Metody numeryczne

Wykład 8

Całkowanie numeryczne

Pojęcie całki

- Całka nieoznaczona

$$\frac{\mathrm{d}\left(F(x)+C\right)}{\mathrm{d}x} = f(x) \tag{1}$$

$$\int f(x)\mathrm{d}x = F(x) + C \tag{2}$$

$F(x)$ – funkcja pierwotna danej całkowanej funkcji $f(x)$

$C \in \mathbb{R}$

- Całka oznaczona (w przedziale $< a, b >$)

$$\int\limits_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{3}$$

$< a, b >$ – przedział całkowania

a, b – dolna i górna granica całkowania

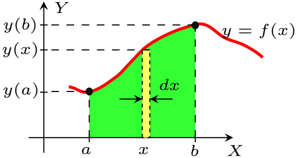
Interpretacja graficzna całki oznaczonej

Twierdzenie Newtona-Leibniza

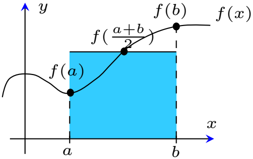
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a) \tag{4}$$

$\longrightarrow$ numerycznie czasochłonne (obliczenia symboliczne $\longrightarrow$ CAS), a w wielu przypadkach niewykonalne (e^{-x^2}, $\frac{\sin x}{x}$)

Interpretacja graficzna



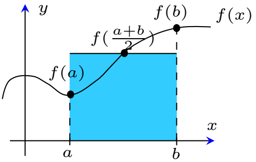
Całka oznaczona Riemanna
całka oznaczona = suma pól obszarow ograniczonych wykresem funkcji $f(x)$ oraz osią OX.



$$W_0(x) = c_0$$

$$S_0(x) = f(\frac{a+b}{2}) \cdot (b-a)$$

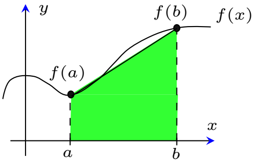
Wzór prostokątów



$$W_0(x) = c_0$$

$$S_0(x) = f(\frac{a+b}{2}) \cdot (b-a)$$

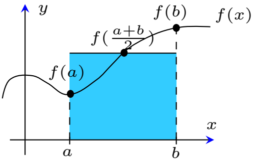
Wzór prostokątów



$$W_1(x) = c_1 x + c_0$$

$$S_1(x) = \frac{f(a)+f(b)}{2} \cdot (b-a)$$

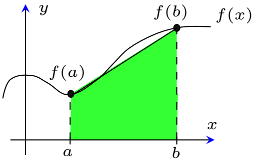
Wzór trapezów



$$W_0(x) = c_0$$

$$S_0(x) = f(\frac{a+b}{2}) \cdot (b-a)$$

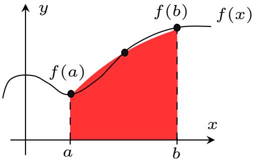
Wzór prostokątów



$$W_1(x) = c_1 x + c_0$$

$$S_1(x) = \frac{f(a) + f(b)}{2} \cdot (b-a)$$

Wzór trapezów

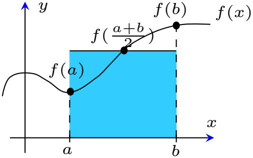


$$W_2(x) = c_2 x^2 + c_1 x + c_0$$

$$S_3(x) = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6} \cdot (b-a)$$

Wzór parabol (Simpsona)

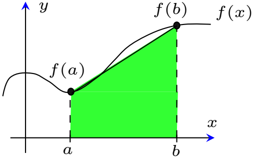
...?



$$W_0(x) = c_0$$

$$S_0(x) = f(\frac{a+b}{2}) \cdot (b-a)$$

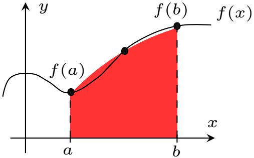
Wzór prostokątów



$$W_1(x) = c_1 x + c_0$$

$$S_1(x) = \frac{f(a) + f(b)}{2} \cdot (b-a)$$

Wzór trapezów

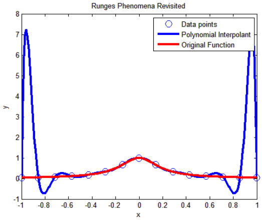


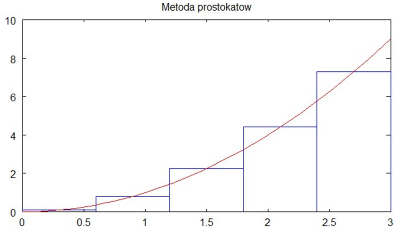
$$W_2(x) = c_2 x^2 + c_1 x + c_0$$

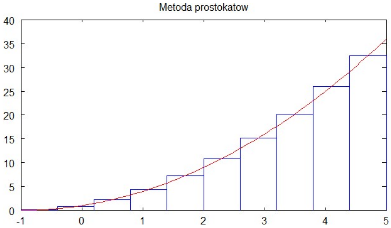
$$S_3(x) = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6} \cdot (b-a)$$

