فصل ۵

انتگرال‌گیری عددی

۱.۵ مقدمه

مسئله‌ای که در این فصل به آن می‌پردازیم، محاسبه‌ی انتگرال‌های معین به فرم

$$\int_a^b f(x)\ dx \qquad (۱.۵)$$

است که در آن a و b متناهی هستند. در بسیاری از مواقع محاسبه‌ی تحلیلی چنین انتگرالی با تعیین تابع اولیه‌ی f ممکن نیست.

از سوی دیگر ممکن است تمام آنچه داریم جدولی از داده‌ها یعنی مقادیر تابع در برخی نقاط بوده و اصولا ضابطه‌ی تعریف تابع f موجود نباشد. در این دو موقعیت استفاده از انتگرال‌گیری عددی توصیه می‌شود.

به یاد آورید که وقتی $f(x) \geq 0$، انتگرال (۱.۵) را می‌توان بعنوان مساحت سطح زیرِ منحنی تابع $y = f(x)$ در ناحیه‌ی محصور به محور xها و خط‌های $x = a$ و $x = b$ تعبیر کرد. می‌دانیم که با افراز بازه‌ی $[a, b]$ به تعدادی زیربازه و محاسبه‌ی مجموع‌های ریمان یعنی مساحت مستطیل‌هایِ (پایینی یا بالایی) حاصل، می‌توان تقریبی برای انتگرال به دست آورد.

ما انتگرال‌گیری عددی را بر درونیابی چندجمله‌ای استوار می‌کنیم. به این معنا که انتگرالده $f(x)$ را با تابع درونیابِ آن تقریب زده و بجای انتگرال‌گیری از f که ممکن است تابعی متعالی و پیچیده باشد، از چندجمله‌ای $p(x)$ انتگرال می‌گیریم:

$$\int_a^b f(x)\ dx \approx \int_a^b p(x)\ dx$$

در عمل، با افراز بازه‌ی $[a,b]$ به n زیربازه شروع می‌کنیم. در ساده‌ترین وضعیت، پهنای زیربازه‌ها را مساوی انتخاب می‌کنیم و روش‌هایی بر پایه‌ی درونیابی تفاضلات متناهی نیوتن می‌سازیم. خانواده‌ی روش‌هایی که حاصل می‌شوند، ((روش‌های نیوتن-کُوتز [1])) نامیده می‌شوند.

واضح است که بجای نقاط هم‌فاصله ممکن است هر دسته‌ی دیگری از نقاط را برای درونیابی استفاده کرد. دسته‌ی معروفی از روش‌ها که با انتخاب نقاطی که متناظر با ریشه‌های چندجمله‌ای‌های متعامد هستند بدست می‌آیند، روش‌های ((انتگرال‌گیری گاوسی)) نامیده می‌شوند[2]. مثلا در حالت خاصی که ریشه‌های چندجمله‌ای‌های چبیشف در انتگرال‌گیری گاوسی استفاده شوند، روش‌های گاوس-چبیشف به دست می‌آیند.

بحث ما اقلا در ابتدا محدود به روش‌های نیوتن-کوتز می‌شود که متناظر با استفاده از نقاط هم‌فاصله برای درونیابی است. فرض کنید نقاط $x_0, x_1, \cdots, x_n$ به صورتی انتخاب شده‌اند که داشته باشیم

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, n$$

که در آن

$$h = \frac{x_n - x_0}{n}$$

طول گامی ثابت است. به یاد آورید که در (۱۰.۳) دیدیم که این نقاط را می‌توان با چندجمله‌ای پیشروی نیوتن به صورت زیر درونیابی کرد:

$$p(s) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{s(s-1)(s-2)\cdots(s-n+1)}{n!}\Delta^n f_0, \quad (۲.۵)$$

جایی که $s := \frac{x-x_0}{h}$.

فرمول‌های نیوتن-کوتز به دو دسته تقسیم می‌شوند: فرمول‌های بسته و فرمول‌های باز. وقتی برای محاسبه‌ی (۱.۵) فرمولی به کار رود که از هر دو نقطه‌ی a و b استفاده کند، فرمول حاصل را بسته می‌نامند. در این وضعیت داریم: $x_0 = a$ و $x_n = b$. اما اگر حداقل از یکی از دو نقطه‌ی انتهایی بازه یعنی a و b در فرمول انتگرال‌گیری استفاده نشود، آن فرمول را باز می‌نامند.

اگر انتگرال (۱.۵) موجود باشد اما تابع f در a یا b تعریف نشده باشد، آنگاه ناچاریم بجای فرمول‌های بسته از فرمول‌های باز استفاده کنیم.

قبل از معرفی اولین روش، نگاه مختصری به خطای تقریب (برشی) انتگرال‌گیری عددی به صورت کلی

[1] Newton-Cotes

[2] در روش‌های گاوسی، بجز نقاط درونیابی، وزن‌های انتگرال‌گیری نیز به صورت بهینه (به معنایی مشخص) انتخاب می‌شوند.

می‌اندازیم.

