

Pracownia z analizy numerycznej

Sprawozdanie do zadania P.3.11

Jarosław Dzikowski 273233

Wrocław, 21 stycznia 2016

1 Uwagi techniczne

Program można uruchomić normalnie z wiersza poleceń. Wypisze on wartości całek, przybliżenia całek wyliczone przez metodę Romberga kończoną warunkiem podanym w treści zadania, oraz wartości wyliczone przez metodę Romberga wyliczającą K poziomów tablicy Romberga.

Oprócz tego program wypisze pełne tablice błędów dla pięciu badanych funkcji. Dla pierwszych trzech tablica będzie wymiaru 10×10 , natomiast dla ostatnich dwóch tablica będzie miała rozmiar 20×20 , co może być kłopotliwe do przeglądania.

Sprawozdanie należy kompilować z wiersza poleceń będąc wewnątrz katalogu doc. Do skompilowania sprawozdania wymagana jest obecność folderu „wykresy” z wykresami w formacie eps, które następnie będą zamieszczone w sprawozdaniu. Folder „wykresy” znajduje się w folderze „doc”.

2 Wstęp

W tym zadaniu zbadamy metodę Romberga całkowania numerycznego. Zbadamy jej zachowanie oraz porównamy jej rezultaty z innymi metodami.

3 Wprowadzenie

Zagadnienie całkowania nie jest nikomu obce. Często chcielibyśmy policzyć wartość jakiejś całki, lecz nie zawsze jest to takie proste. Funkcja może być zbyt trudna do scałkowania lub możemy chcieć scałkować wiele funkcji, których wzorów oraz przedziałów całkowania nie znamy z góry. Wtedy musimy skorzystać z jakiejś uniwersalnej metody obliczania przybliżonej wartości całki. Jedną z takich metod jest metoda Romberga.

3.1 Kwadratury liniowe

Zacznijmy od wprowadzenia pojęcia kwadratury. Niech $\mathbb{F} = \mathbb{F}[a, b]$ będzie zbiorem funkcji całkownych w przedziale $[a, b]$. Jeśli f jest ciągła w $[a, b]$, to $f \in \mathbb{F}$. Jeśli f jest funkcją ograniczoną i ma skończenie wiele punktów nieciągłości w $[a, b]$, to $f \in \mathbb{F}$. Całka $I : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ zapisuje się następująco

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

W przypadku całki z daną funkcją wagową p mamy

$$I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx$$

Oczywiście, z własności całki wiemy, że I spełnia następujące własności:

$$(1) I(f+g) = \int_a^b (f+g)(x)dx = \int_a^b f(x)+g(x)dx = \int_a^b f(x)dx + \int_a^b g(x)dx = I(f)+I(g)$$

$$(2) I(\alpha f) = \int_a^b \alpha f(x)dx = \alpha \int_a^b f(x)dx = \alpha I(f)$$

$$(3) I(0) = \int_a^b 0 dx = 0$$

Zatem $I : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ jest *funkcjonałem liniowym*.

Definicja 1 (Kwadratura liniowa). *Funkcjonał $Q_n : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ postaci*

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

gdzie $A_k \in \mathbb{R}$, oraz $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ są parami różnymi punktami, nazywamy kwadraturą liniową. A_k nazywamy współczynnikami kwadratury, natomiast x_k węzłami kwadratury.

Kwadratura jest zdefiniowana za pomocą A_k i x_k . Każda kwadratura Q_n jest w pewnym stopniu oddalona od całki.

Definicja 2 (Reszta kwadratury). *Resztą kwadratury Q_n nazywamy*

$$R_n(f) = I(f) - Q_n(f) \quad (2)$$

Niektóre kwadratury potrafią dawać dokładne wyniki całkowania dla wielomianów pewnego stopnia. Dlatego wprowadzono pojęcie rzędu kwadratury.

Definicja 3 (Rząd kwadratury). *Powiemy, że Q_n jest rzędu r , jeśli*

$$i) \forall q \in \Pi_{r-1} Q_n(q) = I(q)$$

$$ii) \exists q \in \Pi_r Q_n(q) \neq I(q)$$

Każda kwadratura ma swoje limity i nie potrafi dokładnie scałkować każdego wielomianu.

Twierdzenie 1 (Maksymalny rząd kwadratury). *Rząd kwadratury Q_n nie przekracza $2n + 2$.*

Dowód. Niech $w(x) = [(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)]^2 \in \Pi_{2n+2}$. Mamy

$$Q_n(w) = \sum_{k=0}^n A_k w(x_k) = 0 \neq I(w) = \int_a^b w(x) dx > 0$$

Podaliśmy przykład wielomianu stopnia $2n + 2$, dla którego kwadratura Q_n nie osiąga dokładnej wartości całki. \square

3.2 Kwadratury interpolacyjne

Jak już wiemy, kwadratury zależą od doboru współczynników A_k oraz węzłów x_k kwadratury. Co gdyby zamiast całkować funkcję f spróbować scałkować wielomian interpolujący tę funkcję? Ponieważ wielomian interpolujący jest swego rodzaju przybliżeniem f , liczymy na to, że całka z tego wielomianu będzie bliska całce z funkcji f .

