Metode pentru Integrarea Numerică (2)

Valentin-Ioan VINTILĂ

Facultatea de Automatică și Calculatoare - CTI
Universitatea POLITEHNICA București

23 mai 2023 (Lab. 12a)

Cuprins

Cuadraturi adaptive (1)

Am văzut data trecută exemple de funcții care ar beneficia de o integrare cu mai multe puncte doar pe anumite subintervale.

Acest procedeu poartă denumirea de **cuadratură adaptivă**.

Cuadraturi adaptive (2)

Să considerăm că vrem să calculăm $\int_a^b f(x)\,dx$. Vom considera suplimentar pasul de integrare $h = \frac{b-a}{2}$.

Notăm **generic** *approx* o funcție de aproximare a integralei, adică *approx* $\approx \int_a^b f(x)\,dx$, care primește următorii parametri:

- Funcția pe care vrem să o integrăm, f;
- Capetele de integrare, a și b;
- Pasul de integrare, h.

Evident, *approx* poate fi metoda trapezelor, Simpson 1/3, Romberg etc. Fără a pierde din generalitate, alegem **Simpson 1/3**.

Cuadraturi adaptive (3)

Amintim formula pentru Simpson 1/3:

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

Ideea cuadraturilor adaptive începe cu calculul celor două integrale de pe subintervalele $\left[a, a+\frac{h}{2}\right]$ și $\left[a+\frac{h}{2}, b\right]$:

$$\int_a^{a+\frac{h}{2}} f(x)\,dx \approx I_1 = approx\left(f, a, a+\frac{h}{2}, \frac{h}{2}\right)$$
$$\int_{a+\frac{h}{2}}^{b} f(x)\,dx \approx I_2 = approx\left(f, a+\frac{h}{2}, b, \frac{h}{2}\right)$$

Cuadraturi adaptive (4)

Dacă luăm în calcul că $a + \frac{h}{2} = \frac{a+b}{2}$, atunci obținem:

$$I_1 = approx\left(f, a, \frac{a+b}{2}, \frac{h}{2}\right)$$
$$I_2 = approx\left(f, \frac{a+b}{2}, b, \frac{h}{2}\right)$$

Calculând pentru Simpson 1/3:

$$I_1 = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(a+h)\right]$$
$$I_2 = \frac{h}{6}\left[f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3h}{2}\right) + f(b)\right]$$

Cuadraturi adaptive (5)

Într-o lume perfectă, fără erori, am obține că aproximarea integralei pe tot intervalul, I, este egală cu suma aproximărilor de pe cele două subintervale, I_1 și I_2. În lumea reală...

Amintim eroarea introdusă de Simpson 1/3 pe întreg intervalul $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = approx\,(f, a, b, h) - \frac{b-a}{180}h^4 \cdot f^{(4)}(\xi)$$
$$= I - \frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$$

Cuadraturi adaptive (6)

Ne uităm acum pentru suma subintervalelor:

$$\int_a^b f(x)\,dx = approx\left(f, a, \frac{a+b}{2}, \frac{h}{2}\right) + approx\left(f, \frac{a+b}{2}, b, \frac{h}{2}\right)$$
$$- 2 \cdot \frac{\frac{b-a}{2}}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \cdot f^{(4)}(\xi)$$
$$= I_1 + I_2 - \frac{1}{16} \cdot \frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$$

Deși cele două erori nu sunt neapărat egale, vom simplifica rezultatul prin a le considera măcar apropiate. Atunci:

$$I - \frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi) \approx I_1 + I_2 - \frac{1}{16} \cdot \frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$$

Cuadraturi adaptive (7)

Reordonând, obținem:

$$\frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi) \approx \frac{16}{15}(I - I_1 - I_2)$$

Un ultim pas – ne întoarcem în calculul integralei inițiale:

$$\int_a^b f(x)\,dx = I_1 + I_2 - \frac{1}{16} \cdot \frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$$

Avem deci eroarea:

$$\boxed{\varepsilon = \left| \int_a^b f(x)\,dx - I_1 - I_2 \right| = \frac{1}{15}(I - I_1 - I_2)}$$

Cuadraturi adaptive – sinteză

Pe scurt, algoritmul se sintetizează astfel:

1. Se aproximează integrala pe întreg intervalul, respectiv pe două subintervale egale:

$$\boxed{\begin{cases} I = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \\ I_1 = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(a+h)\right] \\ I_2 = \frac{h}{6}\left[f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3h}{2}\right) + f(b)\right] \end{cases}}$$

2. Se verifică dacă eroarea $\varepsilon = \frac{1}{15}(I - I_1 - I_2)$ este acceptabilă și se repetă algoritmul până suntem suficient de aproape.

