

Obliczenia naukowe

Wykład nr 13

Paweł Zieliński

Katedra Podstaw Informatyki,
Wydział Informatyki i Telekomunikacji,
Politechnika Wrocławska



Literatura

Literatura podstawowa

- [1] D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, 2005.
- [2] A. Bjorck, G. Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN, 1987.
- [3] M. Dryja, J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 2, WNT, 1988.
- [4] Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, WNT 1998.
- [5] J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 1, WNT, 1988.
- [6] J. Stoer, R. Bulirsch, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, 1987.

Literatura uzupełniająca

- [7] Kielbasiński, H. Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa*, WNT, 1993.
- [8] A. Ralston, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, 1975.

Znaczna część wykładu została przygotowana na podstawie książki [5].



Całkowanie numeryczne

Niech $\mathcal{F} = \mathcal{F}(a, b)$ będzie klasą funkcji całkowalnych w przedziale $[a, b]$.

Całkę funkcji f będziemy oznaczali przez I ($I : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$)

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \quad f \in \mathcal{F}.$$

Całkę $I(f)$ będziemy przybliżali funkcjonalami Q

$$Q(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad I(f) \approx Q(f),$$

nazywanymi kwadraturami. $\{x_k\} \in [a, b]$ są węzłami, a $\{A_k\}$ są współczynnikami kwadratury Q .



Całkowanie numeryczne

Rozpatrzmy bardziej ogólną funkcję $I_p : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$

$$I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx \quad f \in \mathcal{F}, \quad I_p(f) \approx Q(f),$$

gdzie $p \in \mathcal{F}$ jest nieujemną funkcją całkowalną – wagą,

Definicja 1

Funkcję $R : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ o wartościach $R(f) = I_p(f) - Q(f)$ nazywamy resztą kwadratury Q , $I_p(f) = Q(f) + R(f)$.

Definicja 2

Kwadratura Q jest rzędu r jeśli

- $R(f) = 0$ ($I_p(f) = Q(f)$) dla każdego wielomianu $f \in \Pi_{r-1}$,
- istnieje $\omega \in \Pi_r \setminus \Pi_{r-1}$ takie, że $R(\omega) \neq 0$ ($I_p(\omega) \neq Q(\omega)$).

Twierdzenie 1

Niech Q będzie kwadraturą o wartościach $Q(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$, $x_k \in [a, b]$, $f \in \mathcal{F}$. Wówczas rząd kwadratury Q nie przekracza $2n + 2$.



Zbieżność ciągu kwadratur

Rozpatrzmy ciąg kwadratur $\{Q_n\}$, $Q_n : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k^{(n)}) \quad (n = 0, 1, \dots).$$

$$\begin{array}{ccccccc} x_0^{(0)} & & & & A_0^{(0)} & & \\ x_0^{(1)} & x_1^{(1)} & & & A_0^{(1)} & A_1^{(1)} & \\ x_0^{(2)} & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & & A_0^{(2)} & A_1^{(2)} & A_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f) \quad \forall f \in C[a, b].$$



Zbieżność ciągu kwadratur

Zajmijmy się zbieżnością $\{Q_n\}$ do całek funkcji ciągłych.

Twierdzenie 2

$$\forall f \in C[a,b] \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f) \Leftrightarrow$$

- $\forall f \in \Pi \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f),$
- $\exists K > 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad \sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| \leq K.$

Twierdzenie 3

Jeżeli $A_k^{(n)} \geq 0$ ($k = 0, 1, \dots, n; n = 0, 1, \dots$), to następujące zdania są równoważne

- $\forall f \in C[a,b] \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f)$
- $\forall f \in \Pi \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f).$



Kwadratury interpolacyjne

Zakładamy, że dane są parami różne węzły $x_0, x_1, \dots, x_n$, $x_i \in [a, b]$ oraz funkcja $f \in \mathcal{F}$.

Interpolujemy funkcję f za pomocą wielomianu $L_n \in \Pi_n$

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k(x), \quad \lambda_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k) \omega'(x_k)},$$

gdzie $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$. Tak więc

$$f(x) = L_n(x) + r_n(x) \quad \text{dla każdego } x \in [a, b],$$

gdzie $r_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} \omega(x) f^{(n+1)}(\zeta)$ dla $f \in C^{n+1}[a, b]$.



