Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Numerično integriranje

Emil Žagar

Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

FMF seminar za učitelje matematike

31. januar 2020

Uvod

- Integriranje in odvajanje.
- Formalizirata ju Newton in Liebniz v 17. stoletju.
- Osredotočimo se na funkcije ene spremenljivke.
- Zapis

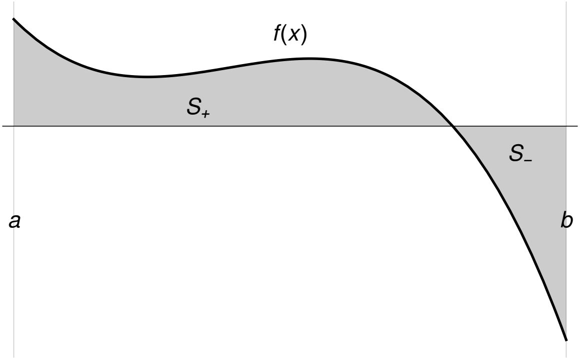
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x, \quad a, b \in \mathbb{R}, a < b.$$

- Formalno: Določeni integral je (omejen) linearen operator.

- Riemannov integral (Bernhard Riemann leta 1854).
- Posplošitvi: Riemann-Stieltjesov integral in Lebesgueov integral.
- Riemannove vsote $\longrightarrow$ Riemannov integral.
- Funkcija, ki nima Riemannovega integrala:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \in \mathbb{Q}, \\ 0, & x \in \mathbb{R} - \mathbb{Q}. \end{cases}$$

- $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = S_+ - S_-,$$



Slika: Geometrijska interpretacija določenega integrala.

- Nedoločeni integral funkcije $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ je $F : [a,b] \to \mathbb{R}$,

$$F'(x) = f(x), \quad x \in [a,b].$$

- F je primitivna funkcija funkcije f.

Izrek

Naj bo realna funkcija f na $[a,b]$ zvezna. Definirajmo F kot

$$F(x) = \int_a^x f(t)\mathrm{d}t.$$

Potem je F odvedljiva na (a,b) in $F' = f$ na (a,b).

Izrek (Newton-Liebnizova formula)

Naj bo realna funkcija f na $[a, b]$ zvezna in F njena primitivna funkcija. Potem je

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a).$$

Primer

Če je $f(x) = \sin x$ na $[0, \pi]$, potem je $F(x) = -\cos x$ in

$$\int_0^\pi \sin x \mathrm{d}x = -\cos x|_0^\pi = -\cos\pi + \cos 0 = 2.$$

- Znamo vedno določiti primitivno funkcijo?
- Recimo za $f(x) = e^{-x^2}$.
- Vsaka (dovolj “lepa”) funkcija ima primitivno funkcijo.
- Posledično določen integral obstaja.
- Težava: če primitivna funkcija ni kompozitum elementarnih funkcij.
- Aproksimacija določenega integrala z numeričnim integriranjem.

Polinomska interpolacija

- Konstrukcija polinoma skozi podane točke.
- Več oblik interpolacijskega polinoma.
- Obstoj, enoličnost?

Izrek

Za danih $n+1$ točk $\boldsymbol{T}_i(x_i, f_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$, s paroma različnimi abscisami, obstaja tak enolično določen polinom p_n stopnje $\leq n$, da je $p_n(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$.

- Klasična oblika:
$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j,$$
a_j so rešitev sistma linearnih enačb.

- Lagrangeova oblika:
$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j\, \ell_{n,j}(x), \quad \ell_{n,j}(x) = \frac{\prod_{k=0,k\neq j}^{n}(x - x_k)}{\prod_{k=0,k\neq j}^{n}(x_j - x_k)}.$$

- Newtonova oblika:
$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} [x_0, x_1, \ldots, x_j]f\,(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{j-1}).$$

- Deljena diferenca $[x_0, x_1, \ldots, x_j]f$ je vodilni koeficient polinoma p_j stopnje $\leq j$, ki se z f ujema v $x_0, x_1, \ldots, x_j$.
- Rekurzivna zveza:

$$[x_0, x_1, \ldots, x_j]f = \frac{[x_1, x_2, \ldots, x_j]f - [x_0, x_1, \ldots, x_{j-1}]f}{x_j - x_0}.$$

- Posebej je $[x_i]f = f(x_i) = f_i$.

