

# Numerikus integrálás

Egyszerű függvényeknek általában könnyű a deriváltját felírni, az ismert deriválási szabályok szerint, viszont analitikusan jóval kevesebb függvényt tudunk kiintegrálni. A feladat tehát ilyen függvények integrálját numerikus módon közelíteni.

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

Ez tekinthető egy egyszerű differenciálegyenletnek az  $I \equiv y(b)$  helyettesítéssel:

$$\frac{dy}{dx} = f(x)$$

az  $y(a) = 0$  peremfeltétellel. Azok a módszerek amik a differenciálegyenletek integrálásánál az *adaptív lépéshossz* változtatásra vonatkoztak, itt is alkalmazhatóak olyan függvényeknél amelyek bizonyos szakaszokon meredeken változnak, míg máshol alig. Ezeket most nem ismételjük el.

A numerikus integrálás (*kvadraturának* is nevezi a szakirodalom) módszerei azon alapulnak, hogy az integrálandó tartományt diszkrétizáljuk, és a diszkrét pontokban felvett függvényértékeket az intervallumok hosszával

megszorozva, megfelelő súlyozással összeadjuk. A cél az, hogy minél kevesebb függvénykiértékeléssel, minél pontosabban meghatározzuk az integrál értékét.

Egy másik lehetséges alapelv, hogy az integrálandó függvényt közelítsük olyan függvényekkel amelyeket analitikusan tudunk integrálni. Így pl. a már tárgyalt *köbös spline interpolációt* felhasználva a függvény egyes szakaszait harmadrendű polinomokkal közelíthetjük, és azok integrálját analitikusan számolhatjuk.

Hasonló megoldás a függvény kifejtése egy olyan ortogonális bázison ( $T(x)$ ) amely elemei analitikusan integrálhatóak:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^N c_i T_i(x)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^N c_i R_i$$

ahol  $R_i = \int_a^b T_i(x) dx$ . Bizonyos esetekben (pl. Chebysev polinom kifejtés)  $R_i$  egyszerűen előáll néhány szomszédos  $T_i$  lineárkombinációjaként tovább egyszerűsítve a feladatot (lásd [1]).

Általában  $N$  pontban egyenletes  $h$  lépésközönként  $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}$  -ben számoljuk ki a függvényértékeket

$f_i = f(x_i)$ ,  $i = 0, \dots, N - 1$ . Ha az integrál számolásánál felhasználjuk a határon lévő függvényértékeket (  $f(a) = f_0$  illetve  $f(b) = f_{N-1}$  ) akkor *zárt*, ellenkező esetben pedig *nyitott* formulákról beszélünk. Ez utóbbiakra az úgynevezett *improprius integrálok* esetén lesz szükség, ahol a határokon nem lehet kiértékelni a függvényt (pl. divergál), viszont az integrál létezik.

# Zárt Newton-Cotes formulák

Az alábbiakban néhány szomszédos intervallumon való integrálra írunk fel közelítő formulákat. Ezek összege adja a teljes integrált.

A legegyszerűbb az úgynevezett *trapéz szabály*:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = h \left[ \frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}f_2 \right] + O(h^3 f'')$$

ami nem más mint lineáris interpoláció alkalmazása a két pont között és az így kapott trapéz területének kiszámítása. A formula 1-ső rendű polinomokig bezárólag egzakt, utána pedig a hiba a fent jelölt módon skálázik. Sejthető, hogy ha több szomszédos pont megfelelő kombinációját vesszük, (ami megfelel magasabb rendű polinomok illesztésének) akkor magasabb rendben pontos formulák hozhatóak ki. Valóban a 3 pontos formula elvileg harmadrendig lenne pontos, de a hibatagok szerencsés módon kiejtik egymást, így a *Simpson formula*

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)dx = h \left[ \frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{1}{3}f_3 \right] + O(h^5 f^{(4)})$$

negyedrendig pontos. Látni kell azonban, hogy a magasabb rendű formula csak akkor jelent nagyobb pontosságot, ha a függvény kellően sima, vagyis a magasabb deriváltak elég kicsik.