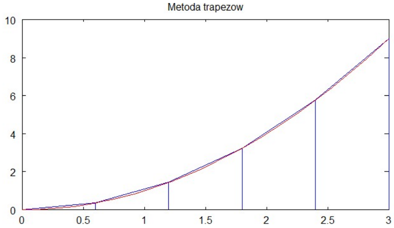
Wzór parabol (Simpsona)

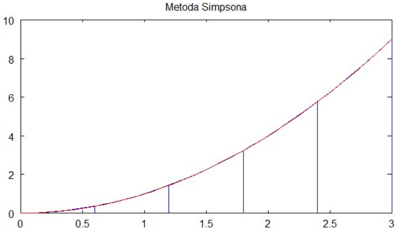
. . . ? $\longrightarrow$ efekt Rungego




Metoda prostokatow
10
8
6
4
2
0
0 0.5 1 1.5 2 2.5 3


Metoda prostokatow
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-1 0 1 2 3 4 5


Metoda trapezow
10
8
6
4
2
0
0 0.5 1 1.5 2 2.5 3


Metoda Simpsona
10
8
6
4
2
0
0 0.5 1 1.5 2 2.5 3

Złożony (ogólny) wzór trapezów

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = ? \tag{6}$$

Podzielmy przedział $< a, b >$ na n równych przedziałów $< x_0, x_1 >, < x_1, x_2 >, \ldots, < x_{n-1}, x_n >$, gdzie punkty $x_1, x_2, ..., x_n$ wyznaczamy wg wzoru:

$$x_i = a + \frac{i}{n}(b-a), \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{7}$$

Zatem:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\mathrm{d}x \tag{8}$$

Niech $h = \frac{b-a}{n}$ – długość każdego z podprzedziałów.
W każdym z podprzedziałów zastąpmy funkcję $f(x)$ wielomianem interpolującym Lagrange'a $W_k(x)$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\mathrm{d}x \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} W_k(x)\mathrm{d}x \tag{9}$$

Niech $k = 1$, $W_1(x)$ jest wielomianem stopnia 1 o węzłach interpolacji x_i, x_{i-1}. Zatem

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} W_1(x)\mathrm{d}x = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h \tag{10}$$

gdzie $y_{i-1} = f(x_{i-1})$, $y_i = f(x_i)$.
Ostatecznie:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{i=1}^{n} \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h \\
&= \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \ldots + \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n) \\
&= \frac{h}{2}(y_0 + y_1 \ + \ y_1 + y_2 + \ldots y_{n-2} + y_{n-1} \ + \ y_{n-1} + y_n) \\
&= \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + \ldots + 2y_{n-1} + y_n) \\
&= \frac{h}{2}(y_0 + y_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i) \qquad (12)
\end{aligned}$$

Złożony wzór trapezów

Wzory złożone

prostokątów

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = h\sum_{i=1}^{n} y_{i-\frac{1}{2}}$$

$$|E| \leqslant \frac{(b-a)^3}{24n^2}M$$

$$M = \max_{x\in<a,b>} |f''(x)|$$

trapezów

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}(y_0 + y_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i)$$

$$|E| \leqslant \frac{(b-a)^3}{12n^2}M$$

$$M = \max_{x\in<a,b>} |f''(x)|$$

Simpsona

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{3}(y_0+4\sum_{i=1}^{k} y_{2i-1}+2\sum_{i=1}^{k-1} y_{2i}+y_n)$$

$$|E| \leqslant \frac{(b-a)^5}{180n^4}M$$

$$M = \max_{x\in<a,b>} |f^{(4)}(x)|$$

gdzie $k = n/2$, h - odległość między kolejnymi węzłami

kwadratury

Przykład

Obliczyć przy pomocy wzoru prostokątów $\int_4^9 \frac{1}{x}\mathrm{d}x$ z dokładnością $\epsilon = 10^{-2}$.