Kwadratury interpolacyjne

Całkując f otrzymujemy

$$\begin{aligned}\int_a^b p(x)f(x)dx &= \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b p(x)\lambda_k(x)dx + \int_a^b p(x)r_n(x)dx \\ &= \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) + R_n(f) = I_p(f),\end{aligned}$$

$$A_k = \int_a^b p(x)\lambda_k(x)dx, \quad R_n(f) = \int_a^b p(x)r_n(x)dx.$$

Łatwo zauważyć, że jeśli $f \in \Pi_n$, to $R_n(f) = 0$. Stąd rząd Q_n jest co najmniej $n + 1$.

Lemat 1

Rząd ρ kwadratury interpolacyjnej spełnia nierówność

$$n + 1 \leq \rho \leq 2n + 2.$$

Twierdzenie 4

Kwadratura $Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ ma rząd co najmniej $n + 1$
 $\Leftrightarrow Q_n$ jest kwadraturą interpolacyjną.



Kwadratury Newtona-Cotesa

Definicja 3

Kwadraturami Newtona-Cotesa przybliżającymi $\int_a^b p(x)f(x)dx$ są nazywane kwadratury $Q_n(f) = I(L_n)$, gdzie L_n jest wielomianem Lagrange'a interpolującym funkcję f opartym na równoodległych węzłach. Zakłada się również, że waga $p \equiv 1$ w $[a, b]$.

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

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad x_k = a + kh, \quad k = 0, \dots, n \quad h = \frac{b-a}{n}.$$



Kwadratury Newtona-Cotesa

Współczynniki A_k kwadratury Newtona-Cotesa są postaci

$$\begin{aligned}
 A_k &= \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx = \left\{ \begin{array}{l} x = a + th \\ t \in [0, n] \\ dx = h dt \end{array} \right\} \\
 &= h \int_0^n \frac{\omega(a + th)}{h(t - k)\omega'(a + kh)} dt = \left\{ \begin{array}{l} \omega(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j) \\ \omega(a + th) = h^{n+1} \prod_{j=0}^n (t - j) \\ \omega'(x_k) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j) \\ \omega'(a + kh) = k!(n - k)!h^n(-1)^{n-k} \end{array} \right\} \\
 &= h \int_0^n \frac{h^{n+1} \prod_{j=0}^n (t - j)}{(t - k)hk!(n - k)!h^n(-1)^{n-k}} dt = \frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n - k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t - j) dt.
 \end{aligned}$$



Kwadratury Newtona-Cotesa

Twierdzenie 5

Reszta kwadratury Newtona-Cotesa wyraża się wzorem

$$R_n(f) = \begin{cases} \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x) dx & (n = 1, 3, 5, \dots \quad a < \zeta < b) \\ \frac{f^{(n+2)}(\zeta)}{(n+2)!} \int_a^b x \omega(x) dx & (n = 2, 4, 6, \dots \quad a < \zeta < b) \end{cases}$$

Jeżeli $f \in \Pi_{n+1}$, n parzyste, $R_n(f) = 0$.

Wniosek 1

Niech ρ oznacza rząd kwadratury Newtona-Cotesa, wówczas

$$\rho = \begin{cases} n+1 & (n = 1, 3, 5, \dots) \\ n+2 & (n = 2, 4, 6, \dots) \end{cases}$$



Kwadratury Newtona-Cotesa

$n = 1$ wzór trapezów $I(f) = Q_1(f) + R_1(f)$, $f \in C^2[a, b]$

$$Q_1(f) = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)), \quad R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\zeta) = -\frac{h^3}{12}f''(\zeta)$$

$$a < \zeta < b, \quad h = b - a.$$

$n = 2$ wzór Simpsona $I(f) = Q_2(f) + R_2(f)$, $f \in C^{(4)}[a, b]$

$$Q_2(f) = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f((a+b)/2) + f(b)),$$

$$R_2(f) = -\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{f^{(4)}(\zeta)}{90} = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\zeta),$$

$$a < \zeta < b, \quad h = \frac{b-a}{2}.$$



Kwadratury Newtona-Cotesa

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k^{(n)}) = (b-a) \sum_{k=0}^n B_k^{(n)} f(x_k^{(n)}),$$
$$x_k^{(n)} = a + kh_n, \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad h_n = \frac{b-a}{n}.$$
$$B_k^{(n)} = \frac{1}{b-a} A_k^{(n)}, \quad B_k^{(n)} = B_{n-k}^{(n)}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Niech $f \equiv 1$

$$Q_n(f) = Q_n(1) = (b-a) \sum_{k=0}^n B_k^{(n)} = I(f) = I(1) = b-a.$$

Stąd dla dowolnego n , suma $\sum_{k=0}^n B_k^{(n)} = 1$. Dla $n > 9$ niektóre współczynniki są ujemne. Zatem $\sum_{k=0}^n |B_k^{(n)}| > 1$.