Definicja 4 (Kwadratura interpolacyjna). *Kwadraturę interpolacyjną nazwiemy kwadraturę Q_n , taką że*

$$Q_n(f) = I(L_n),$$

gdzie L_n jest wielomianem interpolacyjnym stopnia $\leq n$ dla funkcji f .

Wiemy, czym jest kwadratura interpolacyjna. Niestety dalej nie znamy jej współczynników ani węzłów.

Twierdzenie 2 (Współczynniki oraz węzły kwadratury interpolacyjnej). *Niech L_n będzie n -tym wielomianem interpolacyjnym dla funkcji f wyrażającym się wzorem*

$$L_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k$$

Wtedy Q_n wyraża się wzorem

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

gdzie

$$A_k = \int_a^b \lambda_k(x) dx = \int_a^b \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} \right) dx$$

a x_k są węzłami interpolacji wielomianu L_n .

Dowód. Ponieważ $Q_n(f) = I(L_n)$, wiemy, że $Q_n(L_n) = I(L_n)$, więc

$$\begin{aligned} Q_n(L_n) &= I(L_n) = \int_a^b \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k(x) dx = \\ &= \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b \lambda_k(x) dx \end{aligned}$$

□

Twierdzenie 3. Q_n jest kwadraturą interpolacyjną wtedy i tylko wtedy, gdy rząd Q_n jest równy co najmniej $n + 1$.

Dowód. \Rightarrow :

$Q_n(f) = I(L_n[f])$. Jeśli $f \in \Pi_n$, to $f = L_n[f]$. Stąd mamy rząd przynajmniej $n + 1$.

\Leftarrow :

Niech A_k będą współczynnikami Q_n , a x_k węzłami Q_n i Q_n ma rząd $r \geq n + 1$. Zdefiniujemy λ_k w sposób następujący

$$\lambda_k = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} \in \Pi_n$$

Zatem $Q_n(\lambda_k) = I(\lambda_k)$. Weźmy dowolne f . $L_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k$ interpoluje f w węzłach kwadratury. $Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$. Całka z λ_k okazuje się być równa k -temu współczynnikowi kwadratury Q_n .

$$I(\lambda_k) = Q_n(\lambda_k) = \sum_{j=0}^n A_j \lambda_k(x_j) = A_k$$

Znając A_k możemy wstawić je do wzoru na $Q_n(f)$.

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) = \sum_{k=0}^n I_n(\lambda_k) f(x_k) = I(L_n[f])$$

Skoro $Q_n(f) = I(L_n[f])$, to Q_n jest kwadraturą interpolacyjną. □

3.3 Kwadratury Newtona-Cotesa

Kwadratury interpolacyjne, tak samo jak wielomiany interpolacyjne, zależą od doboru węzłów interpolacji. Kwadratury Newtona-Cotesa używają najprostszych węzłów - węzłów równoodległych.

Definicja 5 (Kwadratura Newtona-Cotesa). *Kwadraturę Newtona-Cotesa nazywamy kwadraturą interpolacyjną o węzłach równoodległych.*

$$Q_n^{NC}(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

gdzie $x_k = a + kh$, $h = \frac{b-a}{n}$, $A_k = \int_a^b \lambda_k(x) dx$.

Okazuje się, że dla kwadratur Newtona-Cotesa, współczynniki A_k da się zapisać nieco inaczej

Twierdzenie 4 (Współczynniki kwadratury Newtona-Cotesa). *Niech $h = \frac{b-a}{n}$ będzie odległością między sąsiednimi węzłami. Wtedy współczynniki A_k kwadratury Newtona-Cotesa Q_n^{NC} wyrażają się wzorem*

$$A_k = h \cdot (-1)^{n-k} \cdot \frac{1}{k!(n-k)!} \cdot \int_a^b \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)} \right) dt$$

Dowodzi się, że błąd kwadratur Newtona-Cotesa wyraża się następująco

$$R_n(f) = \begin{cases} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b p_{n+1}(x) dx & \text{dla } 2 \nmid n \\ \frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+1)!} \int_a^b x p_{n+1}(x) dx & \text{dla } 2|n \end{cases}$$

gdzie $p_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$.

Wniosek: Kwadratura Newtona-Cotesa Q_n^{NC} jest rzędu $\begin{cases} n+1 & \text{dla } 2 \nmid n \\ n+2 & \text{dla } 2|n \end{cases}$.