$$|E| \leqslant \frac{(b-a)^3}{24n^2} M$$

$$M = \max_{x \in <a,b>} |f''(x)|$$

$$\frac{(b-a)^3}{24n^2} M < \epsilon$$

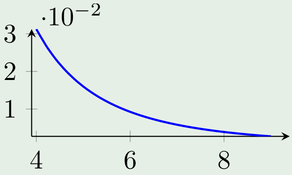
$$\frac{(b-a)^3}{24\epsilon} M < n^2$$

$$n > \sqrt{\frac{(b-a)^3 M}{24\epsilon}}$$

$$f(x) = x^{-1}$$

$$f'(x) = -x^{-2}$$

$$f''(x) = 2x^{-3}$$



$$M = \max_{x \in <4,9>} |f''(x)| = f''(4)$$

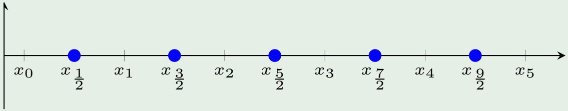
$$M \approx 0.0313$$

$$n > \sqrt{\frac{(9-4)^3 \cdot 0.0313}{24 \cdot 10^{-2}}} \approx 4.0344$$

Przyjmijmy $n = 5$

$h = \frac{b-a}{n} = \frac{9-4}{5} = 1 \rightarrow$

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
4	5	6	7	8	9



	$x_{\frac{1}{2}}$	$x_{\frac{3}{2}}$	$x_{\frac{5}{2}}$	$x_{\frac{7}{2}}$	$x_{\frac{9}{2}}$
x	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5
$f(x)$	$\frac{2}{9}$	$\frac{2}{11}$	$\frac{2}{13}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{2}{17}$

$$\int_4^9 \frac{1}{x}\mathrm{d}x \approx h\sum_{i=1}^{5} y_{i-\frac{1}{2}} = 1 \cdot \left(\frac{2}{9} + \frac{2}{11} + \frac{2}{13} + \frac{2}{15} + \frac{2}{17}\right) \approx 0.8089 \approx 0.81$$

$$\int_4^9 \frac{1}{x}\mathrm{d}x = \ln x \,\Big|_4^9 = \ln 9 - \ln 4 = 2.1972 - 1.3863 = 0.8109 \approx 0.81$$

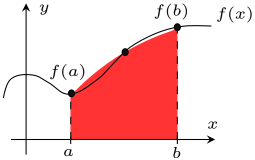
Ogólne sformułowanie zadania poszukiwania kwadratury

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

np. dla wzoru Simpsona

$n = 2$

$w_0 = \frac{b-a}{6}, \ \ w_1 = 2 \cdot \frac{b-a}{3}, \ \ w_2 = \frac{b-a}{6}$



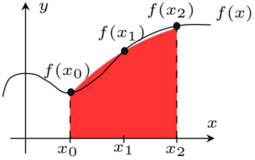
$$W_2(x) = c_2 x^2 + c_1 x + c_0$$

$$S_3(x) = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6} \cdot (b-a)$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \quad &\approx \quad \int_a^b W_n(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x)\mathrm{d}x \\ &= \quad \sum_{i=0}^{n} \int_a^b f(x_i)\ell_i(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i(x)\mathrm{d}x}_{w_i \rightarrow wagi} \end{aligned}$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i(x)\mathrm{d}x}_{w_i \rightarrow wagi}$$

$$= \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$



- $W_i(x)$ – wielomiany Lagrange'a

$$W_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

- x_i – węzły kwadratury, zera wielomianów Lagrange'a

N	w	0	1	2	3	4	5	6	błąd	wzór
1	$(1/2)h$	1	1						$h^3(1/12)f^{(2)}(\xi)$	trapezów
2	$(1/3)h$	1	4	1					$h^5(1/90)f^{(4)}(\xi)$	parabol
3	$(3/8)h$	1	3	3	1				$h^5(3/80)f^{(4)}(\xi)$	3/8
4	$(4/90)h$	7	32	12	32	7			$h^7(8/945)f^{(6)}(\xi)$	Milne'a
5	$(5/288)h$	19	75	50	50	75	19		$h^7(275/12096)f^{(6)}(\xi)$	- - - -
6	$(6/840)h$	41	216	27	272	27	216	1	$h^9(9/1400)f^{(8)}(\xi)$	Weddle'a

- Dla wielomianów wyższego stopnia $\longrightarrow$ współczynniki ujemne $\longrightarrow$ kwadratury nie zawsze zbieżne $\longrightarrow$ wzory nieużyteczne
- Dla N nieparzystych - rząd kwadratury $= N + 1$ (np. dla $N = 1$, wz. trapezów, oparty na 2 węzłach, dokładny dla wielomianów stopnia < 2)
- Dla N parzystych - rząd kwadratury $= N + 2$

Kwadratury Gaussa

Zadanie:
Dobrać tak położenie węzłów i wartości wag kwadratury aby całka była dokładna dla wielomianów stopnia wyższego niż n. Możliwe?
Tak!
Niech $w_0, w_2, \ldots, w_n$ – wagi, $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [-1, 1]$ – węzły kwadratury.
Dla całki

$$\int_{-1}^{1} f(x) \mathrm{d}x$$

dobrać x_i i w_i tak, aby wyrażenie

$$\sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

przybliżało ją jak najlepiej
f – dowolna funkcja określona na $[-1, 1]$,
$w(x)$ – tzw. funkcja "wagowa"