A fenti és a későbbi formulák levezetésére vannak elegánsabb módszerek is de a következő módon módszeresen megkaphatóak. Keressünk pl. első rendű polinomokra egzakt képletet a következő formában:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = h [\alpha f_1 + \beta f_2]$$

Az általánosság megszorítása nélkül írjuk fel a fenti egyenletet az  $f(x) = 1$  nullad- illetve  $f(x) = x$  elsőrendű polinomokra:

$$x_2 - x_1 = h [\alpha + \beta]$$

$$\frac{x_2^2}{2} - \frac{x_1^2}{2} = h [\alpha x_1 + \beta x_2]$$

Az első egyenletbe beírva a  $h = x_2 - x_1$  azonosságot azt kapjuk, hogy  $\beta = 1 - \alpha$ . Ezt a két azonosságot beírva a második egyenlet átalakul

$$\frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2} = \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2 = x_2 + \alpha(x_1 - x_2)$$

ahonnan egyszerűen adódik  $\alpha = 1/2$  valamint  $\beta = 1/2$ , vagyis a trapéz formula.

Miután kiszámoltuk az egyes intervallumokra az integrált a teljes integrál ezek összegéből állítható elő. Pl. a trapéz szabályra:

$$\int_{x_0}^{x_{N-1}} f(x) dx = h \left[ \frac{1}{2} f_1 + f_2 + \dots + f_{N-2} + \frac{1}{2} f_{N-1} \right] + O \left( \frac{(b-a)^3 f^{(2)}}{N^2} \right)$$

Ezt nevezhetjük *felösszegzet trapéz szabálynak*. Itt a felosztások számával írtuk fel a hiba skálázását. Látható, hogy ha kétszeresére növeljük a pontok számát, akkor a hiba negyedrésszére csökken. A gyakorlatban praktikus úgy eljárni, hogy kiindulunk abból az esetből amikor csak az intervallum két végpontjában veszünk fel osztáspontokat, kiszámoljuk erre az esetre a fenti formulát, ez lesz az első közelítés.

$$I_1 = s_1 = (b-a) \left[ \frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) \right]$$

Utána kiszámoljuk a már meglévő intervallum(ok) felezőpontjában is a függvényérték és az aktuális  $h$  szorzatát.

$$s_2 = \frac{(b-a)}{2} f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

És a kettő súlyozott összegéből kapható az integrál következő közelítése a fent bemutatott általános formula alapján

$$I_2 = \frac{1}{2}I_1 + s_2$$

Az  $1/2$  súlyfaktor abból adódik, hogy  $h$  felére csökkent az első lépéshez képest. Ha így egyre felezzük az intervallumokat, akkor mindig csak az új osztópontokban kell kiszámolni a függvényt, és az előző közelítés eredményét felhasználhatjuk a többi osztópontokhoz tarozó összegként. Az eljárást addig kell folytatni, amíg az előző közelítéstől való eltérés nem csökken le egy adott hibakorlát alá.

Belátható, hogy a felösszegzett trapéz szabály hibatagja  $1/N$  csak páros rendű hatványait tartalmazza. Így a  $2N$  felosztásos képlet hibája vezető rendben  $1/4N^2$  lesz, vagyis negyed részsze az  $N$  felosztásos képlet hibájának vezető tagjának. Az

$$I = \frac{4}{3}I_{2N} - \frac{1}{3}I_N$$

kombinációval kiejthető ez a tag, és így a hiba  $O(1/N^4)$  lesz, mivel nincs a hibában harmadrendű tag. Így tehát ugyanannyi függvénykiértékeléssel másodrendűről negyedrendűre csökkentettük a hibát. Belátható, hogy az így kapott képlet pont a Simpson formula. Ne felejtsük el, hogy ez csak akkor hasznos, ha a negyedik derivált nem túl nagy.

# Romberg integrálás

Az előző módszer tovább folytatható, vagyis további tagok segítségével felírhatók olyan kombinációk, amelyek kiejtik a 4-ed, 6-od, stb. rendű hibákat. Ugyanezt az eredményt kapjuk egy másik alapvető módszerrel, nevezetesen, hogy az egyre kisebb  $h$  lépésközű felosztásokból extrapolálunk a  $h = 0$  esetre, ami az egzakt értéknek felel meg. Ehhez az extrapolációhoz használható a már ismerttetett polinom-interpolációs módszer. Ez az eljárás akár nagyságrendekkel csökkentheti az azonos hiba eléréséhez szükséges függvényértékelések számát.



