

# Metody numeryczne

## Wykład 6

Michał Łaskawski

19 maja 2016

## Całka oznaczona

Wyznaczenie wartości całki oznaczonej jest częstym zadaniem analizy numerycznej.

Obliczanie wartości całki oznaczonej realizowane jest na podstawie wzoru Newtona-Libnitza:

$$I = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) \quad (1)$$

gdzie,  $F(x)$  jest funkcją pierwotną  $f(x)$ :

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x) \quad (2)$$

### Uwaga:

Użycie wzoru (1) jest często kłopotliwe, wynika to z tego, iż wyznaczanie całek nieoznaczonych jest zadaniem trudnym.

Dodatkowo dla wielu funkcji  $F(x)$ , funkcja pierwotna  $f(x)$  nie wyraża się poprzez skończoną kombinację funkcji elementarnych.

Dlatego istnieje potrzeba numerycznego wyznaczania całek

## Funkcja interpolacyjna

Zależności według których realizuje się numeryczne całkowanie przybliżone, czyli inaczej **kwadratury**, uzyskuje się poprzez całkowanie funkcji zastępczej  $\phi(x)$  opisanej wielomianem interpolacyjnym zbudowanym na zbiorze  $n + 1$  węzłów interpolacji o współrzędnych  $x_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n$ . Ogólnie:

$$f(x) = \phi(x) + E(x) \quad (3)$$

gdzie,  $\phi(x)$  jest wielomianem interpolacyjnym stopnia  $n$ :

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^n h_i(x) f_i + \text{opcjonalne człony z pochodnymi} \quad (4)$$

$E$  jest błędem interpolacji.

## Funkcja interpolacyjna

Przybliżenie całki oznaczonej z funkcji  $f(x)$  w przedziale od  $a$  do  $b$  jest następujące:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n H_i f_i + E \quad (5)$$

gdzie:

$$H_i = \int_a^b h_i(x) dx \quad E = \int_a^b E(x) dx \quad (6)$$

**Uwaga:**

Parametry interpolacji należy tak dobrać aby człony z ewentualnymi pochodnymi (4) zanikały tożsamościowo.

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^n h_i(x) f_i + \text{opcjonalne człony z pochodnymi}$$

W ten sposób przy pomocy interpolacji Hermite'a, uzyskuje się kwadratury Gaussa.

Korzystając z wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a uzyskuje się kwadratury Newtona-Cotesa.

## Funkcja interpolacyjna

Jeżeli krańce przedziału całkowania są węzłami interpolacji (węzłami kwadratury), uzyskuje się **zamknięte kwadratury Newtona-Cotesa**. Są one najczęściej stosowane w praktyce.

Błąd całkowania  $E$  powinien być proporcjonalny do pochodnej rzędu  $(n + 1)$  funkcji podcałkowej w pewnym punkcie  $\xi$  należącym do przedziału całkowania.

W praktyce zamknięte kwadratury Newtona-Cotesa określone są przy pomocy wielomianów interpolacyjnych niskiego stopnia. Wynika to z następujących względów:

- ▶ prostoty obliczeń,
- ▶ trudności w oszacowaniu pochodnych wyższego rzędu,
- ▶ możliwymi oscylacjami Rungego, czyli dużymi błędami interpolacji na krańcach przedziału,
- ▶ możliwością osiągnięcia większej dokładności przy zastosowaniu kwadratur złożonych.

## Metoda prostokątów

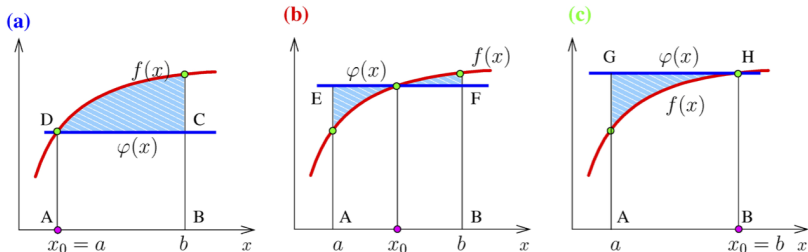
Najprostszym sposobem obliczenia całki oznaczonej z funkcji  $f(x)$  jest przybliżenie jej przy pomocy wielomianu:

$$\phi(x) = f(x_0) = \text{const} \quad (7)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b \phi(x) dx = \int_a^b f(x_0) dx = (b-a) f(x_0) \quad E = \frac{1}{2} (b-a)^2 f^{(1)}(\xi) \quad (8)$$

W zależności od położenia węzła  $x_0$  otrzymuje się wzory:

- ▶ lewych prostokątów:  $x_0 = a$  (rysunek a)
- ▶ środkowych prostokątów:  $x_0 = \frac{a+b}{2}$  (rysunek b)
- ▶ prawych prostokątów:  $x_0 = b$  (rysunek c)

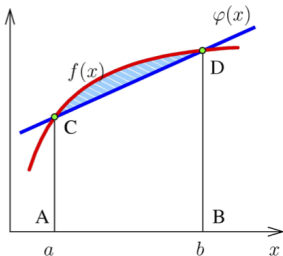


# Metoda trapezów

Jeżeli do interpolacji funkcji  $f(x)$  zastosowany zostanie liniowy wielomian interpolacyjny Lagrange'a, otrzyma się wzór kwadraturowy nazywany wzorem trapezów.

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b [f_0 L_0^1(x) + f_1 L_1^1(x)] dx = \int_a^b \left[ f(a) \frac{x-b}{a-b} + f(b) \frac{x-a}{b-a} \right] dx = \\ &= \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \quad E = -\frac{1}{12} (b-a)^3 f^{(2)}(\xi)\end{aligned}$$

(9)

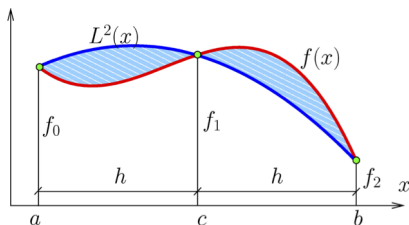


## Metoda parabol - Simpsona

Jeżeli do interpolacji funkcji  $f(x)$  zastosowany zostanie **kwadratowy wielomian interpolacyjny Lagrange'a**, otrzyma się wzór kwadraturowy nazywany **wzorem parabol**.

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b [f_0 L_0(x) + f_1 L_1(x) + f_2 L_2(x)] dx = \\ &= \int_a^b \left[ f(0) \frac{(x-c)(a-b)}{(a-b)(a-b)} + f(1) \frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} + f(2) \frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} \right] dx = \\ &= \frac{b-a}{6} (f_0 + 4f_1 + f_2) \quad E = -\frac{1}{90} \left( \frac{b-a}{2} \right)^5 f^{(4)}(\xi) \end{aligned}$$

(10)





## Kwadratury złożone

Kwadraturę złożoną uzyskuje się dzieląc przedział całkowania na podprzedziały, następnie do każdego z nich stosuje się kwadraturę niskiego rzędu.

Umożliwia to:

- ▶ uzyskanie większej dokładności niż przypadku kwadratury wyższego rzędu na całym przedziale
  - kwadratury Newtona-Cotesa dla rzędu  $n > 8$  ujawniają cechy narastającej niestabilności kwadratury interpolacyjnej,
- ▶ realizację algorytmu iteracyjnego, który może sukcesywnie zagęszczać podział
  - ponieważ najbardziej kosztowną częścią całkowania numerycznego jest obliczanie funkcji podcałkowej,
  - podział zagęszcza się w ten sposób aby węzły podziału rzadkiego były również węzłami nowego gęstsze podziału,
  - w ten sposób można użyć już obliczonych wartości funkcji,
  - łatwo jest to osiągnąć, gdy krańce przedziału należą do kwadratury, stąd wynika popularność zamkniętych wzorów Newtona-Cotesa.

## Redukcja błędu

Stosowanie kwadratur złożonych prowadzi do dodatkowego zmniejszenia błędu.

**Przykład:** Stosując wzór trapezów, błąd wynosi (9):

$$E = -\frac{1}{12} (b-a)^3 f^{(2)}(\xi) \quad \text{gdzie: } \xi \in [a, b]$$

Dzieląc przedział na pół i korzystając z addytywności całki:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^{\frac{a+b}{2}} f(x) dx + \int_{\frac{a+b}{2}}^b f(x) dx$$

Wartość całki obliczana jest po przedziałach  $\left[ a, \frac{a+b}{2} \right]$  i  $\left[ \frac{a+b}{2}, b \right]$ .