Oznaczmy $\sigma_n = \sum_{k=0}^n |B_k^{(n)}|$. σ_n rośnie szybko. Np. $\sigma_{10} \approx 3.1$, $\sigma_{15} \approx 8.3$, $\sigma_{20} \approx 560$.



Kwadratury Newtona-Cotesa

Błąd bezwzględny obliczeń $Q_n(f)$ można oszacować następująco:

$$C2^{-t}\sigma_n, \quad \sigma_n \rightarrow \infty, \quad n \rightarrow \infty.$$

Wady kwadratur Newtona-Cotesa

- Dla $n > 10$ współczynniki $A_k^{(n)}$ mogą być ujemne. Wielkość $\sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| \rightarrow \infty$. Zatem nie jest spełnione założenie twierdzenia 2 (b). Mogą więc istnieć funkcje ciągłe, dla których kwadratury mogą być rozbieżne.
- Błędy zaokrągleń mogą zniekształcać wynik.

Powyższe wady można znacznie zniwelować dzieląc przedział całkowania na kilka mniejszych podprzedziałów i stosując w każdym z nich kwadratury z małym n .



Złożone kwadratury Newtona-Cotesa

Złożony wzór trapezów. Niech $f \in C^2[a, b]$, $x_k = a + kh$,
 $k = 0, 1, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k+1})) - \frac{h^3}{12} f''(\zeta_k) \right\}$$

$$= h \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k) - \frac{h^3}{12} \sum_{k=0}^{n-1} f''(\zeta_k) = T_n(f) + R_n^T(f)$$

$$\min_k f''(\zeta_k) \leq \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f''(\zeta_k) \leq \max_k f''(\zeta_k)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f''(\zeta_k) = f''(\zeta), \quad \zeta \in (a, b).$$



Złożone kwadratury Newtona-Cotesa

$$T_n(f) = h \sum_{k=0}^n {}'' f(x_k)$$

$$R_n^T(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{k=0}^{n-1} f''(\zeta_k) = -\frac{nh^3}{12} f''(\zeta), \quad \zeta \in (a, b).$$



Złożone kwadratury Newtona-Cotesa

Złożony wzór Simpsona. Niech $f \in C^4[a, b]$, $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$. m jest liczbą podziałów $2m = n$.

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) dx &= \sum_{k=0}^{m-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x) dx \\&= \sum_{k=0}^{m-1} \left\{ \frac{2h}{6} (f(x_{2k}) + 4f(x_{2k+1}) + f(x_{2k+2})) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\zeta_k) \right\} \\&= S_m(f) + R_m^s(f).\end{aligned}$$

$$S_m(f) = \frac{2h}{6} \sum_{k=0}^{m-1} (f(x_{2k}) + 4f(x_{2k+1}) + f(x_{2k+2}))$$

$$R_m^s(f) = -\frac{h^5}{90} \sum_{k=0}^{m-1} f^{(4)}(\zeta_k) = -\frac{mh^5}{90} f^{(4)}(\zeta), \quad \zeta \in (a, b).$$



Złożone kwadratury Newtona-Cotesa

W pewnych przypadkach korzystając z oszacowania reszty kwadratury można wyznaczyć liczbę podprzedziałów m , na które należy podzielić przedział całkowania, aby osiągnąć zadaną dokładność ϵ .

Jeżeli jest to niemożliwe lub oszacowanie jest zawyżone, wówczas należy obliczać wartości kolejnych kwadratur $Q_{m_1}(f)$, $Q_{m_2}(f)$, $Q_{m_3}(f)$, $\dots$. Obliczenia należy wykonywać aż spełniony będzie warunek

$$\frac{|Q_{m_k}(f) - Q_{m_{k-1}}(f)|}{|Q_{m_k}(f)|} < \epsilon.$$