نکته‌ی ۱.۱.۵. خطای تقریب (برشی) انتگرال‌گیری عددی برابر است با

$$EI := \int_a^b f(x)\ dx - \int_a^b p(x)\ dx = \int_a^b \Big(f(x) - p(x)\Big)\ dx = \int_a^b E(x)\ dx$$

که در آن $E(x) := f(x) - p_(x)$ خطای تقریب f با چندجمله‌ای درونیاب p است. به یاد آورید که خطای درونیابی (لاگرانژ یا روش‌های دیگر) برابر است با

$$E(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\zeta_x),$$

جایی که $\zeta_x \in [x_0,\ x_n]$. واضح است که اگر x_iها هم‌فاصله باشند آنگاه داریم

$$E(s) = \frac{s(s-1)\cdots(s-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\zeta_s), \tag{۳.۵}$$

که در آن $\zeta_s \in [0, n]$.

۲.۵ قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده

این روش اولین حالت خاصِ روش‌های انتگرال‌گیری نیوتن-کوتز است که در آن بازه‌ی $[a, b]$ به تنها $n = 1$ زیربازه افراز می‌شود یعنی

$$h = \frac{b-a}{1} \Longrightarrow \begin{cases} x_0 = a, \\ x_n = x_1 = x_0 + h = a + (b-a) = b. \end{cases}$$

پس معادله‌ی چندجمله‌ای دورنیاب دو نقطه که یک خط است (و متناظر با قسمت خطیِ سمت راست فرمول (۲.۵) می‌باشد) را به صورت زیر داریم:

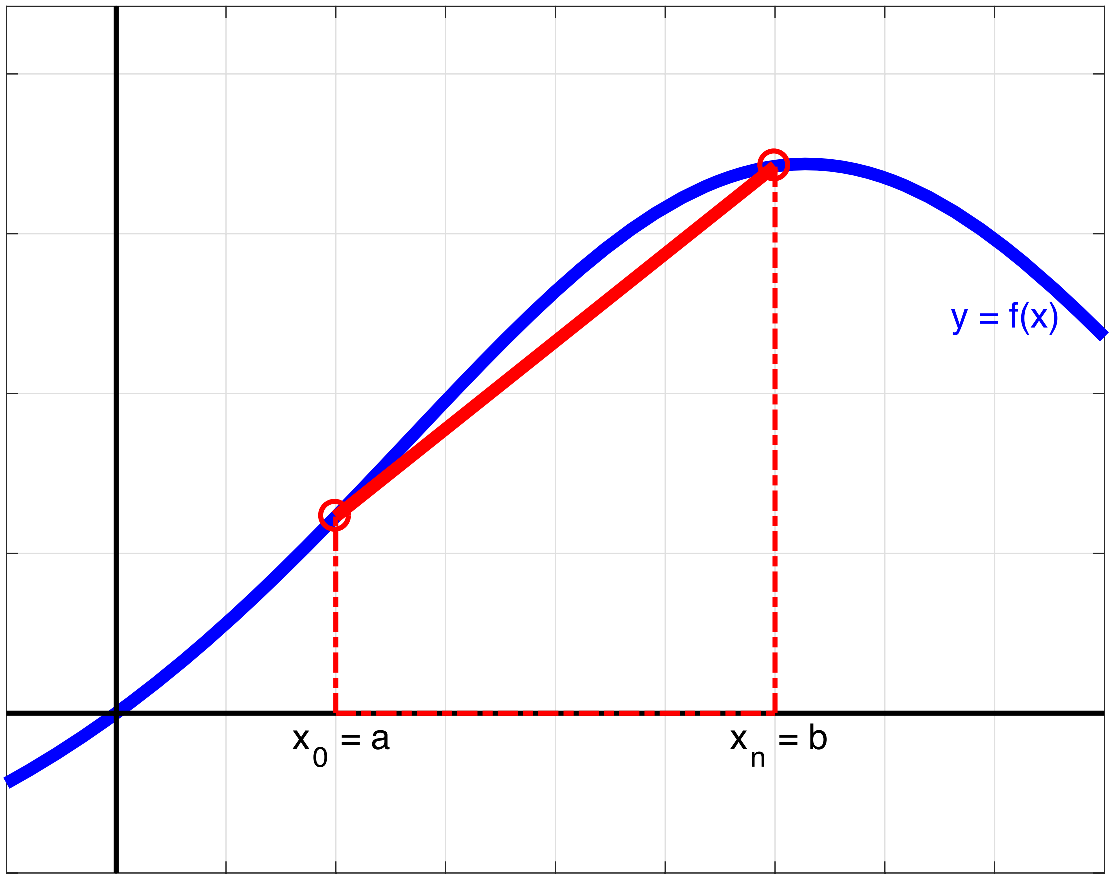
$$p(s) = f_0 + s\Delta f_0$$

پس

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_0^1 (f_0 + s\Delta f_0)\,h\,ds\\ &= h(f_0 s + \frac{s^2}{2}\Delta f_0)|_{s=0}^{s=1}\\ &= h(f_0 + \frac{\Delta f_0}{2} - 0) = h(f_0 + \frac{1}{2}(f_1 - f_0))\end{aligned}$$

بنابراین داریم

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1). \qquad (۴.۵)$$



شکل ۱.۵: ذوزنقه‌ی مورداستفاده در قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده

شکل ۱.۵ را ببینید. از کلاس پنجم ابتدایی به یاد داریم که مساحت ذوزنقه‌ی ساخته‌شده با خط واصل دو نقطه‌ی $(a, f(a))$ و $(b, f(b))$، همان جمله‌ی موجود در سمت راستِ تساوی در فرمول (۴.۵) است.