Przykład

Wyprowadzić kwadraturę Gaussa opartą na dwóch węzłach ($n = 1$)
$F(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3$

$$\int_{-1}^{1} F(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_{-1}^{1} a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3\mathrm{d}\xi =$$
$$\left[a_0\xi + \frac{1}{2}a_1\xi^2 + \frac{1}{3}a_2\xi^3 + \frac{1}{4}a_3\xi^4\right]_{-1}^{1} = 2a_0 + \frac{2}{3}a_2 \tag{13}$$

$$\int_{-1}^{1} F(\xi)\mathrm{d}\xi = F(\xi_1)w_1 + F(\xi_2)w_2 =$$
$$(a_0 + a_1\xi_1 + a_2\xi_1^2 + a_3\xi_1^3)w_1 + (a_0 + a_1\xi_2 + a_2\xi_2^2 + a_3\xi_2^3)w_2 =$$
$$(w_1 + w_2)a_0 + (\xi_1 w_1 + \xi_2 w_2)a_1 + (\xi_1^2 w_1 + \xi_2^2 w_2)a_2 + (\xi_1^3 w_1 + \xi_2^2 w_2)a_3 \tag{14}$$

Przykład

Porównując (13) i (14)

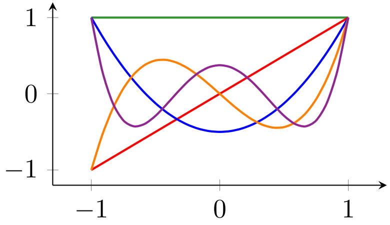
$$\begin{cases} w_1 + w_2 = 2 \\ \xi_1 w_1 + \xi_2 w_2 = 0 \\ \xi_1^2 w_1 + \xi_2^2 w_2 = \frac{2}{3} \\ \xi_1^3 w_1 + \xi_2^3 w_2 = 0 \end{cases} \tag{15}$$

$\rightarrow$

$w_1 = 1,\ w_2 = 1,\ \xi_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.57735,\ \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735$

Kwadratury Gaussa-Legendre'a – Wielomiany Legendre'a

ortogonalne na przedziale $[-1, 1]$
$P_0(x) = 1$
$P_1(x) = x$



Wzór rekurencyjny:

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$
$P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$
$P_7(x) = \frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x)$
$P_8(x) = \frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35)$

n	ξ_i	w_i
0	0.00000	2.00000
1	−0.57735 0.57735	1.00000 1.00000
2	−0.77560 0.00000 0.77560	0.55556 0.88889 0.55556
3	−0.86113 −0.33998 0.33998 0.86113	0.34785 0.65214 0.65214 0.34785
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

- współczynniki wagowe zawsze dodatnie!
- kwadratury Gaussa są rzędu $2(n+1)$

Najpopularniejsze kwadratury Gaussa

- kw. Gaussa-Legendre'a
  $w(x) = 1$
  $$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$
  gdzie x_i to pierwiastki $(n+1)$-ego wielomianu Legendre'a
- kw. Gaussa-Czebyszewa $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
  $$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$
  gdzie x_i to pierwiastki $(n+1)$-ego wielomianu Czebyszewa
- kw. Gaussa-Hermite'a $w(x) = e^{-x^2}$
  $$I(f) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$
  gdzie x_i to pierwiastki $(n+1)$-ego wielomianu Hermite'a

- kw. Gaussa-Laguerre'a

  $w(x) = e^{-x}$

$$I(f) = \int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

  gdzie x_i to pierwiastki $(n+1)$-ego wielomianu Laguerre'a

- kw. Gaussa-Jacobiego

  $w(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta$

$$I(f) = \int_{-1}^{1} (1-x)^\alpha (1+x)^\beta f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

Transformacja przedziału

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \quad \Leftrightarrow \quad \int_{-1}^{1} F(\xi)\mathrm{d}\xi$$

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi \qquad \mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\mathrm{d}\xi$$

$$\xi = -1 \Rightarrow x = a, \qquad \xi = 1 \Rightarrow x = b$$

Czyli

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi\right)\mathrm{d}\xi = \int_{-1}^{1} F(\xi)\,\mathrm{d}\xi$$

