Algoritmy vedeckotechnických výpočtov V.

Pavel Šťavina, F1 - 373

http://stavina.dnp.fmph.uniba.sk

e-mail: stavina@fmph.uniba.sk

posledná modifikácia: 19. februára 2008: 12h 59min

Numerické integrovanie

Praktický návod na numerický výpočet určitého integrálu je triviálny.

- pomocou interpolácie vieme vypočítať funkčnú hodnotu v ľubovoľnom bode (ide, samozrejme, o aproximáciu funkcie, nie o jej presné vyjadrenie).
- túto reprezentáciu spravidla vieme explicitne analyticky zintegrovať a výsledok integrácie budeme považovať za vyjadrenie integrálu danej funkcie
- ďalej sa budeme zaoberať základnými metódami na numerický výpočet určitého integrálu

Lichobežníková metóda

Lichobežníková metóda je metóda na výpočet určitého integrálu. Používame triviálny vzťah:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \;=\; \frac{h}{2}\,[f(x_0) + f(x_1)]$$

kde $h = x_1 - x_0$.

Jedná sa o prvý rád tzv. Newton-Cotesovho vzťahu (obecnejšiu definíciu tohoto vzťahu sa dozvieme o chvíľu), keď stupeň presnosti je 1.

Na extrémne jednoduchom prípade

$$\int_0^1 x\,dx = 1/2$$

je možné ukázať, že za istých okolností použitím tejto aproximácie môžeme dostať aj presný výsledok:

$$\int_0^1 x\,dx \;\approx\; \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] = 1/2$$

Inými slovami, stupeň presnosti 1 znamená, že vzťah nám dáva presný výsledok pre polynómy stupňa nanajvýš 1.

Simpsonova metóda (pravidlo)

Simpsonova metóda (Simpsonovo pravidlo) je tiež metóda na výpočet určitého integrálu. V tomto prípade používame parabolickú aproximáciu integrovanej funkcie. Je teda logické, že potrebujeme poznať aspoň 3 body (funkčné hodnoty) tejto funkcie. Napríklad môžeme použiť ekvidištantné hodnoty: ak x_0 a x_2 sú koncové body intervalu, tak $x_1 = (x_0 + x_2)/2$ je jeho stredom, a $h = |b - a|/2$ je vzdialenosť medzi nimi. Určitý integrál sa potom dá aproximovať hodnotou:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx I = \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

Samozrejme, rozdelením intervalu $< x_0; x_2 >$ na n podintervalov môžeme presnosť výsledku zvyšovať.

Výsledok bude potom, pochopiteľne, sumou týchto hodnôt

$$I = \frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+4f(x_{n-3})+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n))$$

Newton-Cotesova kvadratúra

Jednoduchým spôsobom, ako numericky integrovať nejakú funkciu je aproximovať ju v danom itervale nejakou funkciou. Inými slovami, miesto výpočtu určitého integrálu funkcie $\int_a^b f(x)\,dx$, hľadáme určitý inetgrál funkcie $p(x)$ ktorá sa jej dostatočne podobá (má v danom intervale podobný priebeh), teda:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

Najjednoduchšou aproximáciou je, prirodzene, polynóm. Vypočítame $f(x)$ v bodoch $x_0, x_1, \ldots, x_n$ a použijeme Lagrangeovu interpoláciu na nájdenie polynómu $p(x)$ stupňa n aby platilo $p(x_j) = f(x_j)$ pre $j = 0, 1, \ldots, n$.

Newton-Cotesove vzťahy dostaneme, samozrejme, za predpokladu, že $x_0, x_1, \ldots, x_n$ patria do intervalu na ktorom integrujeme danú funkciu, ktorú aproximujeme Lagrangeovými interpolačnými polynómami.

Výsledky sú zosumarizované v tabuľke:

n	$\int p(x)$	**Name**
1	$\frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1))$	Lichobežníková metóda
2	$\frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$	Simpsonova metóda
3	$\frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_3) + f(x_3))$	Simpson 3/8
4	$\frac{2h}{45}(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4))$	Milneho metóda

Ako už vieme, *Simpsonova metóda* je *Newton-Cotesova kvadratúra* pre $n = 2$, jej odvodenie teraz použijeme na ilustráciu týchto metódy a tiež pre lepšie pochopenie mechanizmu, ako to celé funguje.

Chceme odvodiť *Simpsonovu metódu* pre

$$\int_a^b f(x)dx$$

použijeme *Newton-Cotesov vzťah* pre $n = 2$. V tomto prípade, $x_0 = a$, $x_2 = b$ a $x_1 = (a + b)/2$. Použitím *Lagrangeovho interpolačného vzťahu* dostaneme polynóm $p(x)$ aby $p(x_j) = f(x_j)$ pre $j = 0, 1, 2$.