Izrek

Če je $f \in \mathcal{C}([a,b])$ *in* $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, *potem za* $x \in [a,b]$ *velja*

$$f(x) - p_n(x) = [x_0, x_1, \ldots, x_n, x]f\omega(x),$$

kjer je $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$.
Če je $f \in \mathcal{C}^{(n+1)}([a,b])$, *je*

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega(x), \quad \xi_x \in [a,b].$$

Interpolacijska integracijska pravila

- Iščemo numerični približek za

$$If := \int_a^b f(x)\mathrm{d}x.$$

- Funkcijo f aproksimiramo z interpolacijskim polinomom p_n.
- Interpolacijske točke: $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.
- Pišemo: $If = Ff + Rf$, kjer je

$$Ff = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j f_j$$

interpolacijsko integracijsko pravilo in Rf napaka aproksimacije integrala.

- Uteži α_j se izražajo kot

$$\alpha_j = \int_a^b \ell_{n,j}(x)\mathrm{d}x.$$

- Točkam x_j, $j = 0, 1, \ldots n$, rečemo vozli.
- Pravilo F je stopnje n, če je $Rf = 0$ za polinome f stopnje $\leq n$ (n največje tako število).
- Želimo, da je stopnja pravila F čim večja.

- Za napako Rf dovolj gladke funkcije velja

$$|Rf| \leq \frac{\left|f^{(n+1)}(\eta)\right|}{(n+1)!} \int_a^b |\omega(x)| \, \mathrm{d}x, \quad \eta \in (a, b).$$

- Če ω ne spremeni znaka na $[a, b]$, je

$$Rf = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x) \mathrm{d}x, \quad \eta \in (a, b).$$

- Če f ni dovolj gladka, za izračun Rf uporabimo Peanovo jedro.

Primer

1. *Določite interpolacijsko integracijsko pravilo na točkah $x_0 = a$ in $x_1 = a + h$, $h > 0$. Nato ocenite ali izračunajte napako.*
   Rešitev:
$$Ff = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right), \quad Rf = -\frac{h^3}{12} f''(\eta).$$

2. *Določite interpolacijsko integracijsko pravilo na točkah $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = a + 2h$, $h > 0$. Nato ocenite ali izračunajte napako.*
   Rešitev:
$$Ff = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right), \quad Rf = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta).$$

Newton-Cotesove formule

- Pogosto izberemo $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, $h := x_{i+1} - x_i$ (ekvidistantne točke).

- Formule za α_j se poenostavijo:

$$\alpha_j = h \sum_{i=j}^{n} (-1)^{i-j} \binom{i}{j} \int_0^n \binom{t}{i} \mathrm{d}t, \quad j = 0, 1, \ldots, n,$$

kjer je

$$\binom{t}{i} = t(t-1)\cdots(t-i+1), \quad \binom{t}{0} = 1.$$

- Trapezna formula ($n = 1$):

$$Ff = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right), \quad Rf = -\frac{1}{12}h^3 f''(\eta).$$

- Simpsonova formula ($n = 2$):

$$Ff = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right), \quad Rf = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\eta).$$

- Triosminska formula ($n = 3$):

$$Ff = \frac{3h}{8}\left(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3()\right), \quad Rf = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\eta).$$

- Newton-Cotes zaprtega tipa (krajišči sta vozla).
- Newton-Cotes odprtega tipa (krajišči nista vozla).
- Newton-Cotes polodprtega tipa (eno krajišče je vozel, drugo ne).
- Uporaba pri računanju singularnih integralov.

- Ali približki konvergirajo proti If, ko $n \to \infty$?
- V splošnem ne!
- Eden od razlogov: koeficienti pri večjih n so lahko negativni.
- Kako poljubno natančno izračunati If?
- Namesto večanja n, manjšamo interval $[a, b]$.