## Redukcja błędu

**Przykład - kontynuacja:** Błąd jest sumą błędów popełnionych w poprzednich przedziałach:

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{1}{12} \left( \frac{a+b}{2} - a \right)^3 f^{(2)}(\xi_1) - \frac{1}{12} \left( b - \frac{a+b}{2} \right)^3 f^{(2)}(\xi_2) = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{1}{12} (b-a)^3 \frac{f^{(2)}(\xi_1) + f^{(2)}(\xi_2)}{2}\end{aligned}$$

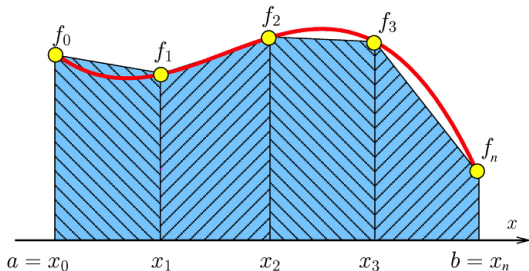
Korzystając z twierdzenia o wartości średniej zastosowanego do drugiej pochodnej funkcji podcałkowej, otrzymuje się:

$$\bar{E} = -\frac{1}{4} \frac{1}{12} (b-a)^3 f^{(2)}(\xi_3) \quad \text{gdzie: } \xi_3 \in [a, b] \quad (11)$$

Porównując równanie (11) z równaniem (9), widać że dwukrotne zagęszczenie przedziału spowodowało **czterokrotne** zmniejszenie **stałego czynnika** we wzorze na błąd metody trapezów. **Uwaga (11) nie jest czterokrotnie mniejsze do (9), bo:  $\xi \neq \xi_3$ .**

## Redukcja błędu

Dzieląc przedział na  $n$  podprzedziałów:



Rysunek: Złożona metoda trapezów

Całkowity błąd złożonej kwadratury trapezów jest maksymalnie sumą błędów popełnianych na poszczególnych przedziałach:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^n \left(-\frac{1}{12}\right) \left(\frac{b-a}{n}\right)^3 f^{(2)}(\xi_i) = -\frac{1}{12} \frac{(b-a)^3}{n^2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^{(2)}(\xi_i) = \\ &= -\frac{1}{n^2} \frac{(b-a)^3}{12} f^{(2)}(\xi) \end{aligned} \quad \text{twierdzenie o wartości średniej} \quad (12)$$

długość każdego z przedziałów wynosi:  $\frac{b-a}{n}$ .

## Złożony wzór trapezów

Numeryczna wartość całki po jednokrotnym zagęszczeniu przedziału i zastosowaniu wzoru trapezów:

$$I \approx \frac{1}{2} \frac{b-a}{2} (f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \frac{b-a}{2} (f_1 + f_2) = \frac{b-a}{2} \left( \frac{1}{2} f_0 + f_1 + \frac{1}{2} f_2 \right)$$

Dla podziału dla  $n$  podprzedziałów, ogólny wzór złożonej kwadratury trapezów:

$$I \approx h \left( \frac{1}{2} f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{n-2} + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n \right) = h \frac{f_0 + f_n}{2} \sum_{i=1}^{n-1} f_i \quad (13)$$

gdzie,  $h = \frac{b-a}{n}$  jest długością podprzedziału,  $n = 2^k$ ,  $k$  jest rzędem podziału.

### Uwaga:

Złożona kwadratura trapezów może zostać przedstawiona w postaci rekurencyjnej.

## Złożony wzór trapezów - postać rekurencyjna

Niech  $I_k$  będzie wartością całki obliczoną obliczoną w przedziale  $[a, b]$  o długości  $h = b - a$  przy pomocy metody trapezów dla  $2^{k-1}$  podprzedziałów.

Jeżeli  $k$  zwiększa się o 1 to liczba podprzedziałów podwaja się.

1 przedział,  $k = 1$

$$I_1 = [f(a) + f(b)] \frac{h}{2}$$

2 przedziały,  $k = 2$

$$I_2 = \left[ f(a) + 2f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(b) \right] \frac{h}{4} = \frac{1}{2}I_1 + f\left(a + \frac{h}{2}\right) \frac{h}{2}$$

4 przedziały,  $k = 3$

$$\begin{aligned} I_3 &= \left[ f(a) + 2f\left(a + \frac{h}{4}\right) + 2f\left(a + \frac{h}{2}\right) + 2f\left(a + \frac{3h}{4}\right) + f(b) \right] \frac{h}{4} = \\ &= \frac{1}{2}I_2 + \left[ f\left(a + \frac{h}{4}\right) + f\left(a + \frac{3h}{4}\right) \right] \frac{h}{4} \end{aligned}$$

## Złożony wzór trapezów - postać rekurencyjna

Dla  $k > 1$

$$I_k = \frac{1}{2}I_{k-1} + \frac{h}{2^{k-1}} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left(a + \frac{(2i-1)h}{2^{k-1}}\right) \quad k = 2, 3, \dots \quad (14)$$

Wyraz sumowania zawiera tylko wartości funkcji w węzłach powstałych przez podział istniejących już przedziałów (wyznaczonych w poprzednim kroku).

