Analiza numeryczna

Stanisław Lewanowicz

Styczeń 2008 r.

Całkowanie numeryczne

Definicje, twierdzenia, algorytmy

1 Pojęcia wstępne

Niech $\mathbb{F} \equiv \mathbb{F}[a,b]$ oznacza zbiór wszystkich funkcji całkowalnych w przedziale $[a,\, b]$. Funkcjonał liniowy I, odwzorowujący $\mathbb{F}$ w zbiór liczb rzeczywistych $\mathbf{R}$, określamy następująco:

$$I(f) := \int_a^b f(x)\,dx \qquad (f \in \mathbb{F}). \tag{1.1}$$

Funkcjonał $Q_n : \mathbb{F} \to \mathbf{R}$, postaci

$$Q_n(f) := \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{1.2}$$

gdzie $n \in \mathbf{N} \setminus \{0\}$. Q_n nazywamy ***kwadraturą liniową***, liczby $A_k \equiv A_k^{(n)} \quad (k = 0,1,\ldots,n)$ – ***współczynnikami (wagami)***, a liczby $x_k \equiv x_k^{(n)} \quad (k = 0,1,\ldots,n)$ – ***węzłami kwadratury*** Q_n. Całka (1.1) stanowi szczególny wypadek ogólniejszej całki $I_p : \mathbb{F} \to \mathbf{R}$, określonej wzorem

$$I_p(f) := \int_a^b p(x) f(x)\,dx \qquad (f \in \mathbb{F}), \tag{1.3}$$

gdzie ***funkcja wagowa*** p jest dodatnia w (a,b) i taka, że całki $\int_a^b x^k\, p(x)\,dx$ istnieją dla $k = 0,1,\ldots$.

Funkcjonał $R_n : \mathbb{F} \to \mathbf{R}$ określony wzorem

$$R_n(f) := I_p(f) - Q_n(f) \qquad (f \in \mathbb{F}) \tag{1.4}$$

nazywamy ***resztą (błędem) kwadratury*** Q_n.

Definicja 1.1 *Mówimy, że kwadratura Q_n jest* ***rzędu*** *r, jeśli*

(i) *$R_n(f) = 0$ dla każdego wielomianu $f \in \Pi_{r-1}$*
oraz

(ii) *istnieje taki wielomian $w \in \Pi_r \setminus \Pi_{r-1}$, że $R_n(w) \neq 0$.*

Lemat 1.2 *Rząd kwadratury* (1.2) *nie przekracza* $2n+2$.

2 Kwadratury interpolacyjne

Niech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ będą danymi (parami różnymi) punktami przedziału $[a,b]$. Mamy

$$f(x) = L_n(x) + r_n(x) \qquad (x \in [a,\, b]), \tag{2.1}$$

gdzie $L_n \in \Pi_n$ jest wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a,

$$(2.2)\qquad \begin{aligned} L_n(x) &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\lambda_k(x), \\ \lambda_k(x) &= \omega(x)/[\omega'(x_k)(x-x_k)] \qquad (k=0,1,\ldots,n), \\ \omega(x) &= (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n), \end{aligned}$$

a $r_n(x)$ – resztą wzoru interpolacyjnego,

$$r_n(x) = \omega(x) f^{(n+1)}(\xi_x)/(n+1)! \qquad (\xi_x \in (a,\, b)).$$

Ostatni wzór zachodzi przy założeniu, że $f \in C^{n+1}[a,\, b]$. Zastępując $f(x)$ w (1.3) prawą stroną (2.1), otrzymujemy

$$(2.3)\qquad I_p(f) = Q_n(f) + R_n(f),$$

gdzie

$$(2.4)\qquad Q_n(f) := \int_a^b p(x) L_n(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),$$

jest ***kwadraturą interpolacyjną***. Jej współczynniki wyrażają się wzorem

$$(2.5)\qquad A_k := I_p(\lambda_k) := \int_a^b p(x)\lambda_k(x)\, dx \qquad (k=0,1,\ldots,n),$$

a reszta – wzorem

$$R_n(f) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b p(x)\omega(x) f^{(n+1)}(\xi_x)\, dx.$$

Znaczenie kwadratur interpolacyjnych podkreśla następujące twierdzenie.

