

Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

6 - Kwadratury - całkowanie numeryczne

Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors

Mateusz Woś
Michał Matusiak
Rafał Stachura



Outline

- 1 Wstęp
- 2 Kwadratury elementarne
- 3 Kwadratury Newtona-Cotesa
- 4 Złożone kwadratury Newtona-Cotesa
- 5 Całkowanie adaptacyjne
- 6 Kwadratury Gaussa
- 7 Biblioteki

Wstęp

- funkcją elementarną nazywamy funkcję wymierną, trygonometryczną, wykładniczą, lub jedną z ich odwrotności
- weźmy zbiór funkcji, powstałych z elementarnych przez branie ich sumy, iloczynu, ilorazu, złożenia albo ich kombinacji
- pochodną każdej z tych funkcji można znaleźć, posługując się wzorami na pochodną sumy, iloczynu, ilorazu bądź złożenia funkcji.
- Z całkami jest inaczej: gdy musimy znaleźć funkcję pierwotną funkcji z powyższej klasy, to taka pochodna może się już nie dać wyrazić przez funkcje elementarne

Przykład: $\int e^{-x^2} dx \rightarrow$ funkcja błędu

Wstęp

Problem:

- Wiele całek nieoznaczonych nie daje się wyrazić w postaci skończonej przez funkcje elementarne
- Często niemożliwość znalezienia dokładnych całek oznaczonych

W praktyce dysponujemy procedurą obliczania $f(x)$ albo jej stabilizowanymi wartościami w ustalonych punktach.

Rozwiązanie:

- zastąpienie funkcji podcałkowej $f(x)$ inną bliską funkcją $g(x)$
- przybliżenie całki przez sumę ważoną:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

a) **Istota:**

Podział przedziału całkowania $[a,b]$ na podprzedziały \rightarrow formuły złożone

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n \int_{a_i}^{a_{i+1}} f(x)dx = \sum_{i=0}^n I_i$$

b) **Stopień dokładności kwadratury:**

Stopień dokładności kwadratury to liczba całkowita $n > 0$ taka, że kwadratura jest dokładna dla wielomianów stopnia $\leq n$ oraz daje niezerowy błąd dla wielomianów stopnia $> n$.

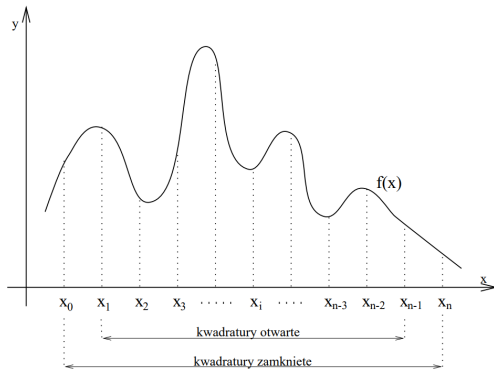
E - błąd kwadratury,

P_k - wielomian stopnia k ,

$$\forall k \leq n : E(P_k) = 0, E(P_{n+1}) \neq 0$$

Ponieważ całkowanie, dodawanie to operacje liniowe \rightarrow zamiast dowolnego P_k można sprawdzać jednomian x^k .

c)



Kwadratury:

- otwarte (nie korzystają ze skrajnych punktów)
- zamknięte (korzystają ze skrajnych punktów)
- półotwarte

Ekstrapolacja Richardsona

Metoda uzyskiwania wyników o dużej dokładności przy użyciu formuł niskiego rzędu.