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

Przykład

Obliczyć całkę $\int_1^5 (x^2+2)\mathrm{d}x$ przy pomocy kwadratury Gaussa:

$$
\begin{array}{ccc}
x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi & \qquad & \mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\mathrm{d}\xi \\
\Downarrow & & \Downarrow \\
x = \frac{5+1}{2} + \frac{5-1}{2}\xi & & \mathrm{d}x = \frac{5-1}{2}\mathrm{d}\xi \\
\Downarrow & & \Downarrow \\
x = 3 + 2\xi & & \mathrm{d}x = 2\mathrm{d}\xi
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_1^5 (x^2+2)\mathrm{d}x &= \int_{-1}^1 \left((3+2\xi)^2+2\right)\cdot 2\mathrm{d}\xi \\
&= \int_{-1}^1 8\xi^2 + 24\xi + 22\mathrm{d}\xi
\end{aligned}
$$

$$F(\xi) = 8\xi^2 + 24\xi + 22$$

$$F(\xi) = 8\xi^2 + 24\xi + 22$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n} F(\xi_i) w_i &= \sum_{i=1}^{2} F(\xi_i) w_i = F(\xi_1) w_1 + F(\xi_2) w_2 \\
&= \left(8\xi_1^2 + 24\xi_1 + 22\right) w_1 + \left(8\xi_2^2 + 24\xi_2 + 22\right) w_2 \\
&= \left(8(-0.57735)^2 + 24(-0.57735) + 22\right) \cdot 1 + \\
&\quad + \left(8(0.57735)^2 + 24(0.57735) + 22\right) \cdot 1 \\
&= 49.33328
\end{aligned}$$

$$\int_1^4 \ln x \mathrm{d}x = (x \ln x - x)|_1^4 = 2.545177 \tag{16}$$

n	kwadratura		błąd	
	Newtona	Gaussa	Newton	Gauss
1	0.000000	2.748872	100%	8.00%
2	2.079442	2.557122	18,298%	0.469%
3	2.525729	2.546084	0.764%	0.036%
4	2.535590	2.545254	0.377%	0.003%

- Jeśli f dyskretna $\longrightarrow$ złożone kw. Newtona-Cotesa
- Jeśli f dana wzorem $\longrightarrow$ otwarte kw. Gaussa zapewniają mniejszy błąd (przy użyciu tej samej liczby węzłów) (dla $n+1$ węzłów: rząd kw. Gaussa $= 2n+1$, rząd kw. N-C $= n+1 \vee n+2$)
- całki niewłaściwe (f nieograniczona w przedziale, przedział nieskończony) $\longrightarrow$ kw. Gaussa-...
- ...

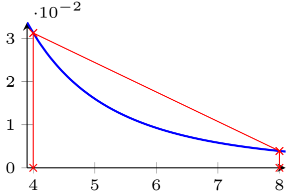
Metoda Romberga (dla złożonego wzoru trapezów)

ekstrapolacja Richardsona

$$n = 2^k; h = \frac{b-a}{n}; T_n = h(\frac{1}{2}y_0 + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{1}{2}y_n)$$

$k = 0;\ n = 1 : h = b - a$

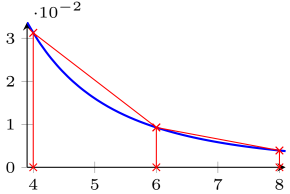
$$T_1 = (b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$



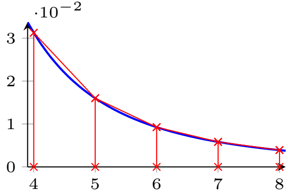
$k = 1;\ n = 2 : h = (b-a)/2$

$$T_2 = \frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + hf(\frac{a+b}{2})$$



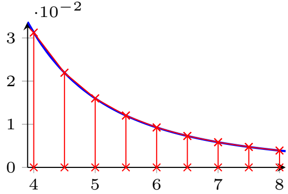
$k = 2;\ n = 4 : h = (b-a)/4$



$$T_4 = \frac{b-a}{4}\left[\frac{1}{2}f(a) + f(\frac{a+b}{4}) + f(\frac{a+b}{2}) + f(\frac{3(a+b)}{4}) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + h\left[f(\frac{a+b}{4}) + f\left(\frac{3(a+b)}{4}\right)\right]$$

$k = 3;\ n = 8 : h = (b-a)/8$



$$\begin{aligned} T_8 \quad = \quad & \frac{b-a}{8}\left[\frac{1}{2}f(a) + f(\frac{a+b}{8}) + f(\frac{a+b}{4}) + f\left(\frac{3(a+b)}{8}\right) + \right. \\ & f(\frac{a+b}{2}) + f\left(\frac{5(a+b)}{8}\right) + f\left(\frac{3(a+b)}{4}\right) + \\ & \left. f\left(\frac{7(a+b)}{8}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right] \end{aligned}$$

$$T_8 = \frac{1}{2}T_4 + h(\ldots)$$

Ogólnie:

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + h\sum_{i=1}^{n} f\left(a + (2k-1)h\right)$$

Niech $I = \int_a^b f(x)dx$ – rozwiązanie dokładne
Błąd wzoru trapezów: $\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(x)$

$$I = T_n + \frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_n) \qquad I = T_{2n} + \frac{(b-a)^3}{12(2n)^2} f''(\xi_{2n})$$