۱.۲.۵ خطای (برشی) قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده

بار دیگر شکل ۱.۵ را در نظر بگیرید. مساحت ناحیه‌ی بالای خط قرمزرنگ و زیر منحنی $y = f(x)$، خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده برای محاسبه‌ی انتگرال است. با توجه به فرمول (۳.۵) و اینکه در قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده از درونیاب درجه $n = 1$ استفاده می‌شود، خطای تقریب تابع $f(x)$ در حالت کلی با درونیاب خطی برابر است با

$$E(s) = \frac{s(s-1)}{2!} h^2 f''(\zeta_s).$$

پس خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده عبارت است از

$$EI = \int_0^1 \frac{s(s-1)}{2!} h^2 f''(\zeta_s)\ h\ ds = \frac{h^3}{2} \int_0^1 s(s-1) f''(\zeta_s)\ ds.$$

با توجه به وابستگی $f''(\zeta_s)$ به متغیر s تعیین انتگرال بالا سرراست نیست. برای تعیین آن به صورتی ساده، نیاز به تعمیمِ زیر از قضیه‌ی مقدار میانگین برای انتگرال‌ها داریم.

قضیه‌ی ۱.۲.۵. فرض کنید f و g بر $[a, b]$ پیوسته بوده و g در این بازه تغییر علامت ندهد. آنگاه $\alpha \in (a,\ b)$ وجود دارد به طوری که

$$\int_a^b f(t)\ g(t)\ dt = f(\alpha) \int_a^b g(t)\ dt.$$

□

از آنجا که تابع $g(s) := s(s-1)$ برای $s \in [0,\ 1]$ (همواره منفی است یعنی) تغییر علامت نمی‌دهد، پس قضیه‌ی قبل، وجود $\alpha \in (a,\ b)$ را تضمین می‌کند به گونه‌ای که

$$EI = \frac{h^3}{2} f''(c) \underbrace{\int_0^1 s(s-1)\ ds}_{-1/6} = -\frac{h^3}{12} f''(\alpha). \qquad (۵.۵)$$

بر همین اساس گفته می‌شود که خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده $\mathcal{O}(h^3)$ است.

۳.۵ قاعده‌ی سیمسون ساده

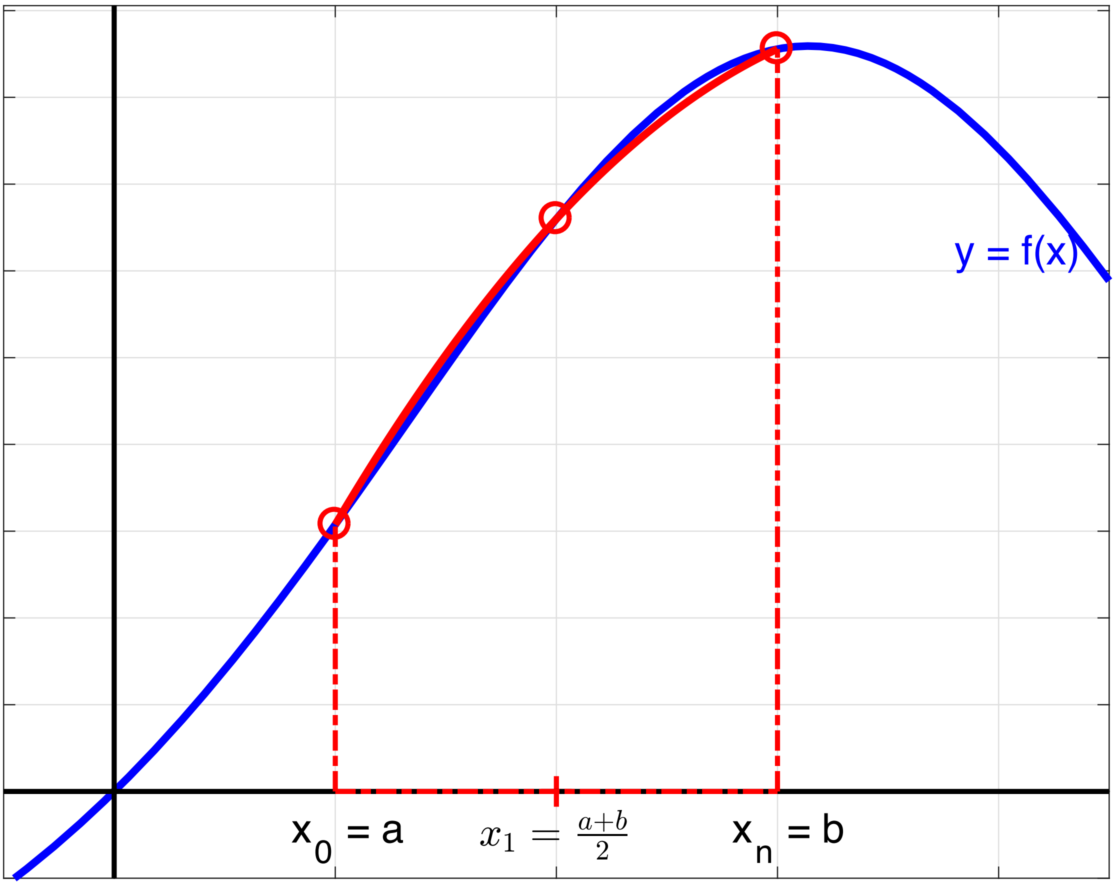
دومین حالت خاص از روشهای نیوتن-کوتز با تقسیم بازه‌ی انتگرال‌گیری یعنی $[a, b]$ به $n = 2$ زیربازه حاصل می‌شود:

$$h = \frac{b-a}{2} \Longrightarrow \begin{cases} x_0 = a, \\ x_1 = x_0 + h = \frac{a+b}{2}, \\ x_1 = x_1 + h = x_0 + 2h = b. \end{cases}$$