Lemat 2.1 *Kwadratura* (1.2) *ma rząd równy co najmniej* $n+1$ *wtedy i tylko wtedy, gdy jest ona kwadraturą interpolacyjną.*

3 Kwadratury Newtona-Cotesa

Kwadratury Newtona-Cotesa to kwadratury interpolacyjne z węzłami równoodległymi

$$x_k \equiv x_k^{(n)} := a + kh \qquad (k=0,1,\ldots,n; \quad h := (b-a)/n),$$

stosowane do obliczenia całki (1.3) dla $p \equiv 1$, czyli całki

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

Zatem

$$NC_n(f) := \sum_{k=0}^{n} A_k f(a+kh),$$

gdzie zgodnie z wzorem (2.5)

$$A_k \equiv A_k^{(n)} = I(\lambda_k) = \int_a^b \lambda_k(x)\, dx \qquad (k=0,1,\ldots,n).$$

Dowodzi się, że

$$(3.1)\qquad A_k = h(-1)^{n-k}\frac{1}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0,\, j\neq k}^{n} (t-j)\, dt \qquad (k=0,1,\ldots,n),$$

jak również, że reszta R_n kwadratury Newtona-Cotesa wyraża się wzorem

$$(3.2)\qquad R_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b \omega(x)\, dx \qquad (n=1,3,\ldots),$$

gdzie $\eta \in (a,b)$. Wynika stąd

Wniosek 3.1 *Kwadratura Newtona-Cotesa NC_n jest rzędu $n+2$, gdy n jest parzyste, i rzędu $n+1$, gdy n jest nieparzyste.*

W wypadku $n = 1$ kwadratura Newtona-Cotesa nosi nazwę ***wzoru trapezów***. Mamy $h = b - a$, $x_0 = a$, $x_1 = b$, $A_0 = A_1 = h/2$,

$$NC_1(f) := \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)], \tag{3.3}$$

$$R_1(f) = \frac{f''(\xi)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi). \tag{3.4}$$

Dla $n = 2$ otrzymujemy ***wzór Simpsona***:

$$h = (b-a)/2, \quad x_0 = a, \quad x_1 = (a+b)/2, \quad x_1 = b,$$
$$A_0 = A_2 = h/3, \quad A_1 = 4h/3,$$

$$NC_2(f) \;:=\; \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f((a+b)/2) + f(b)], \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned} R_2(f) &= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b x(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)\,dx \\ &= -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Zanim omówimy kwadratury wyższych rzędów, wprowadźmy oznaczenia

$$B_k^{(n)} := A_k^{(n)}/(b-a) \qquad (k = 0, 1, \ldots, n),$$

gdzie $A_k^{(n)}$są określone wzorem (3.1). Zatem

$$NC_n(f) := \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)} f(x_k^{(n)}) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} B_k^{(n)} f(x_k^{(n)}). \tag{3.7}$$

Zauważmy, że współczynniki $B_k^{(n)}$są liczbami wymiernymi i nie zależą od przedziału całkowania. Ponadto, podobnie jak $A_k^{(n)}$, mają własność symetrii:

$$B_k^{(n)} = B_{n-k}^{(n)} \qquad (k = 0, 1, \ldots, n).$$

3.1 Złożone wzory trapezów i Simpsona

Wykazuje się, że istnieją takie funkcje ciągłe, dla których ciąg kwadratur Newtona-Cotesa nie jest zbieżny do całki $\int_a^b f$. M.in. z tego powodu nie stosuje się w praktyce kwadratur Newtona-Cotesa wyższych rzędów. Na ogół bardziej celowy jest podział przedziału całkowania $[a, b]$ na n równych podprzedziałów $[t_k, t_{k+1}]$, wyznaczony przez punkty $t_k := a + kh$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$, gdzie $h := (b-a)/n$, a następnie zastosowanie w każdym z nich kwadratury Newtona-Cotesa niskiego rzędu. Otrzymujemy w ten sposób ***kwadratury złożone Newtona-Cotesa***, służące do obliczania całki w całym przedziale $[a, b]$.

Jeśli w każdym z podprzedziałów $[t_k, t_{k+1}]$ użyć wzoru trapezów (por. (3.3),

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(x)\,dx = \frac{h}{2}[f(t_k) + f(t_{k+1})] - \frac{h^3}{12}f''(\xi_k),$$

gdzie $\xi_k \in (t_k, t_{k+1})$, to otrzymamy

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(x)\,dx = T_n(f) + R_n^T(f),$$

gdzie T_n jest kwadraturą nazywaną ***złożonym wzorem trapezów***, określoną wzorem

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

a R_n^T jest resztą tej kwadratury, równą – jeśli $f \in C^2[a,b]$ –

$$R_n^T(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k) = -n\frac{h^3}{12}f''(\xi) = -(b-a)\frac{h^2}{12}f''(\xi)$$

dla pewnego $\xi \in (a,b)$.