# Improprius integrálok

Abban az esetben ha a függvény nem értékelhető ki az integrálási határokon akkor az eddig felírt zárt formulák nem alkalmazhatóak. Felírhatóak azonban nyílt formulák pl. a trapézformulához hasonló gondolat alapján az úgynevezett középponti szabály felösszegzett verziója így írható:

$$\int_{x_0}^{x_{N-1}} f(x) dx = h[f_{1/2} + f_{3/2} + \dots + f_{N-3/2}] + O(1/N^2)$$

Ezzel hasonlóan járhatunk el mint a zárt formulákkal, egyre finomabb felosztást csinálhatunk amíg el nem érjük a szükséges pontosságot.

Olyan integrálok kiszámítása amelyeknél az egyik határ  $+\infty$  vagy  $-\infty$  szintén nem számíthatóak ki intervallumok összegzésével. Ilyenkor változóhelyettesítést kell alkalmazni:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt \quad ab > 0$$

Ha mindkét határ ha a határok előjele nem azonos, akkor szétvághatjuk két részre az integrálandó intervallumot.

Ha a függvénynek integrálható szingularitása van az intervallumban, akkor az felvágással az intervallum határára vihető. Ha pl. a divergencia  $a$ -ban hatvány jellegű  $(x - a)^\gamma$   $0 \leq \gamma < 1$ , akkor az

$$x = t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a \quad \text{azaz} \quad t = (x - a)^{1-\gamma}$$

helyettesítéssel így írható fel:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{1-\gamma} \int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a) dt$$

# Gauss formulák

A témakört csak vázlatosan nézzük meg, további részletek [1]-ben és az ott lévő referenciákban találhatóak.

Eddig az integrálandó tartományt egyenletesen osztottuk fel. Ha az osztáspontokat is szabadon választhatjuk meg, belátható, hogy - mivel kétszer annyi szabadsági fokunk van a hibatagok kiejtésére - kétszeres hibarendig lehet eljutni ugyanannyi függvénykiértékeléssel. Természetesen ez csak akkor előny, ha az integrálandó függvény elég sima, vagyis a magasabb rendű deriváltak egyre kisebbek. A Gauss típusú formulák egzaktak olyan esetben amikor az integrandus előáll egy polinom és egy bizonyos halmazba tartozó függvény szorzataként.

$$\int_a^b W(x)f(x)dx = \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

ahol  $f(x)$  polinom alakú,  $W(x)$  pedig az integrálható singularitást tartalmazó függvény. Néhány gyakori  $W(x)$ -et hamarosan felírunk. A feladat tehát abból áll, hogy egy adott  $W$ -hez és  $(a, b)$ -hez megtaláljuk a megfelelő  $x_j$  abszcisszákat és  $w_j$  együtthatókat. Ez általában nem egyszerű feladat, de néhány gyakori  $W(x)$ -hez ezek ki vannak számolva, illetve elegendő egyszer kiszámolni, és ez a két táblázat többször felhasználható.

Az abszcisszák úgy találhatóak meg, hogy az adott  $W(x)$ -hez felírható egy polinombázis  $p_0(x), p_1(x), \dots, p_j(x)$   $0, 1, \dots, j$ -ed rendű polinomokból melyekre teljesül, hogy ortogonálisak  $W$  súlyfüggvényre nézve

$$i \neq j \quad 0 = \langle p_i | p_j \rangle \equiv \int_a^b p_i(x) W(x) p_j(x) dx$$

Ezen polinomok gyökei adják meg az abszcisszákat és a

$$p_i(x_j) w_j = \int_a^b W(x) p_i(x) \delta_{i0} dx$$

$w_j$  ben lineáris egyenletrendszer megoldása adja a súlyokat. A polinomokat egy rekurzió segítségével írhatjuk fel:

$$p_{-1}(x) = 0$$

$$p_0(x) = 1$$

$$p_{j+1}(x) = (x - a_j) p_j(x) - b_j p_{j-1}(x)$$

ahol

$$a_j = \frac{\langle xp_j | p_j \rangle}{\langle p_j | p_j \rangle}$$

$$b_j = \frac{\langle p_j | p_j \rangle}{\langle p_{j-1} | p_{j-1} \rangle}$$

A legegyszerűbb példa a Gauss-Legendre formula:

$$W(x) = 1 \quad -1 < x < 1$$

$$(j + 1)P_{j+1} = (2j + 1)xP_j - jP_{j-1}$$

$$\pm x_i = 0.0, 0.1488, 0.4333, 0.6794, 0.8650, 0.9739$$

$$w_i = 0.0, 0.2955, 0.2692, 0.2190, 0.1494, 0.0666$$

További fontos esetekre csak  $W(x)$ , a hozzá tartozó polinomok a nevekkel jelölt polinomok:

Gauss-Chebyshev:  $W(x) = (1 - x^2)^{-1/2} \quad -1 < x < 1$

Gauss-Laguerre:  $W(x) = x^\alpha e^{-x} \quad 0 < x < \infty$

Gauss-Hermite:  $W(x) = e^{-x^2} \quad -\infty < x < \infty$

Gauss-Jacobi:  $W(x) = (1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta \quad -1 < x < 1$

[1] tartalmaz rutinokat a fentiekhez tartozó együtthatók és abszcisszák kiszámítására.