پس معادله‌ی چندجمله‌ای دورنیاب سه نقطه که سهمیِ متناظر با قسمت درجه دو از سمت راست فرمول (۲.۵) می‌باشد را به صورت زیر داریم:

$$p(s) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0$$

شکل ۲.۵ این درونیاب درجه دو را به رنگ قرمز نشان می‌دهد.



شکل ۲.۵: قاعده‌ی سیمسون ساده، مساحت ناحیه‌ی زیر تابع f (رنگ آبی) را با مساحت ناحیه‌ی زیر سهمی قرمزرنگ تقریب می‌زند.

پس

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_0^2 \left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0\right) h\,ds$$
$$= h\frac{12 f_0 s + 6s^2\Delta f_0 + (2s^3 - 3s^2)\Delta^2 f_0}{12}\Big|_{s=0}^{s=2}.$$

و در نتیجه داریم

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2). \qquad (۶.۵)$$

شکل ۳.۵: راجر کوتز (راست) ریاضیدان بریتانیایی قرن ۱۷، از شاگردان نیوتن در دانشگاه کِیمبریج بود. وی که مبدع روش‌های انتگرال‌گیری عددی نیوتن–کوتز است، در سن ۳۳ سالگی در اثر تب شدید درگذشت. یوهانِس کِپلِر (چپ) غول آلمانی ریاضیات و ستاره‌شناسی در قرن ۱۷ که تقریبا ۱۰۰ سال قبل از توماس سیمسون، فرمول انتگرال‌گیری عددی (۶.۵) را معرفی کرده بود. وی از تاثیرگذارترین شخصیت‌های انقلاب علمی قرن ۱۷ بود که در انتهای دوره‌ی رنسانس در اروپا شکل گرفت. (عکس‌ها از ویکیپدیا)

۱.۳.۵ خطای قاعده‌ی سیمسون ساده

با توضیحات قبل می‌بینیم که خطای فرمول (۶.۵) در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$EI = \int_0^2 \frac{s(s-1)(s-2)}{6} h^3 f'''(\zeta_s)\,h\,ds = \frac{h^4}{6}\int_0^2 s(s-1)(s-2) f'''(\zeta_s)\,ds$$

تابع $g(s)=s(s-1)(s-2)$ به ازای $s\in[0,2]$ (در $s=1$) تغییرعلامت می‌دهد. در نتیجه استفاده‌ی مستقیم از قضیه‌ی مقدار میانگین تعمیم‌یافته برای انتگرال‌ها ممکن نیست. یک راه این است که انتگرال روی بازه‌ی $[0,2]$ را به جمع دو انتگرال روی بازه‌های $[0,1]$ و $[1,2]$ تبدیل کرده و سپس با توجه به اینکه علامتِ تابع $g(s)$ روی هر دو زیربازه بدون تغییر باقی می‌ماند روی دو زیربازه به طور مجزا قضیه‌ی مقدار میانگین تعمیم‌یافته برای انتگرال‌ها را اِعمال کنیم. این راهکار هرچند درست است اما به بهترین کران خطای ممکن برای روش سیمسون منجر نمی‌شود! می‌توان نشان داد که خطای قاعده‌ی سیمسون ساده به صورت زیر است

$$EI=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\alpha)=-\frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\alpha), \tag{۷.۵}$$

که در آن $\alpha\in(a,b)$. بنابراین خطای قاعده‌ی سیمسون ساده $\mathcal{O}(h^5)$ است و نه $\mathcal{O}(h^4)$!

تمرین ۱۱. فرمول قبل برای خطای قاعده‌ی سیمسون ساده را به دست آورید.

راهنمایی: یک روشِ اثبات از بسط تیلور f_0 و f_2 حول نقطه‌ی x_1 برای بازنویسی سمت راست فرمول (۶.۵) شروع کرده و سپس بسط تیلور انتگرالده $f(x)$ در سمت چپ (۶.۵) را باز هم حول x_1 می‌نویسد. روش دیگرِ اثبات، از قضیه‌ای به نام هسته‌ی پئانو استفاده می‌کند.

با توجه به فرمول قبل، کران خطای زیر برای قاعده‌ی سیمسون ساده به دست می‌آید:

$$|EI|\le\frac{1}{90}M_4h^5,$$

که در آن $M_4:=\max\limits_{a\le x\le b}|f^{(4)}(t)|$. یکی از نتایجی که از این کران خطا گرفته می‌شود این است که در حالت خاصی که تابع $f(x)$ یک چندجمله‌ای از درجه‌ی حداکثر سه باشد، قاعده‌ی سیمسون ساده برای انتگرال‌گیری از آن (در تئوری) دقیق است یعنی دارای خطای (برشی و نه گردکردن) صفر است. به یاد آورید که طبق (۵.۵)، قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده تنها برای چندجمله‌ای‌های از درجه‌ی حداکثر یک، عاری از خطای برشی است.