Najbardziej znaną kwadraturą Newtona-Cotesa jest ta dla $n=1$. Q_1^{NC} z węzłami $x_0=a, x_1=b$, $h=b-a$ nazywamy *wzorem trapezów*. Mamy $A_0=A_1=\frac{h}{2}$.

$$T(f) = Q_1^{NC}(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] \quad (3)$$

Za pomocą wzoru trapezów jesteśmy w stanie poprawnie scałkować każdą funkcję stałą oraz liniową. Błąd wzoru trapezów $R_1(f)$ jest równy

$$R_1(f) = \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b) dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$$

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

$$h = \frac{b-a}{2}, \quad x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b,$$

$$A_0 = A_2 = \frac{h}{3}, \quad A_1 = 4\frac{h}{3}$$

$$S(f) = Q_2^{NC}(f) = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)] \quad (4)$$

Rząd wzoru Simpsona wynosi 4, więc możemy poprawnie scałkować nawet wielomian trzeciego stopnia. Błąd wzoru Simpsona wynosi

$$R_2(f) = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b x \cdot (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b) dx =$$

$$= -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 f^{(4)}(\eta) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta)$$

Wykazuje się, że istnieją takie funkcje ciągłe, dla których ciąg kwadratur Newtona-Cotesa nie jest zbieżny do całki $\int_b^a f$. Między innymi 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 $t_k = a + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$), gdzie $h = \frac{b-a}{n}$, 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

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

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

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

gdzie \sum' oznacza sumę z pierwszym składnikiem podzielonym przez dwa, a sum'' oznacza sumę z pierwszym i ostatnim składnikiem podzielonym przez dwa.

R_n^T jest resztą tej kwadratury, równą

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

dla pewnego $\xi \in (a, b)$, pod warunkiem, że $f \in C^2[a, b]$.

Pokażemy, że złożony wzór trapezów przy $n \rightarrow \infty$ zbiega do wartości całki.

Twierdzenie 5 (Zbieżność złożonego wzoru trapezów). *Niech $T_n(f)$ będzie wartością złożonego wzoru trapezów dla funkcji f w przedziale całkowania $[a, b]$. Wtedy zachodzi*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n(f) = \int_a^b f(x) dx$$

Dowód. Niech s_n będzie dolną sumą częściową całkowania, a S_n będzie górną sumą częściową całkowania. Przedział całkowania dzielimy na n przedziałów

długości $\frac{b-a}{n}$.

$$s_n = \sum_{i=0}^{n-1} h \cdot \min_{x \in [a+ih, a+(i+1)h]} f(x) \quad S_n = \sum_{i=0}^{n-1} h \cdot \max_{x \in [a+ih, a+(i+1)h]} f(x)$$

Oczywiście złożony wzór trapezów $T_n(f)$ wynosi

$$T_n(f) = \sum_{i=0}^{n-1} h \left(\frac{f(a+ih) + f(a+(i+1)h)}{2} \right)$$

Zatem możemy oszacować $T_n(f)$ używając sum częściowych

$$\sum_{i=0}^{n-1} h \cdot \min_{x \in [a+ih, a+(i+1)h]} f(x) \leq \sum_{i=0}^{n-1} h \left(\frac{f(a+ih) + f(a+(i+1)h)}{2} \right) \leq \sum_{i=0}^{n-1} h \cdot \max_{x \in [a+ih, a+(i+1)h]} f(x)$$

Następnie ponieważ $\lim_{n \rightarrow \infty} s_n = \int_a^b f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n$, to z reguły trzech ciągów otrzymujemy $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n(f) = \int_a^b f(x) dx$. \square

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 $\eta_k \in (t_{2k}, t_{2k+2})$. W efekcie otrzymujemy

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

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

$$\begin{aligned} S_n(f) &= \frac{h}{3} [f(t_0) + 4f(t_1) + 2f(t_2) + 4f(t_3) + 2f(t_4) + \dots + 2f(t_{2m-2}) + 4f(t_{2m-1}) + f(t_{2m})] = \\ &= \frac{h}{3} [2 \sum_{k=0}^m f(t_{2k}) + 4 \sum_{k=1}^m f(t_{2k-1})], \end{aligned}$$

a $R_n^S(f)$ jest resztą tego wzoru

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

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

Ze wzorów na reszty złożonych wzorów 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 zatem

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

Dowód jest analogiczny do dowodu Twierdzenie 5: ograniczamy złożoną kwadraturę przez sumy częściowe dolne i górne całkowania.

Problemem dla kwadratur Newtona-Cotesa są funkcje, dla których przedział całkowania nie zawiera się w dziedzinie funkcji. Przykładem jest następująca całka $\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$. Ponieważ w punktach $x = -1$ oraz $x = 1$ funkcja jest nieokreślona, nie możemy zastosować kwadratur Newtona-Cotesa.

4 Metoda Romberga

W tej sekcji posłużymy się poznanymi już złożonymi kwadraturami Newtona-Cotesa do wyprowadzenia metody Romberga całkowania numerycznego.