Odpovedajúci polynóm je

$$p(x) = f(x_1)\frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + f(x_2)\frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + f(x_3)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

a teda

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f(x_1)\frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}+f(x_2)\frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}+f(x_3)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}dx$$

Teraz preintegrujeme tento vzťah. Ak $x_j = a + hj$ kde $j = 0, 1, 2$ a $h = |b-a|/2$, môžeme prepísať tento integrál ako

$$\int_a^b p(x)\,dx = hf(x_0)\int_0^2 \frac{(t-1)(t-2)}{(0-1)(0-2)}dt+hf(x_1)\int_0^2 \frac{(t-0)(t-2)}{(1-0)(1-2)}dt+hf(x_2)\int_0^2 \frac{(t-0)(t-1)}{(2-0)(2-1)}dt$$

a ak vypočítame integrály z tohoto výrazu, máme

$$\int_a^b p(x)\,dx = hf(x_0)\frac{1}{3} + hf(x_1)\frac{4}{3} + hf(x_2)\frac{1}{3}$$

a tým dostaneme *Simpsonov vzťah* :

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

Gaussove kvadratúry

V numerickej analýze pod kvadratúrou rozumieme aproximáciu určitého integrálu nejakou funkciou, obyčajne vyjadrenou ako váhovaná suma funkčných hodnôt v špecifických bodoch z intervalu, na ktorom integrujeme. n-bodová Gaussova kvadratúra nám dáva presný výsledok pre polynómy až do stupňa $2n-1$. Integrál pri tejto metóde väčšinou vhodnou substitúciou preškálujeme tak, aby sme integrovali na intervale [-1,1]. samotný vzťah pre kvadratúru je potom daný ako:

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

Body v ktorých potom funkčnú hodnotu počítame sú koreňmi polynómu patriaceho do nejakej triedy tzv. ortogonálnych polynómov.

Vyjadrenie pre Legendrove polynómy

Ak použijeme Legendrove polynómy, počítame funkčné hodnoty nasledovných bodoch sa nasledovnými váhami:

Počet bodov n	body x_i	váhy w_i
1	0	2
2	$\pm\sqrt{1/3}$	1
3	0 $\pm\sqrt{3/5}$	$8/9$ $5/9$
4	± 0.339981044 ± 0.861136312	± 0.652145155 ± 0.347854845
5	0 ± 0.538469 ± 0.906180	0.568889 0.478629 0.236927

Preškálovanie integračného intervalu

Integračný interval preškálujeme nasledovným spôsobom:

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

a po aplikácii už spomínaného pravidla dostaneme pre odhad I:

$$I = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right)$$

Iné vyjadrenia pre Gaussove kvadratúry

Vo všeobecnosti, môžeme použiť aj iné vyjadrenia pre integrál

$$\int_a^b \Omega(x)\, f(x)\, dx$$

analogický postup potom vedie, samozrejme, tiež k odlišným pravidlám

Interval	$\Omega(x)$	Ortogonálne polynómy
$-1, 1$	1	Legendrove polynómy
$-1, 1$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	Čebyševove polynómy
$0, \infty$	e^{-x}	Laguerre-ove polynómy
$-\infty, \infty$	e^{-x^2}	Hermitove polynómy

Kuchárske poznámky

Zamyslime sa nad rýchlosťou konvergencie, napr. Gaussovská integračná procedúra zo starého balíka CERNLIB (balík písaný v jazyku FORTRAN) funguje nasledovne:

- urobí Gaussa cez 8 bodv a zároveň cez 16 bodv
- výsledky porovná
- ak sa nelíšia viac, než je požadovaná presnosť - úspech
- ak sa líšia, zoberie sa len polovičný interval a na ňom sa procedúra opakuje
- v prípade úspechu sa pokračuje na susedný podinterval

Samozrejme, podsúva sa nám otázka, načo sa pri dnešných rýchlych strojoch trápiť s komplikovanejším algoritmom typu Gauss, ak pre jemnejšie delenie intervalu použitím triviálneho Simpsona, môžem dostať rovnaký výsledok ? Bude to síce časovo náročnejšie, ale to nevadí, stroj to spočíta...

- To je pravda, ale len v princípe !

- v praxi niekedy áno, ale niekedy aj nie... ;-)

- problém je v tom, že obidve metódy kovergujú, ale Simpson pomalšie

- najmä v prípade viacrozmerných integrálov môžu konvergenciu predbehnúť zaokrúhľovacie chyby

- konečná presnosť reprezentácie reálnych čísel v počítači zapríčiňuje, že príliš jemné delenia nemajú zmysel !

- počítač medzi dvoma blízkymi číslami nevidí žiaden rozdiel a počíta s veľkou chybou !

- môže sa teda stať, že zaokrúhľovacie chyby vôbec nedovolia dosiahnuť Simpsonovi požadovanú presnosť, kým Gauss nemá prolémy !