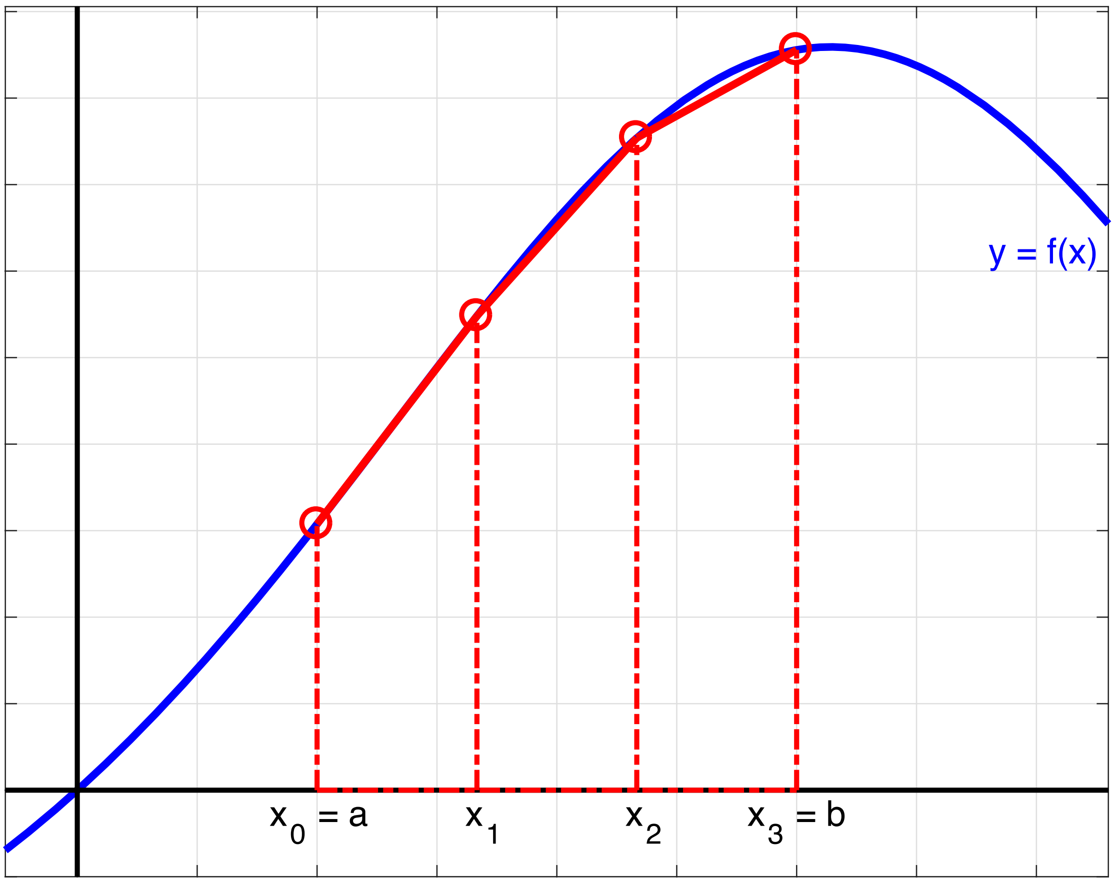
۴.۵ قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب

اکنون فرض کنید بازه‌ی $[a, b]$ به n زیربازه‌ی $[x_i,\ x_{i+1}]$ برای $i = 0, 1, \cdots, n-1$ افراز کرده و برای انتگرال‌گیری از تابع f در هر زیربازه، از قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده استفاده کنیم:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx \\ &\approx \frac{h}{2}(f_0+f_1) \ + \ \frac{h}{2}(f_1+f_2) \ + \ \frac{h}{2}(f_2+f_3) \ + \cdots + \ \frac{h}{2}(f_{n-1}+f_n)\end{aligned}$$

پس فرمول قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \qquad (۸.۵)}$$



شکل ۴.۵: قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب در حالتی که $n = 3$. در هر زیربازه، قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده یعنی درونیابی با یک خط اجرا می‌شود.

۱.۴.۵ خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب

با جمع خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای ساده، یعنی (۵.۵)، روی تک‌تکِ زیربازه‌های $[x_i,\ x_{i+1}]$ داریم:

$$\begin{aligned} EI &:= \int_a^b f(x)\ dx - \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\ &= \Big(\int_{x_0}^{x_1} f(x)\ dx - \frac{h}{2}(f_0+f_1)\Big) + \cdots + \Big(\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\ dx - \frac{h}{2}(f_{n-1}+f_n)\Big) \\ &= -\frac{h^3}{12} f''(\alpha_0) - \frac{h^3}{12} f''(\alpha_1) - \cdots - \frac{h^3}{12} f''(\alpha_{n-1}); \qquad \alpha_i \in (x_i, x_{i+1}) \\ &= -\frac{h^3}{12}\Big(f''(\alpha_0) + f''(\alpha_1) + \cdots + f''(\alpha_{n-1})\Big). \end{aligned} \tag{۹.۵}$$

حال فرض کنید

$$\begin{cases} m := \min\limits_{a\le x\le b} f''(x), \\ M := \max\limits_{a\le x\le b} f''(x). \end{cases}$$