4.1 Twierdzenie Eulera - Maclaurina

Oznaczmy przez B_k k -tą liczbę Bernoulliego. Przypomnijmy:

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n$$

Definicja 6 (Twierdzenie Eulera - Maclaurina). *Niech $f \in C^{2m+2}[a, b]$. Wtedy reszta złożonego wzoru trapezów wyraża się wzorem*

$$R_n^T(f) = \frac{c_1}{n^2} + \frac{c_2}{n^4} + \frac{c_3}{n^6} + \dots + \frac{c_m}{n^{2m}} + \frac{d(n)}{n^{2m+2}} \quad (n \rightarrow \infty), \quad (5)$$

gdzie $d(n)$ jest funkcją ograniczoną, tzn. $\exists_M \forall_n |d(n)| < M$ oraz

$$c_k = \frac{(b-a)^{2k}}{(2k)!} B_{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)]$$

Sprawdźmy na jakimś przykładzie, jak bardzo potrafimy przyspieszyć zbieżność metody trapezów. Niech $f(x) = \frac{1}{x}$, $a = 1$, $b = 3$.

$$I(f) = \int_a^b \frac{1}{x} dx = \ln 3 \approx 1.098612$$

Teraz policzmy tę samą całkę złożoną metodą trapezów dzieląc przedział całkowania na 64 podprzedziały. Wydawałoby się intuicyjne, że jeśli podzielimy przedział całkowania na dwa razy więcej przedziałów, to uzyskamy dużo lepszy wynik. Niestety okazuje się, że tak nie jest.

$$T_{64} = \mathbf{1.098685} \quad T_{128} = \mathbf{1.098630}$$

Złożona metoda trapezów dla podwojonej liczby przedziałów nie dała większej liczby cyfr dokładnych. Spójrzmy na błąd złożonej metody trapezów przy podziale na n przedziałów

$$R_n^T(f) = \frac{c_1}{n^2} + \frac{c_2}{n^4} + \dots + \frac{d(n)}{n^{2m+2}} \quad R_n^T = I - T_n$$

A następnie na błąd przy podziale na $2n$ przedziałów

$$R_{2n}^T(f) = \frac{c_1}{4n^2} + \frac{c_2}{16n^4} + \dots \quad R_{2n}^T = I - T_{2n}$$

Spróbujmy usunąć $\frac{c_1}{n^2}$ - najbardziej znaczący ze składników reszty $R_n^T(f)$

$$4R_{2n}^T(f) - R_n^T(f) = -\frac{3}{4}c_2\frac{1}{n^4} - \frac{15}{16}c_3\frac{1}{n^{16}} - \dots \quad 4R_{2n}^T - R_n^T = 3I - (4T_{2n} - T_n)$$

Zatem dla

$$T'_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{3}$$

zachodzi

$$R'_n = I - T'_n = -\frac{c_2}{4n^4} - \frac{5}{16n^6} + \dots$$

Sprawdźmy teraz, jaki efekt otrzymamy w porównaniu do wcześniej wyliczonych T_{64} i T_{128} .

$$T'_{64} = \frac{4T_{128} - T_{64}}{3} = \mathbf{1.098612\dots}$$

Widać, że zwiększyliśmy liczbę cyfr dokładnych.

4.2 Tablica Romberga

Skoro udało nam się wyeliminować najbardziej znaczący składnik błędu złożonego wzoru trapezów R_n^T , to dlaczego mielibyśmy zatrzymać się w tym miejscu? W analogiczny sposób jak poprzednio możemy usunąć kolejny najbardziej znaczący składnik reszty: $\frac{1}{n^4}$. Następnie możemy usuwać kolejne najbardziej znaczące składniki. W ten właśnie sposób działa metoda Romberga.

W metodzie tej konstruujemy trójkątną tablicę kolejnych „przyspieszeń” złożonego wzoru trapezów. Niech

$$T_{0,k} = T_{2^k}$$

Pierwsza kolumna tablicy wypełniona jest złożonymi wzorami trapezów dla podziału przedziału całkowania na 2^k równych części. Niech $h_k = \frac{b-a}{2^k}$ oznacza długość podprzedziału.

Kolejne kolumny tablicy konstruujemy poznaną przez nas metodą:

$$T_{m,k} = \frac{4^m T_{m-1,k+1} - T_{m-1,k}}{4^m - 1} \quad (6)$$

W efekcie otrzymujemy następującą tablicę:

$T_{0,0}$					
$T_{0,1}$	$T_{1,0}$				
$T_{0,2}$	$T_{1,1}$	$T_{2,0}$			
$T_{0,3}$	$T_{1,2}$	$T_{2,1}$	$T_{3,0}$		
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	
$T_{0,k}$	$T_{1,k-1}$	$T_{2,k-2}$	$T_{3,k-3}$	\dots	$T_{k,0}$

Tablica 1: Tablica Romberga.