Rząd metody - mówi nam jak zmienia się błąd metody w stosunku do zmiany kroku

Historyczne podejścia:

- Archimedes (200 p.n.e.)
- L. F. Richardson, J. A. Gaunt (1927 n.e)

Niech h - krok metody, k - rząd metody, $E(h)$ - błąd obliczeń \rightarrow postać asymptotyczna (w granicy)

$$E(h) = \sum_{i=k}^{\infty} a_i \cdot h^i, \quad a_k \neq 0$$

przy czym: $a_i \left\{ \begin{array}{l} \text{mogą zależeć od } f(x), \\ \textbf{nie} \text{ zależą od } h. \end{array} \right\}$

Obliczenia dla $h_1 \neq h_2$:

φ – dokładna wartość

φ_1, φ_2 – wartości wyznaczone

Cel \rightarrow zwiększenie minimalnego wykładnika przy h o 1,
początek sumowania w $(k+1)$

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_1(h_1) + \sum_{i=k}^{\infty} a_i \cdot h_1^i \mid \cdot h_2^k \\ \varphi &= \varphi_2(h_2) + \sum_{i=k}^{\infty} a_i \cdot h_2^i \mid \cdot h_1^k \end{aligned} \quad \Bigg| -$$

$$\varphi = \frac{1}{h_1^k - h_2^k} \cdot (h_1^k \cdot \varphi_2 - h_2^k \cdot \varphi_1) + \sum_{i=k+1}^{\infty} a_i \cdot \frac{h_1^k h_2^i - h_1^i h_2^k}{h_1^k - h_2^k}$$

Wynik \Rightarrow zwiększenie najmniejszego wykładnika potęgi h w $E(h)$

Szczególny przypadek ER (użyteczny dla kwadratur):

$$\varphi = \phi_1(h) + \sum_{j=1}^{\infty} a_j h^{2j}$$

$$4\varphi = 4\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) + 4a_1 \frac{h^2}{4} + \sum_{j=2}^{\infty} 4a_j \frac{h^{2j}}{4^j}$$

$$3\varphi = 4\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h) + O(h^4)$$

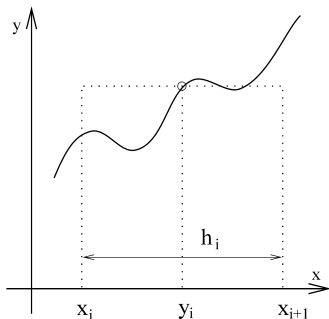
Ogólnie:

$$\varphi = N_{j-1}(h) + \sum_{j=1}^{m-1} K_j \cdot h^{2j} + O(h^{2m}),$$

co pozwala na rekurencyjne generowanie:

$$N_j(h) = \frac{1}{4^{j-1} - 1} \cdot [4^{j-1} \cdot N_{j-1}\left(\frac{h}{2}\right) - N_{j-1}(h)], \quad j = 2, 3, \dots, m.$$

Wzór prostokątów



Idea:

$$y_i = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1}),$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx f(y_i) h_i$$

Własności:

- stopień dokładności: 1
- kwadratura otwarta

Wyprowadzenie metody (korzystamy ze wzoru Taylora):

$$f(x) = f(y_i) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(x - y_i)^p}{p!} f^{(p)}(y_i)$$

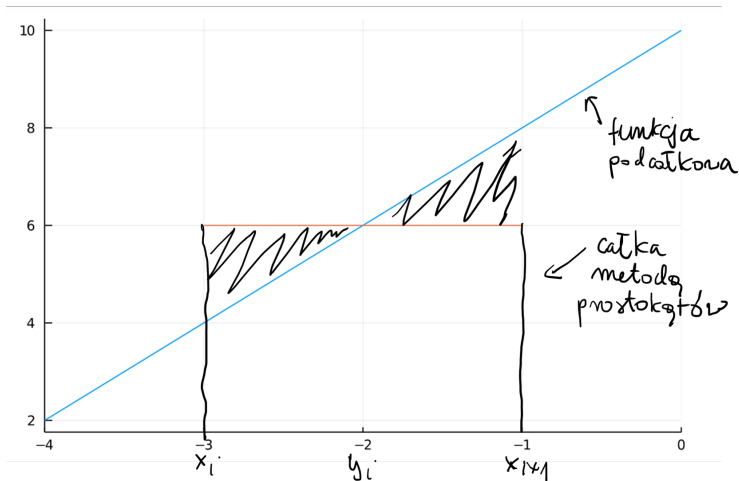
$$F(x) = \int f(x) dx = f(y_i)x + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(x - y_i)^{p+1}}{(p+1)!} f^{(p)}(y_i)$$

