

# Osnovna numerična orodja

Kemijsko inženirstvo 2  
Numerična integracija  
(Vir: Študijsko gradivo MIT,  
Wikipedia)



# Numerična integracija

- Riemann-ova metoda
- Trapezna metoda
- Simpson-ova metoda



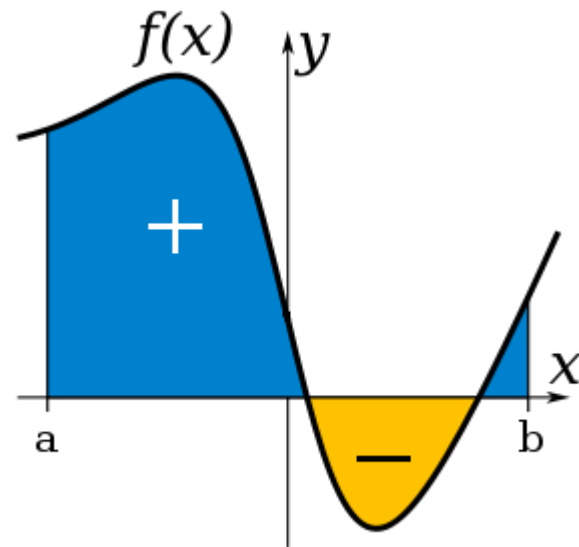
# Riemann-ova metoda

Definicija določenega in nedoločenega integrala.

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

$$F(x) = \int f(x) dx.$$

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

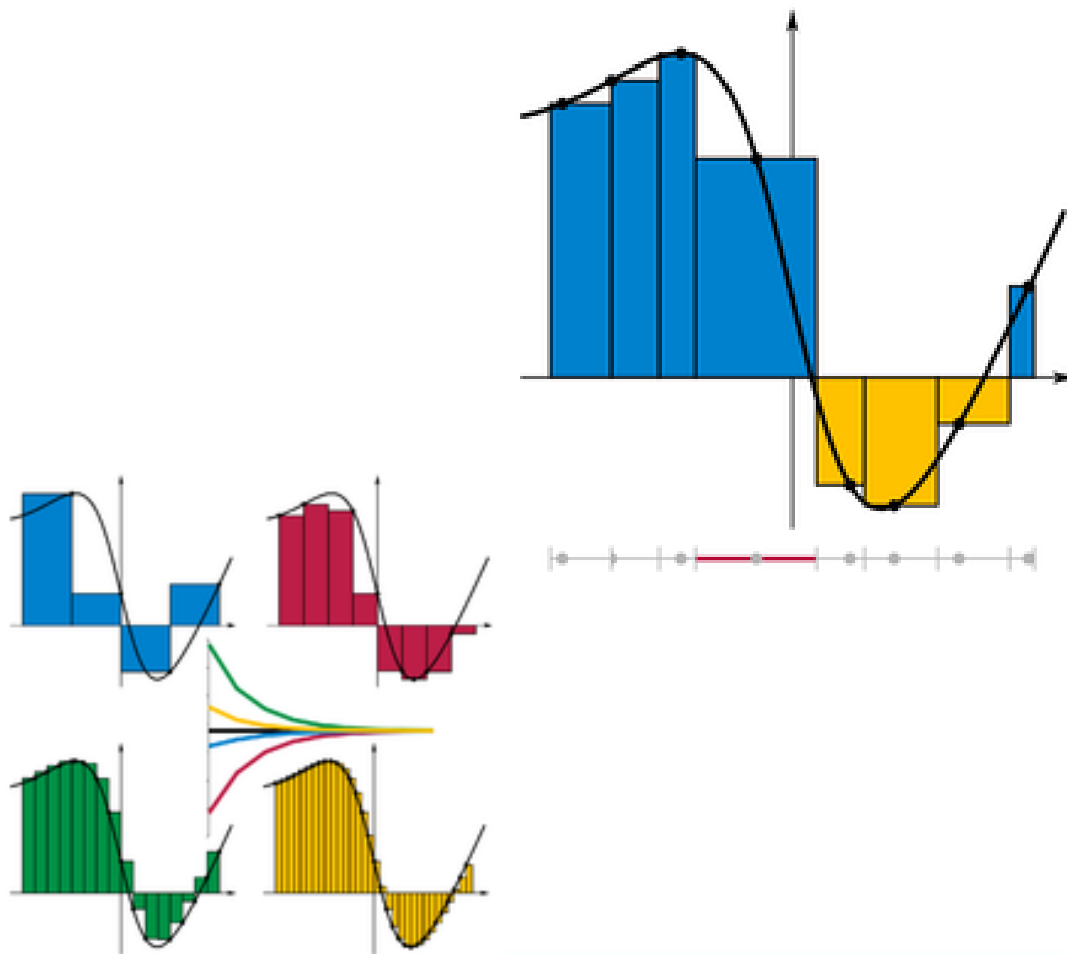


# Riemann-ova metoda

Integral kot vsota.