$\xi_n, \xi_{2n} \in [a, b]$
Zał.:

$$f''(\xi_n) \approx f''(\xi_{2n})$$

$$(I - T_n)\frac{12n^2}{(b-a)^3} = f''(\xi_n) \qquad (I - T_{2n})\frac{12(2n)^2}{(b-a)^3} = f''(\xi_{2n})$$

$$(I - T_n)n^2 = (I - T_{2n})4n^2 \tag{17}$$

$$I - T_n = 4I - 4T_{2n} \tag{18}$$

$$I = \frac{4T_{2n} - T_n}{3} \tag{19}$$

$$I = \frac{4T_{2n} - T_n}{3}$$

Ogólnie:

$$T_{n,0} = T_n \tag{20}$$

wzór Eulera-Maclaurina $\longrightarrow$ ekstrapolacja Richardsona $\longrightarrow$

$$T_{nm} = \frac{4^m T_{2n,m-1} - T_{n,m-1}}{4^m - 1} \tag{21}$$

$$\begin{array}{cccccc}
T_{1,0} & & & & & \\
T_{2,0} & T_{2,1} & & & & \\
T_{4,0} & T_{4,1} & T_{4,2} & & & \\
T_{8,0} & T_{8,1} & T_{8,2} & T_{8,3} & & \\
T_{16,0} & T_{16,1} & T_{16,2} & T_{16,3} & T_{16,4} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}$$

Przykład

Obliczyć całkę $\int_1^2 \frac{1}{x}\mathrm{d}x$ przy pomocy metody Romberga.

Obliczamy przybliżenia całki przy pomocy złożonego wzoru trapezów podwajając ilość podprzedziałów dla kolejnych przybliżeń.

$T_n = h(\frac{1}{2}y_0 + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{1}{2}y_n) \quad T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + h\sum_{i=1}^{n} f\left(a + (2k-1)h\right)$

$$
\begin{array}{llll}
k=0: & n=1 & h=1, & T_{1,0} = \frac{1}{2}\cdot(1+\frac{1}{2}) = 0.75 \\
k=1: & n=2 & h=\frac{1}{2}, & T_{2,0} = \frac{1}{2}T_{1,0} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{1.5} = 0.708333333 \\
k=2: & n=4 & h=\frac{1}{4}, & T_{4,0} = \frac{1}{2}T_{2,0} + \frac{1}{4}\cdot(\frac{1}{1.25}+\frac{1}{1.75}) = 0.69702380952
\end{array}
$$

$$k=3: \quad n=8 \quad h=\tfrac{1}{8}$$

$$T_{8,0} = \frac{1}{2}T_{4,0} + \frac{1}{8}\cdot(\frac{1}{1.125}+\frac{1}{1.375}+\frac{1}{1.625}+\frac{1}{1.875}) = 0.69412185037$$

$$k=4: \quad n=16 \quad h=\tfrac{1}{16}$$

$$T_{16,0} = \frac{1}{2}T_{8,0} + \frac{1}{16}\cdot(\frac{1}{1.0625}+\frac{1}{1.1875}+\ldots+\frac{1}{1.9375}) = 0.69339120220$$

$$
\begin{array}{lllll}
T_{1,0} & & & & \\
T_{2,0} & T_{2,1} & & & \\
T_{4,0} & T_{4,1} & T_{4,2} & & \\
T_{8,0} & T_{8,1} & T_{8,2} & T_{8,3} & \\
T_{16,0} & T_{16,1} & T_{16,2} & T_{16,3} & T_{16,4}
\end{array}
$$

$$T_{2,1} = \frac{4T_{2,0} - T_{1,0}}{4-1} = 0.69444444444$$

$$T_{4,1} = \frac{4T_{4,0} - T_{2,0}}{4-1} = 0.69325396825 \qquad T_{4,2} = \frac{16T_{4,1} - T_{2,1}}{16-1} = 0.69317460317$$

0.75000000000				
0.70833333333	**0.69**444444444			
0.69702380952	**0.693**25396825	**0.6931**7460317		
0.69412185037	**0.6931**5453065	**0.693147**90148	0.**693147**47764	
0.69339120220	**0.693147**65281	**0.6931471**9429	0.**69314718**307	**0.69314718**191

$$\int_1^2 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x = \ln 2 \approx 0.693147180559945$$

$$
\begin{array}{lllll}
5.7e-02 & & & & \\
1.5e-02 & 1.3e-03 & & & \\
3.9e-03 & 1.1e-04 & 2.7e-05 & & \\
9.7e-04 & 7.4e-06 & 7.2e-07 & 3.0e-07 & \\
2.4e-04 & 4.7e-07 & 1.4e-08 & 2.5e-09 & 1.4e-09
\end{array}
$$