- rýchlosť konvergencie sa dá zvýšiť aj adaptívnymi technikami hľadania správnej jemnosti delenia na podintervaly

- Nie je vôbec nutné aby jemnosť delenia bola na celej oblasti integrovania rovnaká !

Substitúcia pri numerickom integrovaní

Stratégia zjemňovania delenia inegračného intervalu nie vždy vedie k cieľu:

- ak podintegrálna funkcia v princípe nie je dobre aproximovateľná polynómom, preberané metódy nebudú konvergovať a stroskotajú na zaokrúhľovacích chybách a/alebo na z časového hľadiska prohibitne jemnom delení

- typickými prípadmi sú singulárne alebo skorosingulárne chovanie podintegrálnej funkcie v niektorých bodoch - ak napríklad podintegrálna funkcia diverguje, polynomiálne metódy často integrál nezrátajú, hoci integrál danej funkcie existuje

- ďalším príkladom sú funkcie s vysokým úzkym píkom, kde pri nedostatočne jemnom delení si pík vôbec nemusím všimnúť a dostanem totálne chybný výsledok, ak nejaký uzol metódy padne do píku, dostanem akoby fluktuáciu

- stručne zhrnuté, príliš nekonštantný priebeh funkcie sa zle integruje
- ...a ako je zrejmé, najľahšie sa integruje konštantná funkcia
- Vhodnou substitúciou však môžem každý integrál previesť na integrál z konštantnej funkcie !
- poďme sa zamyslieť nad týmto tvrdením.....

Ozrejmíme si najprv jednu teoretickú, i keď, ako uvidíme, prakticky nevyužiteľnú pravdu:

V integráli $\int f(x)\,dx$ urobíme substitúciu $x = g(t)$

a dostanem

$$\int f(x)\,dx = \int f(g(t)) \cdot g'(t)\,dt$$

ak zvolím $g(t)$, tak, aby platilo že

$$g'(t) = \frac{1}{f(g(t))}$$

tak triválne vidíme, že integrujeme konštantnú funkciu !

ak prepíšeme predchádzjúci vzťah pomocou primitívnej funkcie $f(x) = F'(x)$ ako

$$g'(t) = \frac{1}{F'(g(t))}$$

a spomenieme si na vetu o derivácii inverznej funkcie, tak vidíme, že našou substitúciou je funkcia inverzná k primitívnej.

Teda ak chceme previesť integrál na integrál z konštantnej funkcie, potom musíme poznať primitívnu funkciu k $f(x)$ (a ešte ju dokonca aj obrátiť), teda musíme vedieť funkciu $f(x)$ analyticky zintegrovať.

Tautológia, ktorá sa dala čakať.

Napriek tomu to nie je neplodná úvaha.

Háčik je v tom, že asi nepoznáme integrál z funkcie $f(x)$, ináč by sme sa nepokúšali o numerické integrovanie. Ale ak nájdeme funkciu $h(x)$, ktorá má veľmi podobný priebeh ako funkcia $f(x)$, pričom k nej primitívnu funkciu $H(x)$ poznáme a dokonca ju vieme aj obrátiť. Potom volíme substitúciu

$$x = g(t) = H^{-1}(t); \qquad g'(t) = \frac{1}{h(g(t))}$$

a teda

$$\int f(x)\, dx = \int f(H^{-1}(t)) \cdot \frac{1}{h(H^{-1}(t))}\, dt$$

Keďže $f(x)$ a $h(x)$ majú skoro rovnaký priebeh, vlastne sme v premennej t dostali integrál zo skoro-konštanty, ktorý sa už numericky bude robiť dobre.

Integrovanie metódou Monte Carlo

Integrovanie Monte Carlo je založené na vnímaní integrálu ako strednej hodnoty. Na integrál sa častejšie dívame ako na výpočet plochy pod krivkou. Ale je to to isté, ako určenie strednej hodnoty funkcie definovanej vzťahom

$$< f >= \frac{\int_a^b f(x)dx}{b-a}$$

Ak strednú hodnotu $< f >$ určíme ako strednú hodnotu n funkčných hodnôt v n náhodne vybraných bodoch, potom vlastne nájdeme experimentálne hodnotu toho integrálu.

- Každá Monte Carlo počítačová simulácia, i keď pôvodne nekoncipovaná ako výpočet integrálu, sa dá chápať ako výpočet akéhosi fiktívneho integrálu.

```
   {
double integ_sum = 0;
int n = pocet_iteracii;
double a = dolny_limit;
double b = horny_limit;
for(int i=0;i<n;i++) {

               double x = a + (b-a)*random();

               integ_sum += f(x);

                  }
double fcn_mean = integ_sum/n;
double integral = (b-a) * fcn_mean;
}
```