Cuadraturi Gaussiene – introducere (1)

Vrem să calculăm integrala:

$$I_\omega = \int_{-1}^{1} f(x)\omega(x)\,dx$$

În spiritul cuadraturilor, considerăm o aproximare de forma:

$$\tilde{I}_{n,\omega}(f) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k f(x_k)$$

Cuadraturi Gaussiene – introducere (2)

Evident, eroarea este dată de diferența dintre cele două:

$$\boxed{\varepsilon_{n,\omega}(f) = I_\omega(f) - \tilde{I}_{n,\omega}(f)}$$

Fie $p \in \mathbb{P}_r$ un **polinom** de grad $r \in \mathbb{N}$. Dacă $\varepsilon_{n,\omega}(p) = 0$, atunci aproximarea $\tilde{I}_{n,\omega}(f)$ are **gradul de valabilitate** r în raport cu ponderea ω.

Cuadraturi Gaussiene – introducere (3)

Să zicem însă că nu cunoaștem f, ci numai evaluări ale sale, adică $M = \{(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2 \mid y_k = f(x_k),\ k = \overline{0,n}\}$.

Ce facem? Interpolare Lagrange:

$$\boxed{f(x) \approx L_f(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)}, \text{ unde } l_k(x) = \prod_{\substack{0 \le j \le n \\ i \ne j}} \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j}\right)$$

Cuadraturi Gaussiene – introducere (4)

Scriem acum $I_\omega(L_f)$ (integrala exactă):

$$I_\omega(L_f) = \int_{-1}^{1} L_f(x)\omega(x)\,dx = \int_{-1}^{1} \left(\sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)\right)\omega(x)\,dx$$

Scoatem suma în față:

$$\boxed{I_\omega(L_f) = \sum_{k=0}^{n} y_k \left(\int_{-1}^{1} l_k(x)\omega(x)\,dx\right)}$$

Totodată, aproximarea, $\tilde{I}_{n,\omega}(L_f)$, ia forma:

$$\tilde{I}_{n,\omega}(L_f) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k L_f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k y_k$$

Cuadraturi Gaussiene – introducere (5)

Prin identificare ($\varepsilon = 0$), obținem:

$$\boxed{\alpha_k = \int_{-1}^{1} l_k(x)\omega(x)\,dx}, \ \forall k = \overline{0,n}$$

Cuadraturi Gaussiene – grad de valabilitate (1)

Acceptăm, *fără demonstrație*, următorul rezultat:

Cuadratura gaussiană a lui $M = \{(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2 \mid y_k = f(x_k),\ k = \overline{0,n}\}$ are gradul de valabilitate egal cu $n + m$ dacă și numai dacă se utilizează o tehnică de interpolare și se respectă egalitatea:

$$\int_{-1}^{1} \left(\prod_{k=0}^{n}(x - x_k)\right) p(x)\omega(x)\,dx = 0,\ \forall p \in \mathbb{P}_{m-1}$$

Dacă notăm $\Psi_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$, ecuația anterioară se scrie:

$$\boxed{\int_{-1}^{1} \Psi_{n+1}(x)p(x)\omega(x)\,dx = 0}, \ \forall p \in \mathbb{P}_{m-1}$$

Cuadraturi Gaussiene – grad de valabilitate (2)

Cu ce seamănă mult ecuația anterioară?

Polinoame ortogonale!

Polinoamele $\Psi_{n+1}(x)$ și $p(x)$ trebuie să fie deci ortogonale în raport cu o funcție pondere ω, **indiferent de alegerea polinomului** $p \in \mathbb{P}_{m-1}$.

Cuadraturi Gaussiene – grad de valabilitate (3)

Corolar (grad maxim de valabilitate)

Se garantează faptul că gradul maxim de valabilitate al unei aproximări de $n+1$ puncte (a funcției $M = \{(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2 \mid y_k = f(x_k),\ k = \overline{0,n}\}$, unde $n \in \mathbb{N}^*$) este $2n+1$.

Demonstrația (poate prin reducere la absurd) – temă...

Cuadraturi Gaussiene – puncte de evaluare (1)

Toate bune și frumoase, dar **cum alegem optim** mulțimea $M = \{(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2 \mid y_k = f(x_k),\ k = \overline{0,n}\}$?