Niech n będzie liczbą parzystą, $n = 2m$. Załóżmy, że $f \in C^4[a,b]$ i podzielmy przedział całkowania na m podprzedziałów $[t_k, t_{k+1}]$ o długości $2h$, a następnie zastosujmy do całki w każdym podprzedziale wzór Simpsona

$$\int_{t_{2k}}^{t_{2k+2}} f(x)\,dx = \frac{2h}{6}[f(t_{2k}) + 4f(t_{2k+1}) + f(t_{2k+2})] - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta_k),$$

gdzie $\eta_k \in (t_{2k}, t_{2k+2})$ (por. (3.5), (3.6)). Otrzymamy

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m-1}\int_{t_{2k}}^{t_{2k+2}} f(x)\,dx = S_n(f) + R_n^S(f),$$

gdzie $S_n(f)$ jest ***złożonym wzorem Simpsona***:

$$\begin{aligned} S_n(f) &:= \frac{h}{3}\{f(t_0) + 4f(t_1) + +2f(t_2) + 4f(t_3) + 2f(t_4) + \ldots + 2f(t_{2m-2}) + 4f(t_{2m-1}) + f(t_{2m})\} \\ &= \frac{h}{3}\{2\sum_{k=0}^{m}{}'' f(t_{2k}) + 4\sum_{k=1}^{m} f(t_{2k-1})\} = \frac{1}{3}\left(4T_n - T_m\right), \end{aligned}$$

a $R_n^S(f)$ – resztą tego wzoru:

$$R_n^S(f) := -\frac{h^5}{90}\sum_{k=0}^{m-1} f^{(4)}(\eta_k) = -m\frac{h^5}{90}f(\eta) = -(b-a)\frac{h^4}{180}f^{(4)}(\eta),$$

gdzie $\eta \in (a,b)$.

Ze wzorów na reszty wzorów złożonych trapezów i Simpsona wynika, że dla dostatecznie regularnych funkcji f całka $I(f)$ może być przybliżona dowolnie blisko za pomocą $T_n(f)$ lub $S_n(f)$, pod warunkiem, że weźmiemy dostatecznie małe h. Zachodzi również

Twierdzenie 3.2 *Dla dowolnej funkcji $f \in C[a,b]$ jest*

$$\lim_{n\to\infty} T_n(f) = \lim_{n\to\infty} S_n(f) = I(f).$$

3.2 Przyspieszanie zbieżności ciągu $\{T_n(f)\}$

Twierdzenie 3.3 (Euler-Maclaurin) *Jeśli funkcja f jest klasy $C^{2m+2}[a,\, b]$, to*

$$R_n^T(f) = \frac{c_1}{n^2} + \frac{c_2}{n^4} + \ldots + \frac{c_m}{n^{2m}} + \frac{d(n)}{n^{2m+2}}, \tag{3.8}$$

gdzie

$$c_k := \frac{(b-a)^{2k}B_{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)\right] \qquad (k = 1, 2, \ldots, m),$$

$d(n)$ jest ograniczoną funkcją zmiennej n: istnieje taka stała M, że dla dażdego n zachodzi nierówność $|d(n)| \le M$, a B_{2k} są tzw. liczbami Bernoulliego. (Np. $B_0 = 1$, $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, $B_6 = 1/42$, $B_8 = -1/30$, $B_{10} = 5/66$).

Wyrażenie (3.8) dla reszty $R_n^T(f)$ może posłużyć do *przyspieszenia zbieżności* ciągu $\{T_n(f)\}$, tj. do konstrukcji nowego ciągu $\{T'_n(f)\}$ szybciej zbieżnego do całki.

Zauważmy, że współczynniki c_k we wzorze (3.8) **nie zależą** od n, więc

$$R_{2n}(f) = \frac{c_1}{4n^2} + \frac{c_2}{16n^4} + \ldots + \frac{c_m}{4^m n^{2m}} + \frac{d(2n)}{4^{m+1}n^{2m+2}}. \tag{3.9}$$

Mnożąc równość $I_p(f) = T_{2n}(f) + R_{2n}^T(f)$ przez 4 i odejmując od niej $I_p(f) = T_n(f) + R_n^T(f)$, otrzymamy

$$I_p(f) = T'_n(f) + R'_n(f),$$

gdzie

$$\begin{aligned} T'_n(f) &:= \frac{4T_{2n}(f) - T_n(f)}{3}, \\ R'_n(f) &:= \frac{4R_{2n}^T(f) - R_n^T(f)}{3} = \frac{c'_1}{n^2} + \frac{c'_2}{n^4} + \ldots + \frac{c'_m}{n^{2m}} + \frac{d'(n)}{n^{2m+2}}, \end{aligned} \tag{3.10}$$

gdzie

$$c'_i := \frac{4^{1-i} - 1}{3} c_i \qquad (i \geq 1).$$

Zauważmy, że $c'_1 = 0$, więc reszta $R'_n(f)$ kwadratury $T'_n(f)$ jest rzędu n^{-4}!