Twierdzenie 6 (Druga kolumna tablicy Romberga). *W drugiej kolumnie tablicy Romberga znajdują się złożone wzory Simpsona dla $n = 2^i$, ($i = 0, 1, \dots$), tj.*

$$T_{1,k} = S_{2^{k+1}}$$

Dowód. Niech $n = 2m$. Rozwińmy wzór na S_n .

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

Widzimy, że otrzymany wzór jest taki sam jak wzór na drugą kolumnę w tablicy Romberga. Stąd

$$S_{2^{k+1}} = \frac{4T_{2^{k+1}} - T_{2^k}}{3} = \frac{4T_{0,k+1} - T_{0,k}}{3} = T_{1,k}$$

□

Twierdzenie 7 (Zbieżność metody Romberga). *Niech $T_{i,j}$ będą wyrazami tablicy Romberga. Wtedy zachodzi*

$$\lim_{m \rightarrow \infty} T_{m,0} = \int_a^b f(x) dx$$

Dowód. Dowód analogiczny do dowodu Twierdzenie 5. Zawsze możemy ograniczyć $T_{i,j}$ przez sumy częściowe całkowania dolną oraz górną. Następnie z twierdzenia o trzech ciągach pokazujemy, że $\lim_{n \rightarrow \infty} T_{n,0} = \int_a^b f(x) dx$.

Ograniczenie przez sumy częściowe całkowania można udowodnić indukcyjnie

1. $m = 0$

Dla $m = 0$ mamy do czynienia ze złożonym wzorem trapezów. Zbieżność ta została udowodniona wcześniej.

2. Założmy indukcyjnie, że dla $m \geq 0$ teza zachodziła, tj.

$$s_{m,k} \leq T_{m,k} \leq S_{m,k},$$

gdzie $s_{m,k}$ oraz $S_{m,k}$ są odpowiednio dolną oraz górną sumą częściową całkowania. Pokażemy, że dla $m + 1$ $T_{m+1,k}$ też da się ograniczyć przez sumy częściowe. Z rekurencyjnej zależności wzoru Romberga mamy

$$T_{m+1,k} = \frac{4^{m+1}T_{m,k+1} - T_{m,k}}{4^{m+1} - 1}$$

Na mocy założenia indukcyjnego zachodzą dwie nierówności

$$s_{m,k+1} \leq T_{m,k+1} \leq S_{m,k+1} \quad s_{m,k} \leq T_{m,k} \leq S_{m,k}$$

Zatem zachodzi następująca nierówność

$$4^{m+1}s_{m,k+1} - s_{m,k} \leq 4^{m+1}T_{m,k+1} - T_{m,k} \leq 4^{m+1}S_{m,k+1} - S_{m,k}$$

Ponieważ $s_{m,k} \leq s_{m,k+1}$ oraz $S_{m,k+1} \leq S_{m,k}$ mamy

$$(4^{m+1} - 1)s_{m,k} \leq 4^{m+1}T_{m,k+1} - T_{m,k} \leq (4^{m+1} - 1)S_{m,k}$$

Dzieląc obustronnie przez $(4^{m+1} - 1)$ otrzymujemy

$$s_{m,k} \leq \frac{4^{m+1}T_{m,k+1} - T_{m,k}}{4^{m+1} - 1} \leq S_{m,k}$$

Otrzymujemy zatem tezę

$$s_{m+1,k} = s_{m,k} \leq T_{m+1,k} \leq S_{m,k} = S_{m+1,k}$$

□

Przy obliczaniu pierwszej kolumny, czyli złożonych wzorów trapezów dla $n = 2^i$ możemy wykonać małą optymalizację, która pozwoli nam policzyć wszystkie $T_{0,0}, T_{0,1}, \dots, T_{0,k}$ czyli de facto T_1, T_2, \dots, T_{2^k} dodając wartość funkcji całkowanej w każdym z 2^k węzłów tylko jeden raz. Niech $h_i = \frac{b-a}{2^i}$.

$$T_{2^{i+1}} = \frac{1}{2}T_{2^i} + \frac{h_i}{2} \sum_{k=1}^{2^i} f\left(a + kh_i - \frac{h_i}{2}\right)$$

W załączonym programie pierwsza kolumna tablicy Romberga obliczana jest właśnie w taki sposób.

Należy wspomnieć, że ponieważ w metodzie Romberga wykorzystujemy kwadratury dla węzłów równoodległych, nie możemy scałkować funkcji, dla których przedział całkowania nie zawiera się w ich dziedzinach.

