoc

Funkcja `int2d(X,Y,f)` umożliwia obliczenie całki po obszarze podzielonym na trójkąty. Składnia:

```
[wynik, err] = int2d(X, Y, f [, params])
```

gdzie:

X - trzywierszowa macierz zawierająca współrzędne x wierzchołków trójkątów na jakie podzielono obszar całkowania (liczba kolumn jest liczbą trójkątów),

Y - trzywierszowa macierz zawierająca współrzędne y wierzchołków trójkątów,

f - nazwa całkowanej funkcji,

wynik - wyznaczona wartość całki,

err - oszacowany błąd,

params – opcjonalny wektor parametrów: `[tol, iclose, maxtri, mevals, iflag]`,

gdzie:

tol - tolerancja (domyślnie 10^{-10} , jeżeli **iflag** = 0 - względna, jeżeli 1 - bezwzględna),

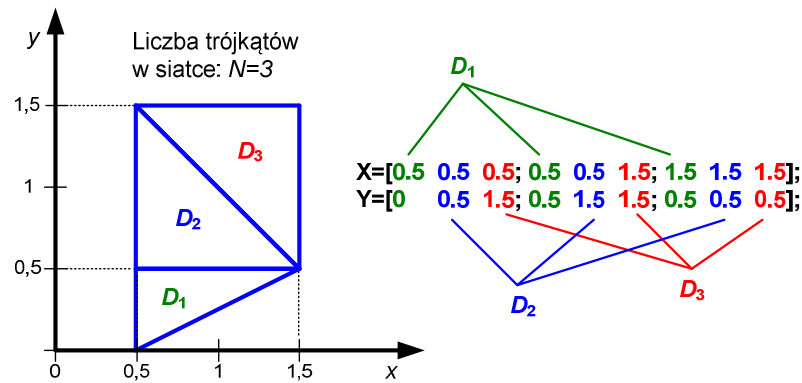
iclose - metoda obliczeń, domyślnie = 1 (z wykorzystaniem punktów należących do brzegu obszaru), jeżeli 0 - punkty brzegowe nie będą wykorzystywane (gorsza dokładność),

maxtri - maksymalna liczba trójkątów,

mevals - maksymalna liczba wykonywanych obliczeń wartości funkcji (aby została uwzględniona musi być większa niż $94 \times \text{maxtri}$ (dla **iclose** = 1) lub $56 \times \text{maxtri}$ (dla **iclose** = 0),

iflag - wybór sposobu interpretacji zadanej tolerancji: 1 - bezwzględna, 0 - względna.

Na rysunku 5 zaprezentowano przykładową siatkę 3 trójkątów i definicję macierzy **X** oraz **Y** dla funkcji `int2d()`.



Rys.5. Przykładowa siatka 3 trójkątów z definicją macierzy **X** i **Y**

3.3. Całkowanie funkcji trzech zmiennych metodą kubatur – funkcja `int3d()`

Zadanie do przeanalizowania - rozwiązania nie należy uwzględniać w sprawozdaniu.

Korzystając z wbudowanej funkcji programu Scilab: `int3d()` – obliczanie całki z funkcji 3 zmiennych po obszarze opisanym siatką czworościanów, dokonać obliczenia przykładowo wybranej zależności.

Pomoc

Funkcja `int3d()` umożliwia obliczanie całki z funkcji 3 zmiennych po obszarze opisanym siatką czworościanów. Składnia:

```
[wynik, err] = int3d(X, Y, Z, f [, nf[, params]])
```

gdzie:

wynik - obliczona wartość całki,

err - oszacowana wartość błędu,

X - czterowierszowa macierz zawierająca współrzędne x czworościanów, na które podzielono obszar całkowania (liczba kolumn macierzy odpowiada liczbie czworościanów),

Y - czterowierszowa macierz zawierająca współrzędne y czworościanów,

Z - czterowierszowa macierz zawierająca współrzędne z czworościanów,

f - nazwa całkowanej funkcji. Uwaga: funkcja musi być zdefiniowana tak, aby jej wywołanie miało postać: `f(xyz,nf)`, gdzie **xyz** jest kolumnowym wektorem zawierającym współrzędne x,y,z - `[x;y;z]`, argument **nf** musi wystąpić w definicji funkcji nawet jeśli nie jest wykorzystywany,

nf - liczba funkcji (domyślnie 1),

params - opcjonalny wektor parametrów: `[minpts,maxpts,epsabs,epsrel]`,

gdzie:

minpts - minimalna liczba wywołań funkcji (domyślnie 0),

maxpts - maksymalna liczba wywołań funkcji (domyślnie 1000),

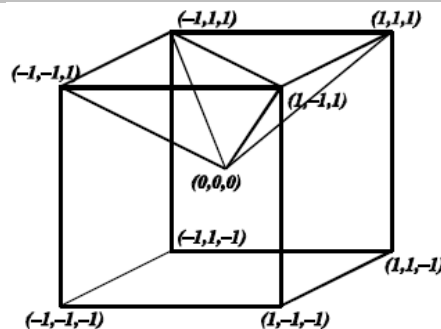
epsabs - błąd bezwzględny (domyślnie 0),

epsrel - błąd względny (domyślnie 10^{-5}).

Podobnie jak przy całkowaniu funkcji dwóch zmiennych funkcją `int2d()`, w tej procedurze należy zadać tylko początkowy podział obszaru całkowania na czworościany. Podczas obliczeń

program Scilab sam zagęszcza podziały w taki sposób, by uzyskać zgodność z zadaniem błędem. Poniżej przytoczono przykładowy podział sześcianu o środku w punkcie (0,0,0) i długości krawędzi 2 (przykład pochodzi z pliku pomocy programu Scilab):

```
//integration over a cube -1<=x<=1;-1<=y<=1;-1<=z<=1
// bottom -top- right -left- front -rear-
x=[ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
   -1,-1,-1,-1, 1, 1, 1, 1;
    1,-1, 1,-1, 1, 1,-1,-1;
    1, 1, 1, 1,-1,-1, 1, 1];
y=[ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
   -1,-1,-1,-1, 1, 1,-1,-1;
   -1, 1,-1, 1, 1, 1,-1,-1;
    1, 1, 1, 1,-1,-1, 1, 1];
z=[ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
   -1,-1, 1, 1,-1, 1,-1,-1;
   -1,-1, 1, 1,-1,-1,-1, 1;
   -1,-1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];
```



Rys.6. Przykładowa siatka 3 trójkątów z definicją macierzy X i Y

W kolumnie **-top-** znajdują się dwa górne czworościany, zaprezentowane na rysunku 6.

III. Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

Uwaga: sprawozdanie należy wykonać dopiero po wykonaniu całego ćwiczenia, które jest wykonywane podczas dwóch kolejnych zajęć laboratoryjnych (część pierwsza – realizacja punktu 2, część druga – realizacja punktu 3 instrukcji). Sprawozdanie – przygotowane w pliku *.docx (*.doc) na podstawie wszystkich wytycznych formatki *mn_formatka.doc* – należy przesłać na adres pjanko@prz.edu.pl, **najpóźniej w terminie 1 tygodnia od dnia zakończenia ćwiczenia laboratoryjnego**. Odbiór każdego sprawozdania zostanie potwierdzony wiadomością zwrotną przez prowadzącego zajęcia. Sprawozdania powinny być opisane: nazwa roku, datą wykonania ćwiczenia, numerem grupy laboratoryjnej, numerem zespołu ćwiczącego (1-4) i jego składem osobowym. W przypadku odrabiania ćwiczenia, w/w informacje powinny zostać zawarte przy nazwisku osoby odrabiającej laboratorium. Odpowiedzialność za sprawozdanie jest zbiorowa, co oznacza, że wszyscy członkowie danego zespołu ćwiczącego (1-4) otrzymują tą samą ocenę za złożone sprawozdanie.

Sprawozdanie z czwartego ćwiczenia laboratoryjnego powinno zawierać kompleksowe rozwiązanie wszystkich zadań, które wyszczególniono w instrukcji. W sprawozdaniu należy zawrzeć uzyskiwane wyniki oraz obszerny komentarz do każdego etapu postępowania. W dokumencie należy zawrzeć przygotowane skrypty z komentarzami do każdej linii programu. Sprawozdanie należy podsumować wnioskami, wyciągniętymi z realizacji procesu obliczeń numerycznych w programie Scilab.

IV. Przygotowanie do następnych zajęć

1. Wiedza teoretyczna z zakresu rachunku macierzowego.
2. Umiejętność posługiwania się oprogramowaniem narzędziowym w zakresie zrealizowanym podczas dotychczasowych ćwiczeń laboratoryjnych.
3. Umiejętność syntezy algorytmów i ich implementacji w oprogramowaniu numerycznym.
4. Umiejętność numerycznego rozwiązywania liniowych i nieliniowych układów równań.
5. Umiejętność numerycznego całkowania funkcji jednej i wielu zmiennych.