Następnie podstawiając $h = x_{i+1} - x_i$, $\frac{h}{2} = x_{i+1} - y_i = y_i - x_i$

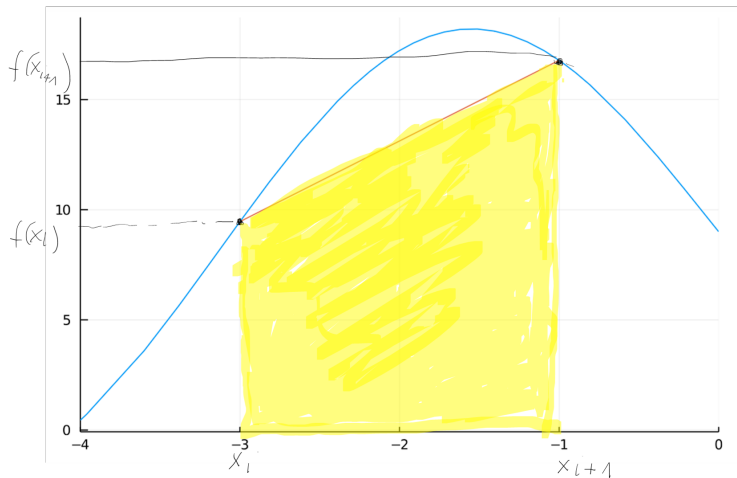
$$(*) \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = F(x_{i+1}) - F(x_i) =$$

$$\underbrace{f(y_i)h_i}_R + \underbrace{\frac{1}{24}h_i^3 f''(y_i) + \frac{1}{1920}h_i^5 f^{(4)}(y_i) + \dots}_{\text{blad metody}}$$

Stopień dokładności dla met. prostokątów



Wzór trapezów



Wzór trapezów

Idea:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{1}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \cdot h_i$$

Własności:

- stopień dokładności: 1
- kwadratura zamknięta

Wyprowadzenie metody:

$$f(x_i) = f(y_i) - \frac{1}{2} h_i f'(y_i) + \frac{(\frac{h_i}{2})^2}{2!} f''(y_i) \dots$$

$$f(x_{i+1}) = f(y_i) + \frac{1}{2} h_i f'(y_i) + \frac{(\frac{h_i}{2})^2}{2!} f''(y_i) \dots$$

Wzór trapezów

Przy sumowaniu wyrazy z nieparzystymi pochodnymi znoszą się :

$$f(x_i) + f(x_{i+1}) = 2(f(y_i) + \frac{(\frac{h_i}{2})^2}{2!} f''(y_i) + \dots)$$

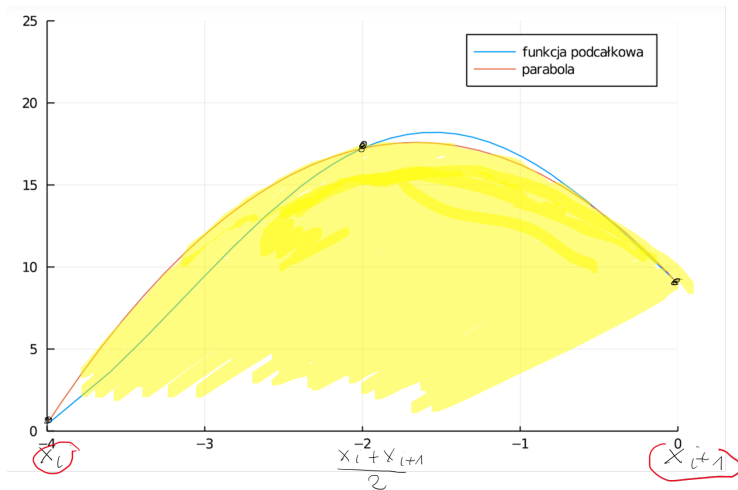
$$f(y_i) = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} - \frac{(\frac{h_i}{2})^2}{2!} f''(y_i) - \dots$$