Przykład 3.4 Niech $I = \int_1^3 \frac{dx}{x} = \ln 3 = 1.098612\ldots$. Stosując złożony wzór trapezów dla $n = 64$ i $n = 128$, dostajemy

$$T_{64} = \mathbf{1.0986}85, \qquad T_{128} = \mathbf{1.0986}30.$$

Wzór (3.10) daje

$$T_{64}^1 = \mathbf{1.098612}.$$

Uzyskaliśmy dwie dodatkowe cyfry dokładnego wyniku!

□

3.3 Tablica Romberga

Zauważmy, że pomysł opisany w poprzednim paragrafie można zastosować także do ciągu kwadratur $T_n^1(f)$, co prowadzi do kwadratur $T_n^2(f)$, których reszty są rzędu n^{-6} itd. itp. Ten pomysł wielokrotnego (iterowanego) przyspieszania realizuje ***metoda Romberga***. Niech będzie $n = 2^k$ $(k = 0, 1, \ldots)$ i niech

$$\begin{aligned} h_k &:= (b-a)/2^k, \\ x_i^{(k)} &:= a + ih_k \qquad (i = 0, 1, .., 2^k), \\ T_{0k} &:= T_{2^k}(f) = h_k \sum_{i=0}^{2^k}{}'' f(x_i^{(k)}). \end{aligned}$$

Niech

$$T_{mk} = \frac{4^m T_{m-1,k+1} - T_{m-1,k}}{4^m - 1} \qquad (k = 0, 1, \ldots;\ m = 1, 2, \ldots).$$

Tak więc, zaczynając od złożonych wzorów trapezów T_{00}, T_{01}, $T_{02}, \ldots$ budujemy trójkątną ***tablicę*** przybliżeń całki (zob. tablicę 1).

Postępując podobnie, jak w wypadku $m = 1$, można wykazać, że

1^o $T_{mk} = I - c_m h_k^{2m+2} - \ldots \qquad (k \geq 0;\ m \geq 1)$;

2^o $T_{mk} = \sum_{j=0}^{2^{m+k}} A_j^{(m)} f(x_j^{(m+k)}) \qquad (k \geq 0;\ m \geq 1)$ (elementy k-tego wiersza tablicy Romberga zawierają te same węzły, co T_{0k}), gdzie $A_j^{(m)} > 0 \quad (j = 0, 1, \ldots, 2^{m+k})$;

3^o dla każdej pary k, m T_{mk} jest sumą Riemanna;

4^o każdy z wzorów $T_{m0}, T_{m1}, \ldots$ jest kwadraturą rzędu $2m + 2$;

5^o (wniosek z 2^o, 3^o, 4^o i z twierdzenia o zbieżności ciągu kwadratur o dodatnich współczynnikach) niech $I = I(f)$, gdzie f jest dowolną funkcją ciągłą w $[a, b]$; wówczas

$$\begin{aligned} &\lim_{k\to\infty} T_{mk} = I \qquad (m = 1, 2, \ldots); \\ &\lim_{m\to\infty} T_{mk} = I \qquad (k = 0, 1, \ldots). \end{aligned}$$

Tabela 1: Tablica Romberga

$$
\begin{array}{llllll}
T_{00} & & & & & \\
T_{01} & T_{10} & & & & \\
T_{02} & T_{11} & T_{20} & & & \\
T_{03} & T_{12} & T_{21} & T_{30} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
T_{0m} & T_{1,m-1} & T_{2,m-2} & T_{3,m-3} & \dots & T_{m0} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots
\end{array}
$$

4 Kwadratury Gaussa

Wróćmy do obliczania całki

$$I_p(f) := \int_a^b p(x)f(x)\,dx \qquad (f \in \mathbb{F}) \tag{4.1}$$

za pomocą kwadratury

$$Q_n(f) := \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \tag{4.2}$$

Wiemy już, że rząd kwadratury (4.2) nie może być większy od $2n+2$ (por. lemat 2.1).