Kwadratury adaptacyjne

Niech $I = \int_a^b f(x)dx$ – rozwiązanie dokładne

Błąd wzoru trapezów: $\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(x)$

$$I - T_n = \frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_n) \qquad I - T_{2n} = \frac{(b-a)^3}{12(2n)^2} f''(\xi_{2n})$$

$$T_n - T_{2n} = (I - T_{2n}) - (I - T_n) = \frac{(b-a)^3}{12(2n)^2} f''(\xi_{2n}) - \frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_n) =$$

$$= \frac{(b-a)^3}{12n^2} \left(\frac{1}{4} f''(\xi_{2n}) - f''(\xi_n) \right)$$

Zał.:

$$f''(\xi_n) \approx f''(\xi_{2n})$$

$$T_n - T_{2n} = -\frac{3}{4} \frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_{2n}) = -3(I - T_{2n})$$

$$I - T_{2n} \approx -\frac{1}{3}(T_n - T_{2n})$$

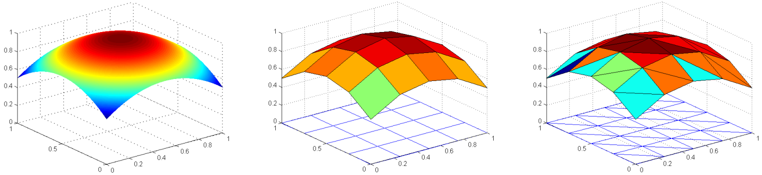
$$I - T_{2n} \approx -\frac{1}{3}(T_n - T_{2n})$$

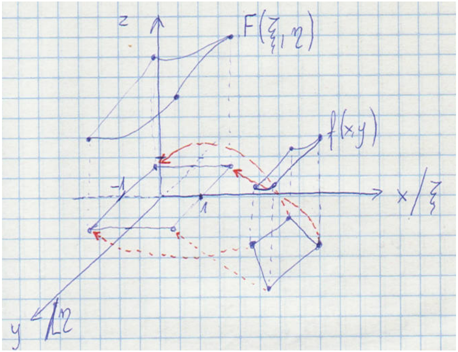
Algorytm kwadratury adaptacyjnej

Dane: f, a, b, ε
Wyniki: I

$T1 \leftarrow trapz(a, b, f)$
$T2 \leftarrow trapz(a, (a+b)/2, f)$
$\quad +trapz((a+b)/2, b, f)$
if $|T1 - T2| < 3\varepsilon$ **then**
$\quad I \leftarrow T2$
else
$\quad I \leftarrow adaptrapz(f, a, (a+b)/2, \varepsilon/2)$
$\quad\quad +adaptrapz(f, (a+b)/2, b, \varepsilon/2)$
end if

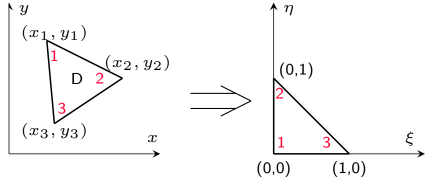
Kwadratury 2D





Dana jest fcja
$f(x, y)$.
$\int f(x, y) dS$
triangularyzacja
Delaunay'ego

normalizacja trójkąta



przekształcenie normalizujące

$$x = x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta$$
$$y = y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta$$

$$(x_1, y_1) \to (0, 0)$$
$$(x_2, y_2) \to (1, 0)$$
$$(x_3, y_3) \to (0, 1)$$

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix}$$

$$J = (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)$$

$$|J| = 2|D|$$

J – jakobian przekształcenia
$|D|$ – pole trójkąta przed znormalizowaniem

$$\int_S f(x,y)dS = \int_{T_n} F(\xi,\eta)dT_n$$

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

Ostatecznie

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

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

ξ_i, η_i – współrzędne punktów Gaussa
w_i – wagi punktów Gaussa
n – ilość punktów Gaussa

Przykład

Policzyć całkę funkcji

$$I = \int\int (x + 3y - 1)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

na trójkącie o wierzchołkach $(1, 1), (3, 2), (2, 3)$

a) Normalizacja

$$x = x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta = 1 + (3 - 1)\xi + (2 - 1)\eta = 1 + 2\xi + \eta$$

$$y = y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta = 1 + (2 - 1)\xi + (3 - 1)\eta = 1 + \xi + 2\eta$$

$$J = \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 3 - 1 & 2 - 1 \\ 2 - 1 & 3 - 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 3$$

$$F(\xi, \eta) = |3| \cdot [1 + 2\xi + \eta + 3(1 + \xi + 2\eta) - 1] = 9 + 15\xi + 21\eta$$

$$\int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} (9 + 15\xi + 21\eta)\mathrm{d}\eta$$