Wstawiając do (*) otrzymujemy:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = f(y_i) h_i + \frac{1}{24} h_i^3 f''(y_i) + \frac{1}{1920} h_i^5 f^{(4)}(y_i) + \dots =$$

$$\underbrace{\frac{1}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \cdot h_i}_T - \underbrace{\frac{1}{12} h_i^3 f''(y_i) - \frac{1}{480} h_i^5 f^{(4)}(y_i) + \dots}_{\text{błąd metody}}$$

Wzór Simpsona



Wzór Simpsona

Idea: Całkujemy parabolę przechodzącą przez punkty

$x_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, x_{i+1}$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{1}{6} h_i \left[f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right]$$

Błąd metody:

$$\tilde{E} = -\frac{1}{2880} h_i^5 f^{(4)}(y_i)$$

Uwaga:

Wzór Simpsona oparty na interpolacji 2-go rzędu, ale dokładny dla funkcji sześciennych.

Kwadratury Newtona-Cotesa

Zamiana problematycznej funkcji podcałkowej na prosty wielomian interpolujący.

Charakterystyka kwadratur N-C:

- wzór interpolacyjny Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\eta(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

- węzły równoodległe

Uwagi:

- metody prostokątów i trapezów są szczególnymi przypadkami kwadratur N-C
- lepsze efekty uzyskuje się zastępując węzły równoodległe węzłami Czebyszewa

Wzory zamknięte N-C

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \quad x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + E$$

Liczby Cotesa:

$$a_i = \int_{x_0}^{x_n} L_i(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$

- wszystkie $a_i > 0$ tylko dla : $n \leq 7, n = 9$
- $\sum a_i =$ długości przedziału całkowania (dlaczego?)

Błąd $E, \eta \in [a, b]$

- n -parzyste, $f \in C^{n+2}[a, b]$

$$E = \frac{h^{n+3} \cdot f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!} \int_0^n t^2(t-1) \dots (t-n) dt$$

stopień dokładności: $(n+1)$

- n -nieparzyste, $f \in C^{n+1}[a, b]$

$$E = \frac{h^{n+2} \cdot f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \int_0^n t(t-1) \dots (t-n) dt$$

stopień dokładności: (n)

Najczęściej używane formuły zamknięte N-C

a) $n = 1$, Trapezoid Rule

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in [a, b]$$

b) $n = 2$, Simpson's Rule

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta)$$

c) $n = 3$, Simpson's Three-Eights Rule

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\eta)$$

d) $n = 4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x) dx = \frac{2h}{45} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\eta)$$

Wzory otwarte N-C

$$h = \frac{b-a}{n+2}, \quad a = x_{-1} < x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = b,$$

$$x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_{-1}}^{x_{n+1}} f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + E$$

Liczby Cotesa:

$$a_i = \int_a^b L_i(x) dx$$

wszystkie $a_i > 0$ tylko dla $n = 1, 2, 3, 5$.

Błąd $E, \eta \in [a, b]$

- *n*-parzyste, $f \in C^{n+2}[a, b]$

$$E = \frac{h^{n+3} \cdot f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!} \int_{-1}^{n+1} t^2(t-1) \dots (t-n) dt,$$

stopień dokładności: $(n+1)$

- *n*-nieparzyste, $f \in C^{n+1}[a, b]$

$$E = \frac{h^{n+2} \cdot f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \int_{-1}^{n+1} t(t-1) \dots (t-n) dt,$$

stopień dokładności: (n)