بنابراین برای $i = 0, 1, \cdots, n-1$ داریم $m \le f''(\alpha_i) \le M$ و در نتیجه

$$nm \le f''(\alpha_0) + f''(\alpha_1) + \cdots + f''(\alpha_{n-1}) \le nM.$$

پس

$$m \le \frac{f''(\alpha_0) + f''(\alpha_1) + \cdots + f''(\alpha_{n-1})}{n} \le M.$$

بنابراین $\overline{s} := \frac{f''(\alpha_0)+f''(\alpha_1)+\cdots+f''(\alpha_{n-1})}{n}$ مقداری است که در رابطه‌ی

$$\min_{a\le x\le b} f''(x) \le \overline{s} \le \max_{a\le x\le b} f''(x)$$

صدق می‌کند. از آنجا که هر تابع پیوسته بر یک بازه‌ی بسته و متناهی، تمام مقادیر بین کمینه و بیشینه‌ی خود را در نقطه‌ای در حوزه‌ی تعریفش اختیار می‌کند و با این فرض که $f''(x)$ پیوسته بوده است، وجود دارد $\alpha \in [a, b]$ به طوری که $f''(\alpha) = \overline{s}$. بنابراین بر طبق (۹.۵) داریم

$$EI = -\frac{h^3}{12} n f''(\alpha)$$

از سوی دیگر $n = \frac{b-a}{h}$. در نتیجه خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب برابر است با

$$EI = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\alpha).$$

پس داریم $EI = \mathcal{O}(h^2)$.

نکته‌ی ۵.۴.۱. با توجه به حضور جمله‌ی $f''(\alpha)$ در خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب واضح است که این روش در حالتی که f یک چندجمله‌ای از درجه‌ی حداکثر یک باشد، دقیق است (به این مفهوم که خطای برشی آن صفر است).

نکته‌ی ۵.۴.۲. اگر M_2 کران بالایی برای $|f''(x)|$ روی بازه‌ی $[a, b]$ باشد آنگاه داریم

$$|EI| \leq \frac{(b-a)}{12} h^2 M_2.$$

از این نامساوی می‌توان برای بدست آوردن طول گام h یا تعداد زیربازه‌ها یعنی n در روش ذوزنقه‌ای مرکب با این هدف استفاده کرد که خطای (برشی) روش از یک مقدار ϵ قابل تحملِ داده‌شده، کمتر باشد.

۵.۵ قاعده‌ی سیمسون مرکب

ایده‌ی این روش نیز سرراست است: بازه‌ی $[x_0,\ x_n] = [a, b]$ را به تعدادی زیربازه با پهنای یکسان افراز کرده و در هر زیربازه، قاعده‌ی سیمسون ساده را اجرا می‌کنیم.

از آنجا که قاعده‌ی سیمسون ساده نیاز به سه نقطه برای درونیابی درجه دو دارد، هر زیربازه باید به فرم $[x_i,\ x_{i+2}]$ باشد که در آن $i = 0, 2, 4, \cdots, n-2$. چون این اندیس‌ها دو-در-میان هستند پس تعداد زیربازه‌هایی که این‌چنین ساخته می‌شود برابر است با

$$\frac{(n-2)-0}{2} + 1 = \frac{n}{2}.$$

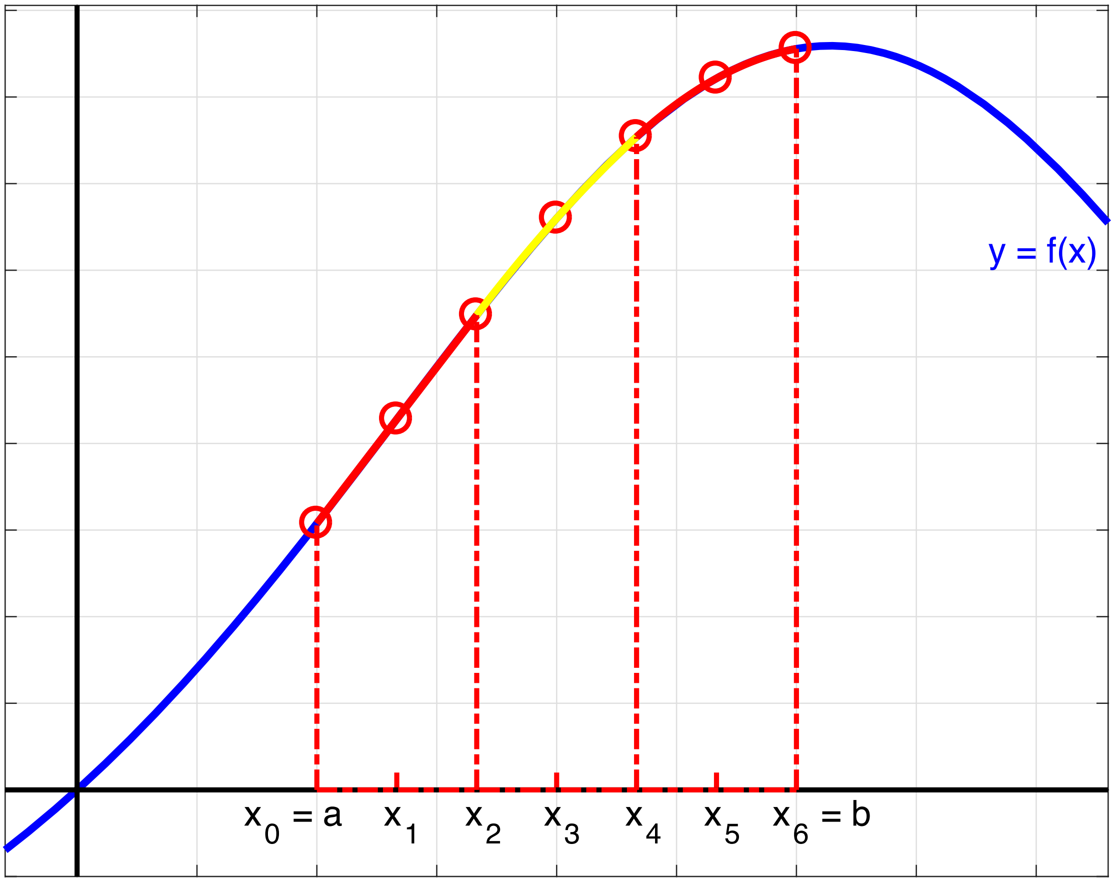
این بدان معناست که برای اجرای صحیح روش، n باید ((عددی زوج)) باشد. با این فرض، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \int_{x_4}^{x_6} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx \\ &\approx \frac{h}{3}(f_0+4f_1+f_2) + \frac{h}{3}(f_2+4f_3+f_4) + \frac{h}{3}(f_4+4f_5+f_6) \\ &\quad + \cdots + \frac{h}{3}(f_{n-2}+4f_{n-1}+f_n)\end{aligned}$$