Sestavljena pravila

- Interval $[a, b]$ razdelimo na n podintervalov, $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ (omejimo se na ekvidistantno razdelitev $h := x_{i+1} - x_i$).
- Na vsakem od podintervalov $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n - 1$, uporabimo osnovno Newton-Cotesovo formulo.
- Približke seštejemo v $F_n f$ (sestavljeno pravilo).
- Velja: $F_n f \to If$, ko $n \to \infty$.
- Napaka je za red slabša kot napaka osnovne formule.

Primer

Izpeljite sestavljeno trapezno pravilo za računanje integrala $If = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$, *pri čemer* $[a,b]$ *razdelite na* n *enako dolgih podintervalov. Izračunajte napako pravila. Privzemite, da je* f *vsaj dvakrat zvezno odvedljiva funkcija.*

Rešitev:

Naj bo $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, $h = x_{i+1} - x_i$ *in* $f_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$. *Potem je*

$$F_n f = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right),$$
$$R_n f = -\frac{1}{12}(b-a)h^2 f''(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Gaussova kvadraturna pravila

- Kako izboljšati natančnost interpolacijskih pravil?
- Vnaprejšnji izbor vozlov ni optimalen?
- Računati želimo splošnejše integrale

$$I_\rho f = \int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x, \quad \rho > 0.$$

- Definiramo skalarni produkt

$$\langle r, s\rangle = \int_a^b r(x)s(x)\rho(x)\mathrm{d}x.$$

- Oznaka: $\perp_\rho$ ortogonalnost v tem skalarnem produktu.

- Interpolacijsko integracijsko pravilo $I_\rho f = F_\rho f + R_\rho f$, kjer je

$$F_\rho f = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j f(x_j),$$

$$R_\rho f = \int_a^b [x_0, x_1, \ldots, x_n] f \omega(x) \rho(x) \mathrm{d}x.$$

- Vozli niso določeni vnaprej.
- Ideja: $R_\rho f = 0$ za polinome čim višje stopnje.

Izrek

Pravilo F_ρ je stopnje $2n+1$ (Gaussovega tipa) natanko tedaj, ko je $\omega \perp_\rho q_n$, kjer je q_n poljuben polinom stopnje $\leq n$.

Izrek

Če je $f \in \mathcal{C}^{(2n+2)}([a,b])$ in F_ρ pravilo Gussovega tipa stopnje $2n+1$*, potem je*

$$R_\rho = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x)^2 \rho(x) \mathrm{d}x, \quad \xi \in [a,b].$$

Primer

Izpeljite pravilo Gaussovega tipa za $n = 1$, $\rho(x) = 1$ *in* $b = -a = 1$ *(pravilo tipa Gauss-Legendre).*
Rešitev:

$$F_\rho f = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right),$$

$$R_\rho f = \frac{1}{135} f^{(4)}(\xi).$$

- Stopnja pravila Gaussovega tipa $(2n+1)$ je skoraj dvakrat večja kot stopnja ustreznega Newton-Cotesovega pravila $(n+1)$.
- Uteži Gaussovih kvadraturnih pravil so pozitivne.
- Pravila po točkah konvergirajo:

$$I_\rho f = \lim_{n\to\infty} \sum_{j=0}^{n} \alpha_j f(x_j).$$

- Uteži in vozli so tesno povezani z ortogonalnimi polinomi na $[a,b]$ z utežjo ρ.

Izrek

Naj bo $(Q_n)_{n\geq 0}$ *zaporedje ortonormiranih polinomov na* $[a, b]$ *z utežjo* ρ,

$$Q_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j x^j, \quad c_n \neq 0.$$

Integracijsko pravilo F_ρ *je Gaussovega tipa natanko tedaj, ko so* x_j, $j = 0, 1, \ldots, n$, *ničle polinoma* Q_{n+1} *in*

$$\alpha_j = -\frac{c_{n+2}}{c_{n+1}} \frac{1}{Q_{n+2}(x_j) Q'_{n+1}(x_j)}, \quad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Primer