$$\sum_{i=1}^n f(t_i) \Delta_i;$$

$$\left| S - \sum_{i=1}^n f(t_i) \Delta_i \right| < \varepsilon.$$



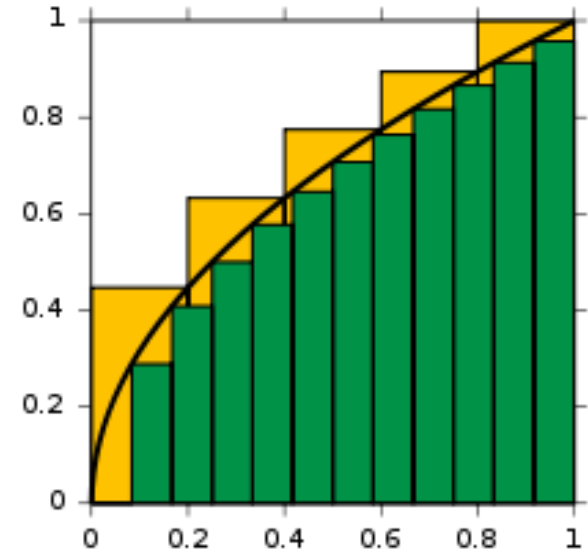
# Riemann-ova metoda

Primer:

$$\int_0^1 \sqrt{x} dx.$$

$$\sqrt{\frac{1}{5}} \left( \frac{1}{5} - 0 \right) + \sqrt{\frac{2}{5}} \left( \frac{2}{5} - \frac{1}{5} \right) + \dots + \sqrt{\frac{5}{5}} \left( \frac{5}{5} - \frac{4}{5} \right) \approx 0.7497.$$

$$\int_0^1 \sqrt{x} dx = \int_0^1 x^{1/2} dx = F(1) - F(0) = \frac{2}{3}.$$



# Riemann-ova metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 1:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,00000
1,00000			

$$\Delta_i = 0,5:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,35355
0,50000	0,70711		
1,00000			



# Riemann-ova metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 0,1:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,61051
0,10000	0,31623		
0,20000	0,44721		
0,30000	0,54772		
0,40000	0,63246		
0,50000	0,70711		
0,60000	0,77460		
0,70000	0,83666		
0,80000	0,89443		
0,90000	0,94868		
1,00000			

$$\Delta_i = 0,01:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,66146
0,01000	0,10000		
0,02000	0,14142		
0,03000	0,17321		
0,04000	0,20000		
0,05000	0,22361		
0,06000	0,24495		
0,07000	0,26458		
0,08000	0,28284		
0,09000	0,30000		
0,10000	0,31623		
0,11000	0,33166		
0,12000	0,34641		
0,13000	0,36056		
0,14000	0,37417		
0,15000	0,38730		



# Numerična integracija

- Riemann-ova metoda
- Trapezna metoda
- Simpson-ova metoda





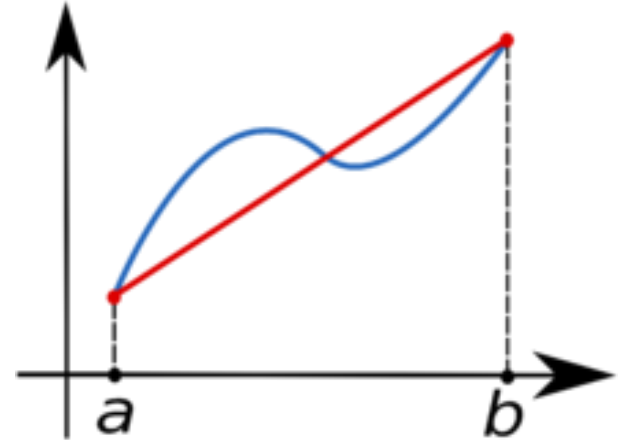
# Trapezna metoda

Definicije metode.

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

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b - a) \left[ \frac{f(a) + f(b)}{2} \right].$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \sum_{k=1}^N (f(x_{k+1}) + f(x_k))$$



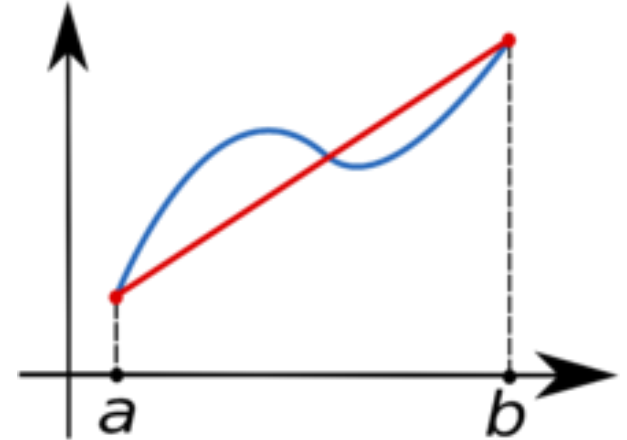
# Trapezna metoda

Napaka metode.

$$\text{error} = \int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{N} \left[ \frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} f\left(a + k \frac{b-a}{N}\right) \right]$$

$$\text{error} = -\frac{(b-a)^3}{12N^2} f''(\xi)$$

$$\text{error} = -\frac{(b-a)^2}{12N^2} [f'(b) - f'(a)] + O(N^{-3}).$$



# Trapezna metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 1:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,70711		0,70711
1,00000			

$$\Delta_i = 0,5:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,50000		0,68301
0,50000	0,86603		
1,00000			