پس داریم

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\Big). \quad (۱۰.۵)}$$

شکل ۵.۵ را ببینید جایی که سهمیِ مورداستفاده برای درونیابی در دومین زیربازه، برای تمایز بهتر، با رنگ متفاوت مشخص شده است.



شکل ۵.۵: قاعده‌ی سیمسون مرکب برای $n = 6$. در هر زیربازه، قاعده‌ی سیمسون ساده یعنی درونیابی با یک سهمی اجرا می‌شود.

۱.۵.۵ خطای قاعده‌ی سیمسون مرکب

روند تعیین میزان خطا بسیار شبیه به روند تعیین خطای قاعده‌ی ذوزنقه‌ای مرکب است. با استفاده از خطای قاعده‌ی سیمسون ساده روی هر زیربازه یعنی فرمول (۷.۵) داریم

$$\begin{aligned} EI &:= \int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) \\ &= \Big(\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_1)\Big) + \cdots + \Big(\int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)\Big) \\ &= -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\alpha_1) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\alpha_3) - \cdots - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\alpha_{n-1}); \qquad \alpha_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}) \\ &= -\frac{h^5}{90}\Big(f^{(4)}(\alpha_1) + f^{(4)}(\alpha_3) + \cdots + f^{(4)}(\alpha_{n-1})\Big). \qquad (۱۱.۵) \end{aligned}$$

حال فرض کنید

$$\begin{cases} m := \min\limits_{a\le x\le b} f^{(4)}(x), \\ M := \max\limits_{a\le x\le b} f^{(4)}(x). \end{cases}$$

بنابراین برای $i = 1, 3, \cdots, n-1$ داریم $m \le f^{(4)}(\alpha_i) \le M$ و در نتیجه

$$\frac{n}{2}m \le f^{(4)}(\alpha_1) + f^{(4)}(\alpha_3) + \cdots + f^{(4)}(\alpha_{n-1}) \le \frac{n}{2}M.$$

پس

$$m \le \frac{f^{(4)}(\alpha_1) + f^{(4)}(\alpha_3) + \cdots + f^{(4)}(\alpha_{n-1})}{\frac{n}{2}} \le M.$$

بنابراین $\bar{t} := \frac{f^{(4)}(\alpha_1)+f^{(4)}(\alpha_3)+\cdots+f^{(4)}(\alpha_{n-1})}{\frac{n}{2}}$ مقداری است که در رابطه‌ی

$$\min_{a\le x\le b} f^{(4)}(x) \le \bar{t} \le \max_{a\le x\le b} f^{(4)}(x)$$

صدق می‌کند. پس اگر $f^{(4)}(x)$ پیوسته باشد، $\alpha \in [a,b]$ موجود است به طوری که $f^{(4)}(\alpha) = \bar{t}$. بنابراین بر طبق (۱۱.۵) داریم

$$EI = -\frac{h^5}{90}\frac{n}{2}f^{(4)}(\alpha) = -\frac{h^5}{90}\frac{b-a}{2h}f^{(4)}(\alpha)$$

در نتیجه خطای قاعده‌ی سیمسون مرکب برابر است با

$$EI = -\frac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\alpha)$$

یعنی داریم $EI = \mathcal{O}(h^4)$.

نکته‌ی ۱.۵.۵. از آنجا که جمله‌ی $f^{(4)}(\alpha)$ در خطای قاعده‌ی سیمسون مرکب ظاهر می‌شود، پس این روش در حالتی که f یک چندجمله‌ای از درجه‌ی حداکثر سه باشد، ‘‘دقیق’’ است.