5 Doświadczenia

Przejdźmy teraz do prezentacji wyników doświadczeń. Zbadamy działanie metody Romberga na pięciu funkcjach. Tak jak polecono w zadaniu, liczenie kolejnych wierszy tablicy Romberga przerwiemy w momencie, gdy dla pewnego $K > 0$

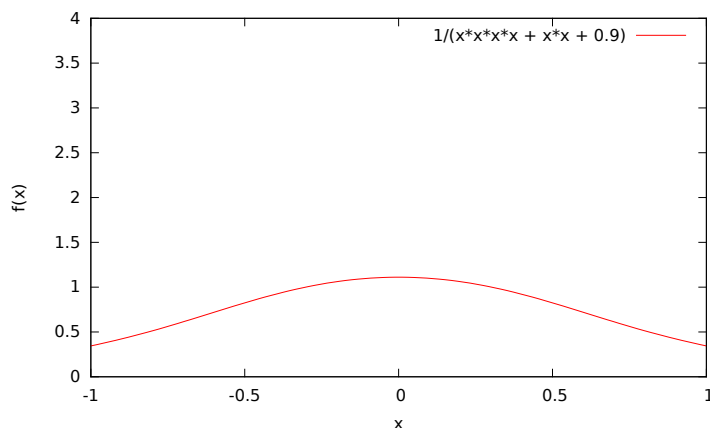
$$|T_{K,0} - T_{K-1,0}| < \epsilon |T_{K,0}|$$

gdzie w doświadczeniach $\epsilon = 10^{-9}$.

Dodatkowo policzymy pełną tablicę Romberga oraz przedstawimy pełną tablicę błędów. Dla każdej funkcji obliczono wartość całki za pomocą wbudowanej w Julii funkcji `quadgk()`, która oblicza całkę używając kwadratur Gaussa-Konroda.

Należy zaznaczyć, że wartości przedstawione w tablicach błędów są bardzo mocno zaokrąglone. W przeciwnym wypadku tablice byłyby zbyt szerokie i nie zmieściłyby się w sprawozdaniu. Jedyną ważną informacją w tablicach błędów, to rząd błędu.

$$1. \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{x^4+x^2+0.9}dx \approx 1.5822329637296728$$



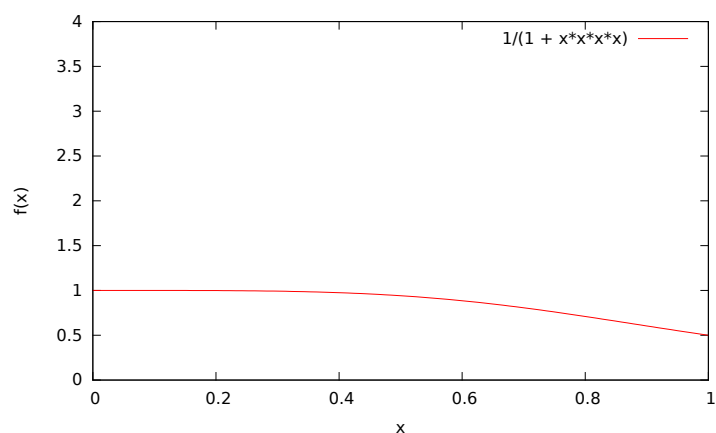
Rysunek 1: $f(x) = \frac{1}{x^4+x^2+0.9}$

Metoda Romberga dla tej całki spełniła warunki końcowe już po wyliczeniu kolumny numer 7 oraz zwróciła 1.5822329637296089. Tak prezentuje się tablica błędów względnych.

$$2. \int_a^b f(x)dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x^4}dx \approx 0.866972987339911$$

Lp.	0	1	2	...	8	9
0	0.564125392					
1	0.079820272	0.081614767				
2	0.018658028	0.001729386	0.00359630			
3	0.004692614	$3.74772453e-5$	0.00015526	...		
...		
8	$4.5868371e-6$	$1.3418809e-11$	$4.518826e-14$...	$4.2100868e-16$	
9	$1.1467099e-6$	$8.38228e-13$	$4.210086e-16$...	$2.8067245e-16$	$2.8067245e-16$

Tablica 2: Tablica błędów względnych metody Romberga dla pierwszej całki.



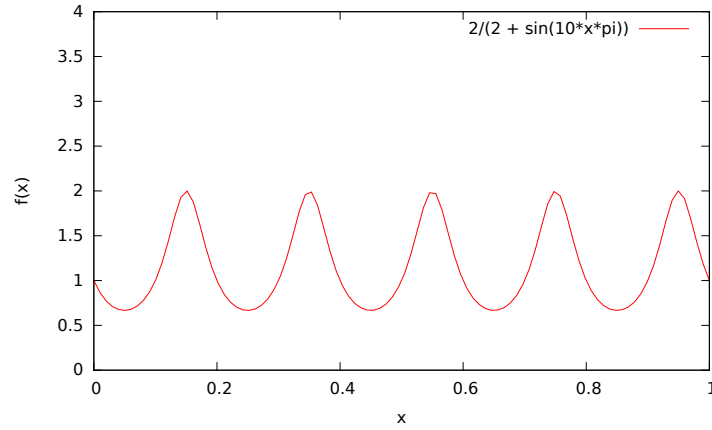
Rysunek 2: $f(x) = \frac{1}{1+x^4}$

Dla tej całki, metoda Romberga kończy działanie po obliczeniu kolumny nr 6. Otrzymano przybliżenie całki $\int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx \approx 0.8669729873400975$.