Vrem să forțăm:

$$\int_{-1}^{1} \Psi_{n+1}(x) p(x) \omega(x)\, dx = 0,\ \forall p \in \mathbb{P}_n$$

Echivalent, polinomul $\Psi_{n+1}(x)$ de grad $n+1$ trebuie să fie ortogonal față de orice alt polinom de grad mai mic decât acesta (cel mult n)

Cuadraturi Gaussiene – puncte de evaluare (2)

Concluzionăm că polinomul monic $\Psi_{n+1}(x)$ poate fi scris drept un multiplu al **unui polinom ortogonal** de grad $n+1$, să zicem P_{n+1}.

Rădăcinile lui $\Psi_{n+1}(x)$ și ale lui P_{n+1} **vor coincide!**

Amintind că $\Psi_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$, obținem că trebuie să vânăm:

$$\boxed{P_{n+1}(x_k) = 0},\ \forall k = \overline{0,n}$$

Cuadraturi Gaussiene – domeniu de integrare

A mai rămas o ultimă problemă – noi calculăm integrala pe $[-1, 1]$.

Vrem să generalizăm pentru $[a, b] \subset \mathbb{R}$:

$$I = \int_a^b f(x)\, dx$$

Facem schimbarea de variabilă:

$$u = \frac{2x - a - b}{b - a} \Leftrightarrow \boxed{x = \frac{(b-a)u + a + b}{2} \Rightarrow dx = \frac{b-a}{2} du}$$

Integrala devine:

$$\boxed{I = \int_a^b f(x)\, dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)u + a + b}{2}\right) du}$$

Cuadraturi Gaussiene – sinteză (1)

Pe scurt, algoritmul este următorul:

1. Se schimbă capetele de integrare ($[a, b] \to [-1, 1]$):

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

2. Cunoscând polinoamele ortogonale cu care lucrăm, se calculează rădăcinile polinomului P_{n+1} - acestea vor reprezenta abscisele $x_0, \ldots, x_n$. Din punct de vedere strict algoritmic, aceste valori sunt adesea precalculate și reținute ca atare.

Cuadraturi Gaussiene – sinteză (2)

3. Se calculează apoi coeficienții $\alpha_0, \ldots, \alpha_n$ utilizând formula:

$$\alpha_k = \int_{-1}^{1} l_k(x) \omega(x)\, dx,\ \forall k = \overline{0,n}$$

Înlocuind cu definiția lui l_k, se ajunge la formula:

$$\alpha_k = \int_{-1}^{1} \Big(\prod_{\substack{0 \le j \le n \\ i \ne j}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \Big) \omega(x)\, dx,\ \forall k = \overline{0,n}$$

Aceste valori sunt de asemenea precalculate și utilizate ca atare.

Cuadraturi Gaussiene – sinteză (3)

4. Nu în ultimul rând, se calculează integrala:

$$I = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)x + a + b}{2}\right) dx$$
$$\approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^{n} \alpha_k f\left(\frac{(b-a)x_k + a + b}{2}\right)$$

Cuadraturi Gauss-Legendre (1)

Până la acest moment, am preferat o explicație matematică cât mai generală posibil.

Începem însă să utilizăm **polinoamele Legendre normalizate**.

Cuadraturi Gauss-Legendre (2)

n	**Al $(n+1)$-lea polinom Legendre**	**Polinomul normalizat**
0	1	1
1	x	x
2	$\frac{1}{2}(3x^2-1)$	$x^2-\frac{2}{3}$
3	$\frac{1}{2}(5x^3-3x)$	$x^3-\frac{6}{5}x$
4	$\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$	$x^4-\frac{48}{7}x^2+\frac{24}{35}$

Tabel pentru polinoamele Gauss-Legendre

Se simplifică formulele pentru α_k:

$$\boxed{\alpha_k = \frac{2}{(1-x_k^2)\left[P_n'(x_k)\right]^2}},\ \forall k = \overline{0,n}$$

Cuadraturi Gauss-Legendre (3)

n	**Valorile absciselor (x_k)**	**Valorile ponderilor individuale (α_k)**
0	0	2
1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	1
	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	1
2	$-\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$
	0	$\frac{8}{9}$
	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$

Tabel pentru valorile lui x_k, respectiv α_k

Bibliografie

Toate resursele bibliografice de care aveți nevoie se găsesc în descrierea cu care a venit atașată această prezentare.

Sfârșit

Mulțumesc frumos pentru atenție!

Vă rog frumos să **completați formularul de feedback**!