Najczęściej używane kwadratury otwarte Newtona-Cotesa

a) $n = 0$, **Midpoint Rule, Rectangle Rule**

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3}f''(\eta) , \eta \in [x_{-1}, x_{n+1}]$$

b) $n = 1$

$$\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)dx = \frac{3h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] + \frac{3h^3}{4}f''(\eta)$$

c) $n = 2$, **Milne's Rule**

$$\int_{x_{-1}}^{x_3} f(x)dx = \frac{4h}{3}[2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)] + \frac{14h^5}{45}f^{(4)}(\eta)$$

d) $n = 3$

$$\int_{x_{-1}}^{x_4} f(x)dx = \frac{5h}{24}[11f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + 11f(x_3)] + \frac{95h^5}{144}f^{(4)}(\eta)$$

Kwadratury N-C – podsumowanie

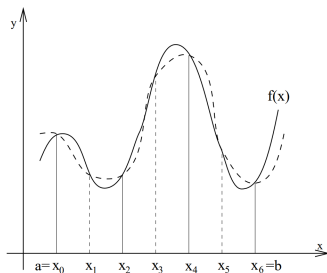
- zwiększenie stopnia dokładności (otwartych i zamkniętych) przez dodanie co najmniej 2 nowych węzłów
- w przypadku dodania jednego punktu dla:
 - * parzystej liczby węzłów \rightarrow brak zmian st. dokładności,
 - * nieparzystej liczby węzłów \rightarrow wzrost st. dokładności o 2
- otwarte – na ogół gorsze od zamkniętych, używane:
 - * osobliwości w granicach przedziału
 - * w numerycznym rozwiązywaniu równań różniczkowych zwyczajnych
- możliwe formuły półotwarte (półzamknięte)

- efekty wzrostu n :

- * zmniejszanie stałego czynnika w E , lecz wzrost rzędu pochodnej
- * trudności z oszacowaniem E
- * duże wartości $f^{(n+1)}(\eta)$
- * $a_i > 0$: zamknięte - tylko $n = 1, 2, \dots, 7$ i 9 otwarte - tylko $n = 1, 2, 3$ i 5. - złe uwarunkowanie
- * oscylacyjny charakter wielomianu interpolacyjnego (zwłaszcza, że węzły są równoodległe)
- * trudne do uzyskania liczby Cotesa

Złożone kwadratury Newtona-Cotesa

Wzory N-C są niedogodne dla dużych $[a, b]$ – *piecewise technique*



Problemy:

- wzrost błędu interpolacji dla dużych n
- efekt Rungego (rozwiązanie dla interpolacji to funkcje sklejane oraz interpolacja sześcienna)

Wyprowadzenie złożonej kwadratury:

Przedział $[a, b]$ podzielony na n podprzedziałów $n = 2m$.

(Simpson elementarny potrzebuje 3 węzły czyli 2 przedziały)

$$h = \frac{b-a}{2m}, \quad x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, 2m$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=1}^m \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x) dx = \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{h}{3} [f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta_j) \right\}$$

$\eta_j \in (x_{2j-2}, x_{2j})$

$f(x_{2j})$ występuje w składowych dla $[x_{2j-2}, x_{2j}][x_{2j}, x_{2j+2}]$ i stąd:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4 \sum_{j=1}^m f(x_{2j-1}) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_{2j}) + f(x_{2m})] - \frac{h^5}{90} \sum_{j=1}^m f^{(4)}(\eta_j)$$

Uwaga: Analogicznie dla innych kwadratur np. wzoru trapezów

Składanie Simpsona - przykład

$$(f_0 + 4f_1 + f_2) + (f_2 + 4f_3 + f_4) + (f_4 + 4f_5 + f_6)$$

$$(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + f_6)$$

Błąd dla wzoru złożonego

Założenia:

- $f(x)$ - ciągła w $[a,b]$
- $f^{(4)}$ - ciągła w $[a,b]$

Z tw. Weierstrassa:

$$\exists x_1, x_2 \in [a, b] : \min_{x_1 \in [a, b]} f^{(4)}(x_1) \leq f^{(4)}(\eta_j) \leq \max_{x_2 \in [a, b]} f^{(4)}(x_2)$$

dla każdego przedziału w wyniku dodawania:

$$m \cdot \min_{x_1 \in [a, b]} f^{(4)}(x_1) \leq \sum_{j=1}^m f^{(4)}(\eta_j) \leq m \cdot \max_{x_2 \in [a, b]} f^{(4)}(x_2),$$
$$\min_{x_1 \in [a, b]} f^{(4)}(x_1) \leq \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m f^{(4)}(\eta_j) \leq \max_{x_2 \in [a, b]} f^{(4)}(x_2),$$

Z tw. o wartości pośredniej (Darboux):

$$\exists \mu \in (a, b) : f^{(4)}(\mu) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m f^{(4)}(\eta_j) \Rightarrow$$

$$E = -\frac{h^5}{90} \cdot m \cdot f^{(4)}(\mu), \quad m = \frac{b-a}{2h} \Rightarrow$$

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

Wpływ błędu wyznaczania $f(x)$

$$f(x_i) = f^*(x_i) + e_i; \quad i = 0, 1, 2, \dots, 2m$$

$f^*(x)$ - wartość funkcji wynikająca z arytmetyki komputerowej
(błąd zaokrąglenia $|e_i| < \epsilon$)

Błąd wzoru złożonego:

$$\tau = \left| \frac{h}{3} [e_0 + 4 \sum_{j=1}^m e_{2j-1} + 2 \sum_{j=1}^{m-1} e_{2j} + e_{2m}] \right| \leq \frac{h}{3} [\epsilon + 4m\epsilon + 2(m+1)\epsilon + \epsilon] \approx 2mh\epsilon = \boxed{(b-a) \cdot \epsilon}$$

- nie zależy od h
- jeśli zwiększamy ilość punktów to $h \rightarrow 0$, błąd zaokrąglenia nie zależy od $h \rightarrow$ metoda stabilna
- nie mylić z błędem metody!!!!
- stabilność metody ze względu na błędy zaokrągleń reprezentacji \rightarrow cecha procedur całkowania numerycznego!
(nie ma jej np. różniczkowanie!)

Całkowanie adaptacyjne

Problem:

Wzory złożone posiadają węzły równoodległe, jednak funkcje mogą mieć w przedziale całkowania różny (przedziałami) przebieg.

Przykładowe przebiegi funkcji:

- wolnozmienne
- oscylacyjne

Rozwiązanie problemu:

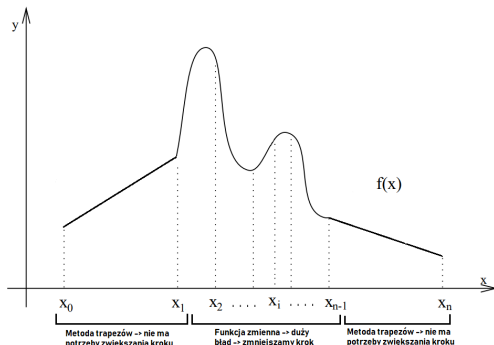
- Zastosowanie *procedury rozpoznającej obszar - dobór odpowiedniego kroku!*
- Uwzględnienie własności funkcji podcałkowej w obliczeniach

Dane:

- $f(x)$ - funkcja podcałkowa
- $[a, b]$ - przedział całkowania
- ϵ - dopuszczalny błąd

Idea metody:

Podział przedziału na fragmenty, dla których zastosowanie jednej z metod klasycznych dało dostatecznie dokładny wynik.