Powoduje to, że nakład obliczeniowy konieczny do uzyskania  $k$ -tego przybliżenia całki przy określonej liczbie podprzedziałów, jest taki sam jak dla wyrażenia (13).

Zaletą rekursywnej złożonej kwadratury trapezów jest możliwość kontrolowania zbieżności i zakończenia procesu obliczeniowego wtedy gdy osiągnięta zostanie zadana dokładność  $\epsilon$ .

## Złożony wzór trapezów - postać rekurencyjna

Procedurę zagęszczania przedziału należy zakończyć gdy kolejne przybliżenia całki różnią się od siebie o przyjętą ustaloną wartość  $\epsilon$ .

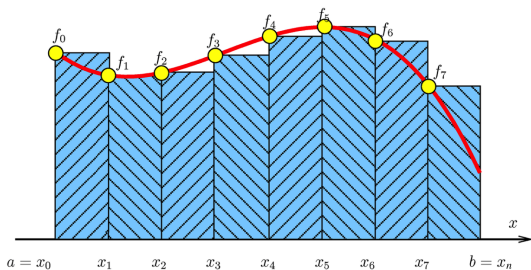
$$|I_{k+1} - I_k| < \epsilon \qquad \frac{|I_{k+1} - I_k|}{|I_k| + \zeta} < \epsilon \qquad (15)$$

gdzie,  $\zeta$  jest dodatkowym parametrem mającym na celu zapobieżenie dzielenia przez 0 gdy  $I_k = 0$ .



## Złożony wzór prostokątów

Wykonując analogiczne operacje jak dla złożonej kwadratury trapezów, dla całkowania metoda prostokątów uzyskuje się złożoną kwadraturę prostokątów.



Rysunek: Złożona metoda prostokątów lewych

Złożona metoda prostokątów lewych

$$I \approx h(f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-2} + f_{n-1}) = h \sum_{i=0}^{n-1} f_i \quad (16)$$

## Złożony wzór prostokątów

Złożona metoda prostokątów środkowych

$$I \approx h (f_{0,1} + f_{1,2} + f_{2,3} + \cdots + f_{n-2,n-1} + f_{n-1,n}) = h \sum_{i=0}^{n-1} f_{i,i+1} \quad (17)$$

gdzie,  $f_{i,i+1} = f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$ .

**Uwaga:**

Metoda wymaga obliczenia wartości funkcji pomiędzy węzłami (wymaga dodatkowej ekstrapolacji) przez co jest mało praktyczna.

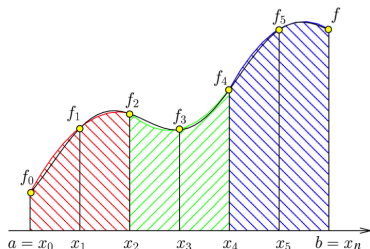
Złożona metoda prostokątów prawych

$$I \approx h (f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + f_n) = h \sum_{i=1}^n f_i \quad (18)$$

Błąd dla złożonej metody prostokątów:

$$E = \frac{1}{n^2} \frac{1}{24} (b-a)^3 f^{(2)}(\xi) \quad (19)$$

## Złożony wzór parabol - metoda Simpsona



Złożona metoda parabol

$$\begin{aligned} I &\approx \int_a^b f(x) dx = \\ &= \frac{h}{3} [y_0 + y_n + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2})] = \quad (20) \\ &= \frac{h}{3} \left[ y_0 + y_n + 4 \sum_{i=1}^{n-1} y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{n-2} y_{2i} \right] \end{aligned}$$

Błąd dla złożonej metody parabol:

$$E = \frac{1}{n^4} \frac{1}{180} (b-a)^5 f^{(4)}(\xi) \quad (21)$$

## Ekstrapolacja Richardsona

Zakładając, że wartość całki (1)

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

obliczana jest metodą trapezów w przedziale  $[a, b]$  podzielonym na  $n$  podprzedziałów i  $2n$  podprzedziałów. Otrzymuje się odpowiednio:

$$I = I_n - \frac{(b-a)^3}{12n^2} f^{(2)}(\xi_n) \quad (22)$$

$$I = I_{2n} - \frac{(b-a)^3}{12(2n)^2} f^{(2)}(\xi_{2n}) \quad (23)$$

gdzie,  $I_n$ ,  $I_{2n}$  są wynikami całkowania metodą trapezów, pozostałe części prawych stron równań (22) i (23) są błędami przybliżeń.

Zakładając, że  $f^{(2)}(\xi_n) = f^{(2)}(\xi_{2n})$  i przyrównując stronami równania (22) oraz (23) otrzymuje się:

$$I \approx \frac{4I_{2n} - I_n}{3} \quad (24)$$