نکته‌ی ۲.۵.۵. اگر M_4 کران بالایی برای $|f^{(4)}(x)|$ روی بازه‌ی $[a,b]$ باشد آنگاه داریم

$$|EI| \leq \frac{(b-a)}{180}h^4 M_4. \qquad (۱۲.۵)$$

معمولا از این نامساوی برای تعیین h یا تعداد زیربازه‌ها یعنی $n/2$ به گونه‌ای که خطای روش سیمسون مرکب از مقداری از پیش تعیین شده، کمتر باشد، استفاده می‌شود.

مثال ۱.۵.۵. داده‌های زیر مربوط به تابعی همچون $f(x)$ موجود هستند.

x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1	1.2
f_i	3.1411	2.5008	2.0279	2.2710	3.3834	3.9551	2.4897

تقریبی برای $\int_0^{1.2} f(x)\,dx$ به کمک هر دو روش ذوزنقه‌ای و سیمسون به دست آورید.

با توجه به فرمول (۸.۵) تقریبی که با روش ذوزنقه‌ای به دست می‌آید برابر است با

$$\int_0^{1.2} f(x)\,dx \approx \frac{0.2}{2}(f(0)+2f(0.2)+2f(0.4)+2f(0.6)+2f(0.8)+2f(1)+f(1.2)) \approx 3.3907.$$

از سوی دیگر با روش سیمسون داریم

$$\int_0^{1.2} f(x)\,dx \approx \frac{0.2}{3}(f(0)+4f(0.2)+2f(0.4)+4f(0.6)+2f(0.8)+4f(1)+f(1.2)) \approx 3.4241.$$

توضیح اضافه اینکه داده‌های جدول قبل از تابع $f(x) = 3 + \sin(3e^x)$ گرفته شده‌اند که مقدار درست انتگرال آن تا پنج رقم بامعنا برابر است با 3.4118. بعلاوه تابع اولیه‌ی f برحسب توابع استاندارد ریاضی موجود نیست!

مثال ۲.۵.۵. به کمک قاعده‌ی سیمسون تقریبی از $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)\ dx$ را یک بار با طول گام $h = \frac{\pi}{4}$ و سپس با طول گام $h = \frac{\pi}{8}$ به دست آورید.

به ازای $h = \frac{\pi}{4}$ داریم

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)\ dx \approx \frac{\frac{\pi}{4}}{3}(\sin 0 + 4\sin\frac{\pi}{4} + \sin\frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{12}(0 + 2\sqrt{2} + 1) \approx 1.00228.$$

و برای $h = \frac{\pi}{8}$ داریم

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)\ dx \approx \frac{\frac{\pi}{8}}{3}(\sin 0 + 4\sin\frac{\pi}{8} + 2\sin\frac{\pi}{4} + 4\sin\frac{3\pi}{8} + \sin\frac{\pi}{2}) \approx 1.00013.$$

چون

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)\ dx = -\cos x|_0^{\frac{\pi}{2}} = 1$$

پس مشاهده می‌کنیم که پاسخ نظیر با طول گام کوچک‌تر (روش سیمسون مرکب) دارای خطای کمتری است.

مثال ۳.۵.۵. طول گام h را طوری تعیین کنید که بتوان از قاعده‌ی سیمسون برای محاسبه‌ی $\int_0^{\frac{\pi}{2}} x\cos(x)\ dx$ با خطای برشی کمتر یا مساوی با 10^{-5} استفاده کرد.

برای حل مسئله از نامساوی (۱۲.۵) استفاده می‌کنیم که نیاز به کرانی برای مشتق چهارم انتگرالده دارد. داریم:

$$\begin{aligned} f(x) = x\cos(x) \Longrightarrow f'(x) &= \cos(x) - x\sin(x), \\ f''(x) &= -2\sin(x) - x\cos(x), \\ f'''(x) &= -3\cos(x) + x\sin(x), \\ f^{(4)}(x) &= 4\sin(x) + x\cos(x). \end{aligned}$$

با توجه به اینکه $0 \le x \le \frac{\pi}{2}$ پس داریم

$$|f^{(4)}(x)| \le 4|\sin(x)| + |x|\ |\cos(x)| \le 4 + \frac{\pi}{2}(1) =: M_4$$

هدف این است که [۱] مطابق (۱۲.۵)، طول گام h در رابطه‌ی زیر صدق کند

$$\frac{(\frac{\pi}{2}-0)}{180}h^4(4+\frac{\pi}{2}) \leq 10^{-5},$$

یعنی $h \leq 0.1176$ که به ازای آن داریم

$$n = \frac{b-a}{h} = \frac{\pi/2-0}{h} \geq 13.357.$$

از سوی دیگر محدودیت اصلی در روش سیمسون، زوج‌بودن n است. به ازای $n = 14$ طول گامِ مناسب، برابر خواهد بود با

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{\pi}{28} \approx 0.1122.$$

[۱] دقت کنید که M_4 تنها کران بالای بدبینانه‌ای برای مشتق چهارم f است و تعیین کران خطای بهتر، نیاز به یافتن ریشه‌ی مشتق پنجم f یعنی حل مسئله‌ی $5\cos(x) - x\sin(x) = 0$ می‌باشد. ریشه‌ی این تابع در بازه‌ی مطلوب، حدودا برابر است با $r = 1.3138$ که مقدار بیشینه‌ی مشتق چهارم f را تقریبا $f^{(4)}(r) \approx 4.2026$ نشان می‌دهد. با این حال در ادامه‌ی حل از همان کران $M_4 \approx 5.5708$ که تعیین آن بسیار ساده بود استفاده می‌کنیم.