Poiščite prve štiri ortonormirane Gauss-Legendreove polinome.
Rešitev:

$$
\begin{aligned}
Q_0(x) &= \frac{\sqrt{2}}{2}, \\
Q_1(x) &= \sqrt{\frac{3}{2}}x, \\
Q_2(x) &= \sqrt{\frac{45}{8}}x^2 - \sqrt{\frac{5}{8}}, \\
Q_3(x) &= \sqrt{\frac{175}{8}}x^3 - \sqrt{\frac{63}{8}}x.
\end{aligned}
$$

- Kako numerično stabilno izračunati vozle in uteži?
- Uporabimo tričlensko rekurzijo: $b_0 = 0$, $Q_{-1}(x) = 0$,

$$b_i\, Q_{i-1}(x) + a_i\, Q_i(x) + b_{i+1}\, Q_{i+1}(x) = x\, Q_i(x), \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

- Ničle $(x_j)_{j=0}^{n}$ polinoma Q_{n+1} so ravno lastne vrednosti simetrične tridiagonalne matrike

$$T_{n+1} = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-1} & a_{n-1} & b_n \\ & & & b_n & a_{n+1} \end{bmatrix}.$$

- Uteži so

$$\alpha_j = z_{j,0}^2 \int_a^b \rho(x)\mathrm{d}x, \quad j = 0, 1, \ldots, n,$$

  kjer je $\boldsymbol{z}_j = (z_{j,i})_{i=0}^n$ normiran lastni vektor, ki pripada lastni vrednosti x_j.

- Ničle simetrične tridiagonalne matrike se izračuna lahko z bisekcijo.

- Lastne vektorje se izračuna s QR iteracijo.

- Oba algoritma sta numerično stabilna.

Numerično računanje dvojnih integralov

- Določiti želimo približek za
$$If = \int_\Omega f(x,y)\mathrm{d}\Omega, \quad \Omega = [a,b]\times[c,d].$$
- Za zvezno funkcijo f uporabimo Fubinijev izrek
$$If = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\mathrm{d}y\mathrm{d}x.$$
- Nato uporabimo kakšno sestavljeno pravilo za vsak (enojni) integral posebej.

- Denimo, da je

$$\int_a^b f(x,y)\mathrm{d}x \approx h\sum_{i=0}^{m} \alpha_i f(x_i,y), \quad y\in[c,d],$$
$$\int_c^d f(x,y)\mathrm{d}y \approx k\sum_{j=0}^{n} \beta_j f(x,y_j), \quad x\in[a,b],$$

kjer je $x_i = a + i\,h$, $i = 0,1,\ldots,m$ in $y_j = c + j\,k$, $j = 0,1,\ldots,n$.

- Potem je

$$If \approx h\,k \sum_{i=0,j=0}^{m,n} \alpha_i\beta_j f(x_i,y_j).$$

- Na kratko lahko pišemo

$$If \approx h\,k\,\boldsymbol{\beta}^T M \boldsymbol{\alpha},$$

  kjer je

$$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \ldots, \beta_n]^T, \quad \boldsymbol{\alpha} = [\alpha_0, \ldots, \alpha_m]^T, \quad M = (f(x_j, y_i))_{i,j=0}^{n,m}.$$

- Število izračunov funkcije f je $(m+1) \times (n+1)$.
- Pri računanju integralov v d dimenzijah je število izračunov $\mathcal{O}(n^d)$ (če delimo v vse dimenzije enako).

Alternativa-metode Monte Carlo

- Dandanes vse pogosteje v uporabi.
- Temeljijo na verjetnostnih algoritmih.
- Enostavne za implementacijo.
- Pogosteje se uporabljajo pri izračunu večkratnih integralov.
- Hitrost (verjetnostne) konvergence je neodvisna od dimenzije.

Primer

Z metodo Monte-Carlo izračunajte integral

$$\int_0^1 x^2 \mathrm{d}x$$

tako, da v enotskem kvadratu $[0,1]\times[0,1]$ *naključno izbirate točke in preverjate, ali ležijo pod ali nad grafom funkcije* $f(x) = x^2$.

Primer

Na podoben način kot zgoraj z metodo Monte-Carlo določite približek za π. *Integrirajte funkcijo* $f(x) = \sqrt{1-x^2}$ *na* $[0,1]$.