Lp.	0	1	2	...	8	9
0	0.1349211440					
1	0.0246659957	0.01208572032				
2	0.0060447709	0.00016230402	0.0006325903			
3	0.0015042187	$9.298617849e-6$	$9.017423310e-7$...		
...		
8	$1.466675102e-6$	$8.951852211e-12$	0.0	...	0.0	
9	$3.666683557e-7$	$5.599949891e-13$	$5.12229580e-16$...	$5.12229580e-16$	$5.1222958e-16$

Tablica 3: Tablica błędów względnych metody Romberga dla drugiej całki.

$$3. \int_a^b f(x) dx = \int_0^1 \frac{2}{2+\sin(10\pi x)} dx \approx 1.1547005383792308$$



Rysunek 3: $f(x) = \frac{2}{2+\sin(10\pi x)}$

W przypadku tej całki, metoda Romberga szybko kończy działanie (po wyliczeniu kolumny nr 1) i zwraca niepoprawny wynik 0.9999999999999999. Metoda Romberga wyliczająca 10 poziomów tablicy Romberga otrzymuje już dokładny wynik 1.1547005383792495. Tablica błędów wygląda następująco

Lp.	0	1	2	...	8	9
0	0.1339745962					
1	0.1339745962	0.1339745962				
2	0.0103629710	0.058475493	0.071305499			
3	5.31448463e-5	0.0033834638	0.007507394	...		
...		
8	1.78835529e-14	1.76912567e-14	1.76912567e-14	...	7.86491738e-14	
9	1.78835529e-14	1.78835529e-14	1.78835529e-14	...	1.78835529e-14	1.78835529e-14

Tablica 4: Tablica błędów względnych metody Romberga dla trzeciej całki.

$$4. \int_a^b f(x)dx = \int_{-200}^{200} \cos\left(\frac{200}{1+x^2}\right)dx \approx 364.56214839923837$$

Dla tej funkcji zbyt trudno narysować wykres, ponieważ w przedziale $[-1, 1]$ cosinus „wariuje”. Natomiast przy $x \rightarrow \pm\infty$ funkcja f dąży do jedynki. Metoda Romberga dla początkowych numerów kolumn odbiega od poprawnego wyniku, lecz później dogania dokładną wartość całki zwracając $\int_{-200}^{200} \cos\left(\frac{200}{1+x^2}\right)dx \approx 364.5621483992415$.

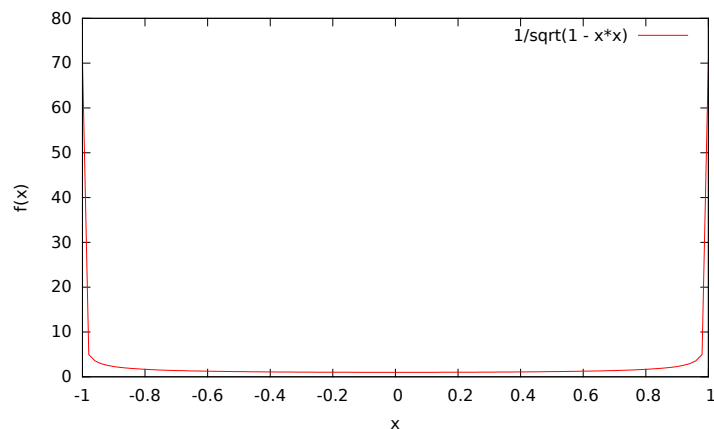
Aby obliczyć satysfakcjonujący wynik, metoda Romberga potrzebuje policzyć aż wiersz numer 19. Jeśli spojrzeć na pełną tablicę błędów, można zauważyć, że w tych samych wierszach błędy mogą się zwiększać. Na przy-

kład w wierszu nr 18 metoda trapezów dała przybliżenie całki o błędzie rzędu 10^{-15} . Natomiast na końcu, w kolumnie 18, mamy błąd rzędu 10^{-12} .

Lp.	0	1	2	...	18	19
0	0.0971928984					
1	0.1841307814	0.2779053413				
2	0.0435717793	0.0032812213	0.022026992			
3	0.0259299849	0.0490972396	0.052151640	...		
...		
18	5.613207756e-15	5.769130193e-15	5.92505263e-15	...	1.13355612e-12	
19	7.484277008e-15	8.263889196e-15	8.41981163e-15	...	8.26388919e-15	8.26388919e-15

Tablica 5: Tablica błędów względnych metody Romberga dla czwartej całki.

5. $\int_a^b f(x)dx = \int_{-0.9999}^{0.9999} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx 3.113308146635046$



Rysunek 4: $f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

Metoda Romberga nie jest w stanie obliczyć całki z tej samej funkcji dla przedziału całkowania $[-1, 1]$, ponieważ funkcja nie jest określona dla $x = \pm 1$.