# Többdimenziós integrálok

A többdimenziós integrálok kiszámítása általában igen nehéz. Egyrészt, mert a kiértékelendő pontok száma a dimenzióval exponenciálisan skálázik, vagyis ha 1 dimenzióban elegendő volt  $10^2$  függvénykiértékelés, akkor 3 dimenzióban  $10^6$  lesz a tipikus érték.

Másik probléma, hogy míg 1 dimenzióban két szám határozta meg a határokat, addig most egy  $D - 1$  dimenziós felület ha az integrál  $D$  dimenziós. Az integrálandó tartomány lehet igen bonyolult, nem konvex, sőt nem is összefüggő.

Néha a több dimenziós integrál redukálható alacsonyabb dimenzióra (pl. gömbszimmetrikus eloszlás integrálja). Ha ez nem lehetséges, de ha a határfelület egyszerű alakú, akkor három egymásba ágyazott integrált kell elvégezni és ez három lépésben megtehető:

$$\int \int \int dx dy dz f(x, y, z) = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz f(x, y, z)$$

Itt ha használhatjuk a Newton illetve Gauss formulákat, akkor elfogadható idő alatt eredményt kaphatunk. Léteznek többdimenziós Gauss formulák is.

Ha viszont a függvény gyorsan változik az integrálandó tartományban (de azért nem éles csúcsokal, mert akkor nincs sok remény, ha csak nem tudjuk kivágni a csúcsokat) vagy

a határfelület komplikált akkor a Monte-Carlo módszer alkalmazása jöhet szóba. E módszer viszont igen lassan konvergál, tehát nagy pontosság nem érhető el vele.



# Monte-Carlo integrálás

Egy többdimenziós integrál Monte-Carlo közelítése:

$$\int f dV \approx V \langle f \rangle \pm V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}}$$

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

vagyis az integrált a függvény átlagértékének és a teljes térfogat szorzatával írjuk fel, és az átlagértéket  $N$  mintavételezéssel közelítjük. A hiba  $1/\sqrt{N}$ -el skálázik, ami elég lassú konvergenciát jelent.

Gyakran nem egyszerű olyan véletlen pontokat generálni, amik csak az integrálandó térfogatban vannak, és azt egyenletesen mintavételezik. Ilyenkor egy az integrálandót magába foglaló egyszerűbb alakú térfogatot kell választani (minél közelebb az eredetihez). Az integrált most ezen a térfogaton végezhetjük egy olyan függvényre, amely az integrálandó térfogaton belül felveszi az igazi függvényértéket, azon kívül pedig 0-t. Legegyszerűbb példa lehet egy bonyolult felülettel határolt térfogat kiszámítása. Ekkor az integrálandó függvény 1 és az eredményt a fentiek alapján egyszerűen a

felületen belüli és kívüli pontok aránya adja meg abban az esetben ha a befoglaló térfogat egységnyi.

Ha a függvény amit integrálunk az integrálandó térfogat nagy részén 0-hoz közeli értéket vesz fel, akkor sok lépést elpazarolunk. Ilyenkor praktikus változóhelyettesítéssel minél inkább konstanshoz közeli alakra hozni az integrandust. Pl. ha a  $\rho(x, y, z) = e^{5z}$  fv.-t szeretnénk kiintegrálni a  $[-1, 1]$  kocka egy részhalmazán, akkor a  $z \approx -1$  körül az integrandus nagyon kis értéket vesz fel, alig növelve a szummát. A  $ds = e^{5z} dz$  helyettesítéssel az integrandus konstanssá alakítható, csak a  $z$  tengelyt és a határokat kell megfelelően átskálázni.

Ha a random mintavételezés helyett bizonyos kvázirandom módon mintavételezünk, valamint további trükkökkel a hiba rendje  $N^{-1}$ -re csökkenthető.