Numerikus integrálás

1. Romberg integráció

Legyen $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ egy integrálható függvény
-$\lambda_k f, k = \overline{0, m}$ az f függvényre vonatkozó adott információk
-$w : [a, b] \to \mathbb{R}$ súlyfüggvény

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^{m} A_i \lambda_i(f) + R(f) \tag{1}$$

*numerikus integrálási képlet*nek vagy *kvadratúraformulá*nak nevezzük.
$\lambda_i(f)$ információk általában az f függvénynek az értékeit, vagy bizonyos rendű deriváltjainak az értékét adják meg egy $x_i, i = \overline{0, m}$ pontrendszeren, melyet (kvadratúra)-alappontoknak nevezünk:

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{k=0}^{m} \sum_{j \in I_k} A_{kj} f^{(j)}(x_k) + R(f). \tag{2}$$

- A_{kj} együtthatók
- $R(f)$ maradéktag vagy hibatag.

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] + R_1(f),$$

az úgynevezett *trapéz formula*, ahol a maradéktag

$$R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi), a \leq \xi \leq b.$$

A fenti alacsonyrendű formula pontossága javítása érdekében a formulát részintervallumokon alkalmazzuk- *összetett képlet*.

Felosztjuk az $[a, b]$ intervallumot m ekvidisztáns részintervallumra

$$a = x_0 < x_1 < ... < x_m = b, x_{k+1} - x_k = h, h = \frac{b-a}{m}.$$

A $k+1$-dik részintervallumon a numerikus integrálási képlet

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \underbrace{h\sum_{i=0}^{n-1} A_{ki} f(x_i^k)}_{Q_n^{[x_k, x_{k+1}]}} + R_n^{[x_k, x_{k+1}]}(f).$$

Az x_i^k alappontok is ekvidisztánsan helyezkednek el az $[x_k, x_{k+1}]$ intervallumban, így $x_i^k = x_k + i\frac{h}{n-1}$. Ekkor az $[a, b]$ intervallumon a kvadratúraszabály

$$Q_m^n(f) = \sum_{j=0}^{m-1} Q_n^{[x_j, x_{j+1}]}(f) = \sum_{j=0}^{m-1} h \sum_{i=0}^{n-1} A_{ki} f(x_i^k).$$

Legyen $f \in C^n[a, b]$ ekkor a hibatagra a következő becslés állapítható meg

$$\left|R_m^{(n)}(f)\right| \leq h^n \frac{(b-a)}{\alpha_n} \left\|f^{(n+1)}\right\|_\infty, \alpha_n \in \mathbb{R}.$$

Ebből látható, hogy mivel $R_m^{(n)}(f) = O(h^n)$, m növelésével a hiba gyorsan csökken, vagyis $|R_m^{(n)}(f)| \to 0$ tetszőleges $f \in C^n[a, b]$ esetén.
Akkor amikor az egyes részintervallumokon a trapéz formulával közelítünk

$$Q_2^{[x_j, x_{j+1}]}(f) = \frac{h}{2}(f(x_j) + f(x_{j+1})),$$

az úgynevezett összetett trapézformulát kapjuk

$$\begin{aligned} Q_n^{(2)}(f) &= \sum_{j=0}^{n-1} Q_2^{[x_j, x_{j+1}]}(f) = \sum_{j=0}^{n-1} h/2(f(x_j) + f(x_{j+1})) \\ &= \frac{h}{2}\left\{f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right\}. \end{aligned}$$

Ha $f \in C^2[a, b]$, akkor az összetett trapézformula maradéktagja

$$R_n^{(2)}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi), \tag{3}$$

A Romberg integráció egy iterációs módszer, amellyel kiszámítható az integrál tetszőleges pontosságú közelítése a függvény deriváltjának ismerete nélkül.
A módszer lényege, hogy az első lépésben például az összetett trapézformulát használva, a következő lépésekben tovább felezve az intervallumokat újabb és újabb közelítéseket szerkesztünk meg felhasználva az előző lépésben meghatározott approximációkat. Végül a konvergencia javításához Richardson extrapolációt alkalmazhatunk.
Az első lépésben tehát az összetett trapézformulát használjuk, ahol legyen $n_p = 2^{p-1}, p \in \mathbb{N}^*$. Ekkor a h_k lépésköz $h_k = \frac{b-a}{n_k} = \frac{b-a}{2^{k-1}}$ és az összetett trapézformula

$$\int_a^b f(x)dx = \underbrace{\frac{h_k}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{2^{n-1}-1} f(a + ih_k)\right]}_{Q_{k,1}} - \frac{b-a}{12}h_k^2 f''(\xi_k),$$

$\xi_k \in (a,b)$. Ezen összefüggésből ha $h = b - a$

$$Q_{1,1} = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] = \frac{h}{2}[f(a) + f(b)],$$

$$\begin{aligned} Q_{2,1} &= \frac{h}{4}[f(a) + f(b) + 2f(\frac{a+b}{2})] = \\ &= \frac{1}{2}Q_{1,1} + \frac{h}{2}f(a + \frac{h}{2}) \end{aligned}$$

$$Q_{k,1} = \frac{1}{2}Q_{k-1,1} + \frac{h}{2^{k-1}}\sum_{i=1}^{2^{k-2}} f(a + (2i-1)\frac{h}{2^{k-1}}), k = 2, ..., n.$$

Az eljárás gyorsítható egy Richardson extrapolációval. Ennek alapjánál a következő gondolatmenet áll:
Legyen $Q_n(f)$ egy adott kvadratúraképlet egy n egyenlő részre osztott $[a,b]$ intervallumon. Tét. fel, hogy a képlet hibája

$$Q_n(f) - I(f) = Ch^r$$

alakban írható, ahol C egy alkalmas konstans és r a módszer konverganciarendje.
Ha megkétszerezzük a részintervallumok számát, akkor a hiba

$$Q_{2n}(f) - I(f) = C\left(\frac{h}{2}\right)^r$$

A fenti képletből kifejezve $I(f)$-et

$$I(f) = Q_{2n}(f) + \frac{I(f) - Q_n(f)}{2^r} = \frac{Q_{2n}(f)2^r - Q_n(f)}{2^r - 1}$$

Például trapézformula esetén, amikor $r = 2$

$$I(f) = \frac{4Q_{2n}(f) - Q_n(f)}{3}$$

Legyen a következő közelítés

$$Q_{k,2} = \frac{4Q_{k,1} - Q_{k-1,1}}{3}$$

Általánosan a következőképpen írható fel:

$$Q_{k,j} = \frac{4^{j-1}Q_{k,j-1} - Q_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, k = \overline{2,n}, j = \overline{2,k}$$

A számításokat egy táblázatba foglalhatjuk:

$$\begin{array}{lllll} Q_{1,1} & & & & \\ Q_{2,1} & Q_{2,2} & & & \\ Q_{3,1} & Q_{3,2} & Q_{3,3} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ Q_{n,1} & Q_{n,2} & Q_{n,3} & \cdots & Q_{n,n} \end{array}$$

$Q_{n,n}$ gyorsabban konvergál mint $Q_{n,1}$, leállási feltételként a következőt használhatjuk:

$$|Q_{n-1,n-1} - Q_{n,n}| < \epsilon$$

<u>FELADAT</u> Implementálják a Romberg integrációt Richardson extrapolációval.