Metoda Romberga zwraca $\int_{-0.9999}^{0.9999} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx 3.113308146650636$. Także i dla tej funkcji, aby osiągnąć warunki końcowe i zakończyć algorytm, potrzebne jest wyliczenie kolumny numer 18 w tablicy Romberga.

Lp.	0	1	2	...	18	19
0	44.42137904					
1	22.03185914	14.56868584				
2	10.88677194	7.171742881	6.67861335			
3	5.351986353	3.507057822	3.26274548	...		
...		
18	2.7533692e-7	9.978023e-11	7.435939e-13	...	5.0075980e-12	
19	2.7533692e-7	9.978023e-11	7.435939e-13	...	9.7139357e-14	9.7139357e-14

Tablica 6: Tablica błędów względnych metody Romberga dla piątej całki.

6 Wnioski

Jak się okazuje, metoda Romberga faktycznie bardzo szybko przyspiesza zbieżność złożonego wzoru Trapezów. Mogliśmy to zaobserwować w przypadku każdej funkcji.

Jednakże, istnieją funkcje, dla których metoda Romberga zwraca niepoprawny wynik. Było tak w przypadku $\int_0^1 \frac{2}{2+\sin(10\pi x)} dx$. Metoda Romberga wyliczała tylko pierwsze dwie kolumny, zauważyła, że zachodzi warunek końcowy i zakończyła działanie zwracając niepoprawny wynik. Powodem, dla którego metoda zakończyła się, jest to, że metoda trapezów dla jednego przedziału zwraca wynik równy 1

$$f(0) = f(1) = 1 \implies h \frac{f(0) + f(1)}{2} = 1$$

Natomiast jeśli popatrzyć się na metodę Simpsona dzielącą przedział całkowania na 2 części, to

$$f(0) = f(1) = f\left(\frac{1}{2}\right) = 1 \implies \frac{h}{2} \frac{f(0) + 4f\left(\frac{1}{2}\right) + f(1)}{3} = 1$$

Nic dziwnego, że metoda Romberga uznaje, że osiągnięto stabilny wynik.

Dla funkcji o „skomplikowanym” wykresie jak $\frac{2}{2+\sin(10\pi x)}$ kwadratury dla małych n będą zwracać wynik sporo odbiegający od rzeczywistego. Mając „pecha”, kwadratury Newtona-Cotesa wybiorą takie węzły równoodległe, że metoda Romberga da podobny wynik dla pierwszego wiersza danej kolumny, jak dla pierwszego wiersza kolumny poprzedniej.

To w szczególności jest prawdziwe dla funkcji okresowych. Można dobrać takie okresowe funkcje, które całkowicie zepsują nam pierwsze kolumny tablicy Romberga. Przykładem jest chociażby trzecia badana funkcja, chociaż możnaby ją „usprawnić” zwiększając jej okresowość chociażby do $f_2(x) = \frac{2}{2+\sin(2^{20}\pi x)}$. Można sobie tylko wyobrazić, jak bardzo złożony wzór trapezów dla $n = 2^k$ będzie się mylił trafiając aż do $n = 2^{20}$ w punkty o wartości 1. To samo będzie zachodziło dla złożonego wzoru Simpsona.

Inną kwestią, na którą wartoby było zwrócić uwagę jest związek długości przedziału całkowania do liczby poziomów tablicy Romberga, którą algorytm potrzebuje wyliczyć, by znaleźć satysfakcjonujące przybliżenie całki. Wydaje się naturalne, że im dłuższy przedział całkowania lub im bardziej skomplikowana funkcja, tym powinniśmy używać większej liczby węzłów w kwadraturze. Czwarta funkcja potwierdza to, mamy przedział całkowania $[-200, 200]$, aby wyliczyć odpowiednie przybliżenie całki, musimy wyliczyć dwadzieścia poziomów tablicy Romberga.

Natomiast piąta rozpatrywana całka pokazuje, że nie zawsze krótki przedział całkowania i stosunkowo „prosta” funkcja pozwolą nam na wyliczenie zaledwie kilku poziomów tablicy Romberga. Funkcja $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ dla $x \rightarrow \pm 1$ dąży do nieskończoności. Jednak nasze przedziały całkowania $[-0.9999, 0.9999]$ nie znajdują się aż tak blisko ± 1 , ani funkcja ta nie wydaje się specjalnie skomplikowana. Mimo to musimy policzyć aż dziewiętnaście poziomów tablicy Romberga.

Literatura

- [1] Dahlquist, G., Björck, A. *Numerical Methods in Scientific Computing, Volume I*, Society for Industrial and Applied Mathematics (September 4, 2008), 547-550.
- [2] Kincaid, D. R., Cheney, E. W. *Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing* American Mathematical Society, 2002.