# Trapezna metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 0,1:$$

$$\Delta_i = 0,01:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,22361		0,66838
0,10000	0,38730		
0,20000	0,50000		
0,30000	0,59161		
0,40000	0,67082		
0,50000	0,74162		
0,60000	0,80623		
0,70000	0,86603		
0,80000	0,92195		
0,90000	0,97468		
1,00000			

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,07071		0,66673
0,01000	0,12247		
0,02000	0,15811		
0,03000	0,18708		
0,04000	0,21213		
0,05000	0,23452		
0,06000	0,25495		
0,07000	0,27386		
0,08000	0,29155		
0,09000	0,30822		
0,10000	0,32404		
0,11000	0,33912		
0,12000	0,35355		
0,13000	0,36742		
0,14000	0,38079		
0,15000	0,39370		



# Numerična integracija

- Riemann-ova metoda
- Trapezna metoda
- Simpson-ova metoda



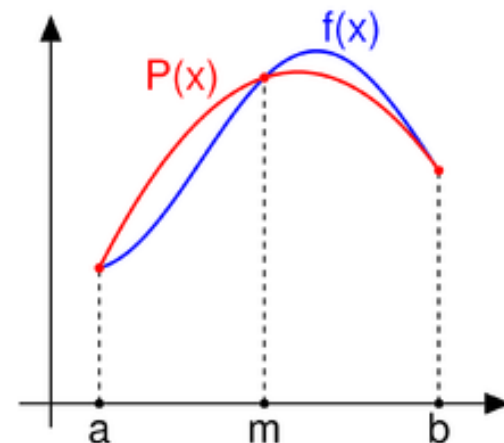
# Simpson-ova metoda

Definicije metode.

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

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)].$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n) \right],$$

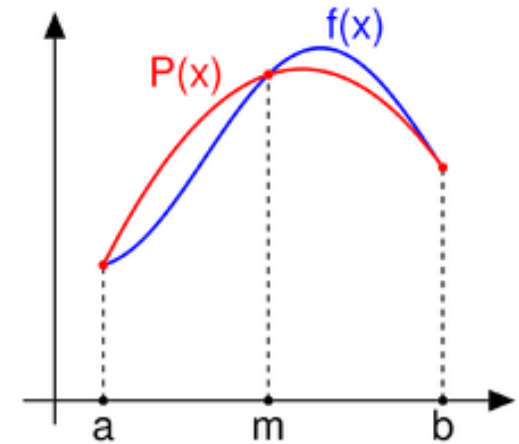


# Simpson-ova metoda

Napaka metode.

$$\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 |f^{(4)}(\xi)|,$$

$$(b-a)^5$$



Obstajajo bolj natančne različice metode, ki napako zmanjšajo za določen faktor.



# Simpson-ova metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 1:$$

Premalo korakov za metodo!

$$\Delta_i = 0,5:$$

Premalo korakov za metodo!





# Simpson-ova metoda

Drobljenje koraka:

$$\Delta_i = 0,1:$$

$$\Delta_i = 0,01:$$

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,66410
0,10000	0,31623		
0,20000	0,44721		
0,30000	0,54772		
0,40000	0,63246		
0,50000	0,70711		
0,60000	0,77460		
0,70000	0,83666		
0,80000	0,89443		
0,90000	0,94868		
1,00000	1,00000		

$x_i$	$f(x_i)$		Integral:
0,00000	0,00000		0,66659
0,01000	0,10000		
0,02000	0,14142		
0,03000	0,17321		
0,04000	0,20000		
0,05000	0,22361		
0,06000	0,24495		
0,07000	0,26458		
0,08000	0,28284		
0,09000	0,30000		
0,10000	0,31623		
0,11000	0,33166		
0,12000	0,34641		
0,13000	0,36056		
0,14000	0,37417		
0,15000	0,38730		



# Primer 1

- Poiščimo integral funkcije  $f(x) = e^{-x}$  med  $x = 0$  in  $x = 10$  po eksaktni in vseh treh predstavljenih numeričnih metodah, pri čemer za korak vzemimo vrednosti 0,01, 0,1 in 1. V vseh treh primerih izračunajmo napako numerične integracije.



# Primer 2

- Poiščimo integral funkcije  $f(x) = 20x^3 + 5x^2 + 3x + 1$  med  $x = 0$  in  $x = 10$  po eksaktni in vseh treh predstavljenih numeričnih metodah, pri čemer za korak vzemimo vrednosti 0,01, 0,1 in 1. V vseh treh primerih izračunajmo napako numerične integracije.



# Primer 3

- Poiščimo integral funkcije  $f(x) = |\sin(x)|$  med  $x = 0$  in  $x = 10$  po eksaktni in vseh treh predstavljenih numeričnih metodah, pri čemer za korak vzemimo vrednosti 0,01, 0,1 in 1. V vseh treh primerih izračunajmo napako numerične integracije.