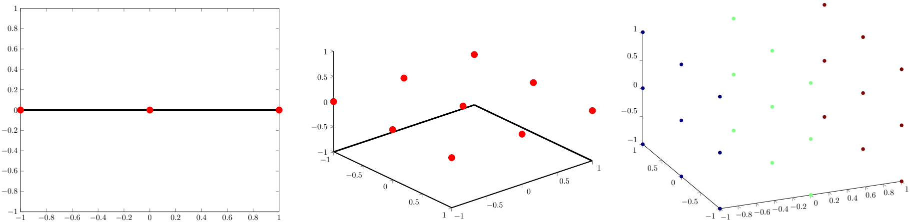
b) Obliczanie kubatury

$$I \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} F(\xi_i,\eta_i)w_i = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} F(\xi_i,\eta_i)w_i$$

$$I \approx \frac{1}{2}\left[F\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\cdot\frac{1}{3} + F\left(0,\frac{1}{2}\right)\cdot\frac{1}{3} + F\left(\frac{1}{2},0\right)\cdot\frac{1}{3}\right]$$

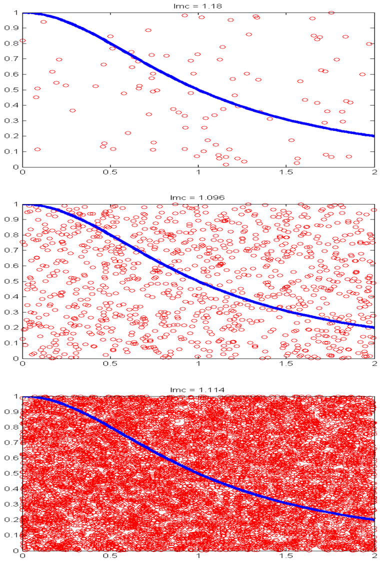
$$I \approx \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\left[27+19.5+16.5\right] = 10.5$$

- 2D, 3D i większa ilość wymiarów $n_d \rightarrow n_n^{n_d}$



Metoda Monte Carlo

Stanisław Ulam (1909-1984)



- Prawa wielkich liczb
- Prawo Bernoulliego:

  Niech S_n – liczba sukcesów w n próbach z prawdopodobieństwem sukcesu w pojedynczej próbie równym p. Dla każdego $\varepsilon > 0$

$$\lim_{n\to\infty} P\left(\left|\frac{S_n}{n} - p\right| \leqslant \varepsilon\right) = 1$$

"Z prawdopodobieństwem dowolnie bliskim 1 można się spodziewać, iż przy dostatecznie wielkiej liczbie prób częstość danego zdarzenia losowego będzie się dowolnie mało różniła od jego prawdopodobieństwa"

Crude Monte Carlo

```
function [I] = f_mCarlo(f, a, b, n)

% f  - zadana funkcja
% a,b- przedzial calkowania
% n  - ilosc probek wewnatrz <a,b>

% szerokosc "podprzedzialu" z <a,b>
h = (b-a)/n ;
% losujemy n punktow z <a,b>
x_i = rand(1,n)*(b-a)+a ;
% wartosci f-cji w losowych pktach
y_i = eval([f '(x_i)']) ;
I = h * sum(y_i) ;
```

Typowe Monte Carlo (metoda akceptacji i odrzuceń)

```
function [I] = f_mCarlo2(f, a, b, n)

% f  - zadana funkcja
% a,b- przedzial calkowania
% n  - ilosc probek wewnatrz <a,b>

% losowe argumenty z <a,b>
x_i = rand(1,n)*(b-a)+a ;
% wartosci f-cji w <a,b>
f_x_i = eval([f '(x_i)']) ;

% wartosc maksymalna
maxf = max(f_x_i) ;

% wspolrzedne y z przedzialu
% <0, maxf> dla argumentow x_i
y_i = rand(1,n)*(maxf-0) ;

% ilosc punktow ponizej
% wykresu funkcji
k = sum(y_i < f_x_i) ;

I = k/n * (b-a) * maxf ;
```

Dane: f, xp, xk, n
Wyniki: I

$h \leftarrow (xk - xp)/n$;
$I \leftarrow 0$
for $k \leftarrow 1$ to n **do**
    wylosuj dowolny punkt x_i z $< xp, xk >$
    $y_i \leftarrow f(x_i)$
    $I \leftarrow I + y_i \cdot h$
end for

$$\int_0^2 \frac{1}{x^2+1}\mathrm{d}x = \mathrm{arctg}(2) \approx 1.1071$$

Crude Monte Carlo

$n = 10$	$n = 100$	$n = 1000$
1.1681	1.1552	1.1063
1.3090	1.1497	1.1210
0.9273	1.0916	1.1250
1.1122	1.0807	1.1061
1.0669	1.1179	1.0875

Metoda akceptacji i odrzuceń

$n = 10$	$n = 100$	$n = 1000$
1.0061	1.1307	1.1190
1.0423	1.1696	1.1216
0.9089	1.1581	1.0923
1.1047	1.1846	1.1018
1.1350	1.0688	1.0753

Dziękuję za uwagę