Niech $\{P_k\}$ będzie ciągiem wielomianów ortogonalnych w przedziale $[a,b]$ z wagą p. Kwadraturę interpolacyjną z węzłami będącymi zerami wielomianu P_{n+1} nazywamy ***kwadraturą Gaussa***; pokażemy, że jej rząd jest równy $2n+2$. Wobec znanych własności wielomianów ortogonalnych węzły kwadratury Gaussa są rzeczywiste, pojedyncze i leżą wewnątrz przedziału całkowania. Współczynniki A_k można wyznaczyć z wzoru

$$A_k = \int_a^b p(x)\lambda_k(x)\,dx \qquad (k = 0,1,\dots,n), \tag{4.3}$$

gdzie (por. (2.5))

$$\lambda_k(x) = \omega(x)/[\omega'(x_k)(x-x_k)], \tag{4.4}$$

$$\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n). \tag{4.5}$$

Zachodzi następujące

Twierdzenie 4.1 *Współczynniki kwadratury Gaussa wyrażają się wzorami*

$$A_k = \frac{c_{n+1}}{c_n} \cdot \frac{\displaystyle\int_a^b p(x)[P_n(x)]^2\,dx}{P'_{n+1}(x_k)P_n(x_k)} \qquad (k = 0,1,\dots,n), \tag{4.6}$$

gdzie $x_0, x_1, \dots, x_n$ są zerami wielomianu P_{n+1}, a c_k oznacza współczynnik wiodący wielomianu P_k $(k = 0,1,\dots)$.

Twierdzenie 4.2 *Współczynniki A_k $(k = 0,1,\dots,n)$ kwadratury Gaussa są dodatnie.*

Twierdzenie 4.3 *Jeśli $f \in C^{2n+2}[a,b]$, to reszta kwadratury Gaussa wyraża się wzorem*

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!c_{n+1}^2}\int_a^b p(x)[P_{n+1}(x)]^2\,dx. \tag{4.7}$$

Wniosek 4.4 *Rząd kwadratury Gaussa jest równy $2n+2$.*

Twierdzenie 4.5 *Dla każdej funkcji f ciągłej na odcinku $[a,b]$ ciąg kwadratur Gaussa $\{Q_n(f)\}$ jest zbieżny do całki $I_p(f)$.*

4.1 Kwadratura Gaussa-Legendre'a

Do obliczania całki

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

można użyć kwadratury Gaussa-Legendre'a G_n, określonej wzorem

$$G_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (n \geq 0),$$

gdzie węzły x_0, x_1, $\ldots$, x_n są zerami wielomianu Legendre'a $\bar{P}_{n+1}$, natomiast współczynniki A_k wyrażają się wzorem

$$A_k = \frac{\int_{-1}^{1} \bar{P}_{n+1}{}^{2}\,dx}{\bar{P}_n(x_k)\bar{P}'_{n+1}(x_k)} \qquad (k = 0, 1, \ldots , n).$$

Wiadomo, że kwadratura G_n jest dokładna dla dowolnego wielomianu stopnia $\leq 2n + 1$, tj.

$$\bigwedge_{f \in \Pi_{2n+1}} I(f) = G_n(f).$$

Węzły i współczynniki mają następującą własność symetrii:

$$x_{n-k} = -x_k, \qquad A_{n-k} = A_k \qquad (k = 0, 1, \ldots , n).$$

W tablicy 2 podano wartości liczbowe węzłów i współczynników dla $n \leq 3$.

Tabela 2: Współczynniki i węzły kwadratury Gaussa-Legendre'a

n	$\bar{P}_{n+1}$	k	$x_{n-k} = -x_k$	$A_{n-k} = A_k$
-1	1			
0	x	0	0	2
1	$x^2 - \frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} = 0.57735\ 02691\ 8963$	1
2	$x^3 - \frac{3}{5}x$	0	$\sqrt{\frac{3}{5}} = 0.77459\ 66692\ 4148$	$\frac{5}{9} = 0.55555\ 55555\ 5556$
		1	0	$\frac{8}{9} = 0.88888\ 88888\ 8889$
3	$x^4 - \frac{6}{7}c^2 + \frac{3}{35}$	0	$\sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}} =$ $= 0.86113\ 63115\ 9405$	$\frac{1}{2} - \frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{6}} =$ $= 0.34785\ 48451\ 3745$
		1	$\sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}} =$ $= 0.33998\ 10435\ 8486$	$\frac{1}{2} + \frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{6}} =$ $= 0.65214\ 51548\ 6255$