Cel:

Liczymy całkę $\int_a^b f(x)dx$, z dokładnością $\epsilon > 0$, $f \in C^4[a, b]$

1. $m = 1$, krok $h = \frac{b-a}{2}$

Korzystamy ze wzoru Simpsona:

$$\int_a^b f(x)dx = \underbrace{\frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + f(b)]}_{S(a,b)} - \underbrace{\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\mu)}_{\alpha}; \quad \mu \in (a, b)$$

$$2. \ m = 2, \text{ krok } \frac{h}{2} = \frac{b-a}{4}$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6} \underbrace{\left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(a+h) \right]}_{S(a, \frac{a+b}{2})} + \underbrace{\left[f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3}{2}h\right) + f(b) \right]}_{S(\frac{a+b}{2}, b)} -$$

$$\left(\frac{h}{2}\right)^4 \frac{b-a}{180} f^{(4)}(\mu^*), \ \mu^* \in (a, b)$$

przyjmijmy, że: $f^{(4)}(\mu) \approx f^{(4)}(\mu^*)$ oraz podstawiamy $b-a=2h$
 wtedy błąd dla (2.) $\frac{h^5}{16 \cdot 90} f^{(4)}(\mu)$

Z porównania (1.) i (2.) :

$$S(a, b) - \alpha \approx S(a, \frac{a+b}{2}) + S(\frac{a+b}{2}, b) - \frac{1}{16}\alpha \Rightarrow$$

$$\alpha = \frac{16}{15} \left[S(a, b) - S(a, \frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2}, b) \right]$$

Uzyskujemy:

$$|\int_a^b f(x)dx - S(a, \frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2}, b)| \approx \frac{1}{15}|s(a, b) - S(a, \frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2}, b)|$$

lewa strona to błąd przy zastosowaniu dokładniejszego sposobu całkowania - chcemy, żeby był on $< \epsilon$

Wtedy:

$$|S(a, b) - S(a, \frac{a+b}{2}) - S(\frac{a+b}{2}, b)| < 15\epsilon \quad (*)$$

Podsumowanie sposobu postępowania:

- gdy spełnione $(*) \Rightarrow S(a, \frac{a+b}{2}) + S(\frac{a+b}{2}, b)$
przybliża całkę $\int_a^b f(x)dx$ z dokładnością $\epsilon \rightarrow \text{STOP}$
- nie jest spełnione $(*)$ stosujemy procedurę oceny błędu do przedziałów $[a, \frac{a+b}{2}]$, $[\frac{a+b}{2}, b]$ w każdym z nich: $\epsilon' = \frac{\epsilon}{2}$
- połowienie podprzedziałów i wyznaczanie S
- ten, na którym odpowiednik $(*)$ nie jest spełniony znów połowimy, pozostałych gotowych nie zmieniamy

Wielomiany ortogonalne - uzupełnienie

Funkcja wagowa $w(x)$ na $[a, b]$:

- całkowalna na $[a, b]$
- $w(x) \geq 0 \quad \forall x \in [a, b]$, $w \neq 0 \quad \forall$ podprzedziału $[a, b]$

Definicja

Iloczyn skalarny:

$$\langle f|g \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b w(x) \cdot f(x) \cdot g(x) dx$$

Definicja

Wielomiany ortogonalne i znormalizowane

- f, g - ortogonalne, gdy $\langle f | g \rangle = 0$
- f - znormalizowane gdy $\langle f | f \rangle = 1$

Definicja

Zbiór ortonormalny - zbiór funkcji wzajemnie ortogonalnych i indywidualnie znormalizowanych

Definicja

Zbiór liniowo zależny i niezależny

Zbiór funkcji $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ jest liniowo niezależny na $[a, b]$:

$$(\forall x \in [a, b] : \sum_{i=0}^n c_i \varphi_i(x) = 0) \Rightarrow c_0 = c_1 = \dots = c_n = 0$$

w przeciwnym przypadku - zbiór ten jest liniowo zależny

Twierdzenie liniowa niezależność zbioru wielomianów stopnia $\leq n$

Założenia:

φ_j - wielomian stopnia j , $j = 0, 1, \dots, n$

Teza:

$\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ - jest liniowo niezależny na $\forall[a, b]$, $b > a$

Wniosek:

Zbiór wielomianów ortogonalnych $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ jest liniowo niezależny

Dowolny wielomian stopnia $k \leq n$ można przedstawić jako kombinację liniową takich wielomianów:

$$\exists \{c_j\}; Q_k(x) = \sum_{j=0}^k c_j \varphi_j(x)$$

Konstruowanie zbioru wielomianów ortogonalnych $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$:

$$[a, b], \quad w(x)$$

$$\varphi_0(x) = 1; \quad (\varphi_{-1}(x) = 0)$$

$$\varphi_{i+1}(x) = \left(x - \frac{\langle x \cdot \varphi_i | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle}\right) \cdot \varphi_i(x) - \frac{\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_{i-1} | \varphi_{i-1} \rangle} \varphi_{i-1}(x)$$

Twierdzenie o zerach wielomianów ortogonalnych

Założenia:

$\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ - zbiór wielomianów ortogonalnych na $[a, b]$, (względem $w(x)$)
 $\varphi_k(x)$, $k = 0, 1, \dots, n$

Teza:

- $\varphi_k(x)$, $k \geq 1$ ma k różnych zer i leżą one w (a, b)
- zera $\varphi_{j-1}(x)$ i $\varphi_j(x)$ występują na przemian

Ograniczenia kwadratur Newtona-Cotesa

Uwagi:

- węzły x_0, x_1, \dots, x_n równoodległe $\rightarrow h = \text{const.}$
 f - stabilizowane
- $\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$
 x_i - zadane
 a_i - wyznaczone przez dobór wielomianu stopnia $\leq n$

Podstawowe cechy kwadratur Gaussa

Uwagi:

- możliwość doboru a_i i x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ czyli $2n$ parametrów
- za pomocą $2n$ parametrów można zdefiniować wielomian stopnia $2n-1$,
- tak więc można uzyskać stopień dokładności $2n - 1$ (w przypadku n -punktowej kwadratury)
- szersza klasa funkcji podcałkowych (w sposób naturalny):

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n a_i f(x_i)$$

- $w(x)$ - funkcja wążąca \rightarrow może zawierać w sobie całkowalną osobliwość

Podstawowe twierdzenie kwadratur Gaussa

Odcięte x_i n -punktowej kwadratury Gaussa z funkcją ważącą $w(x)$ w $[a, b]$ są zerami wielomianu ortogonalnego $\varphi_n(x)$ dla tego samego przedziału i tej samej funkcji ważącej.

Jeśli $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ - zbiór wielomianów ortogonalnych w $[a, b]$ to $\varphi_n(x)$ - ma n różnych zer $x_1, x_2, \dots, x_n \in (a, b)$ Możemy znaleźć wielomian interpolujący $f(x)$ w tych węzłach:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} + \frac{f^{(n)}(\eta(x))}{n!} \prod_{i=1}^n (x - x_i)$$

i policzyć całkę jako:

$$(*) \int_a^b w(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n a_i f(x_i), \quad a_i = \int_a^b w(x) L_i(x) dx$$

Całka jest na pewno dokładna, gdy $f(x)$ jest wielomian stopnia $\leq n - 1$, bo wtedy $f^{(n)}(\eta) = 0$

Twierdzenie o stopniu dokładności kwadratur Gaussa

Twierdzenie o stopniu dokładności kwadratury Gaussa

Teza:

Kwadratura ma stopień dokładności $2n - 1$ (dla n -punktowej kwadratury) ; t.j. dokładna dla wielomianu:

$$P(x) = Q(x) \cdot \varphi_n(x) + R(x) ; \quad Q, R - \text{stopnia} < n.$$

Uwaga: każdy wielomian stopnia $2n - 1$ można przedstawić w takiej postaci

Twierdzenie o stopniu dokładności kwadratury Gaussa

Dowód:

$$(**) Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1} d_i \varphi_i(x)$$

$$\int_a^b w(x) P(x) dx = \underbrace{\int_a^b w(x) \overbrace{Q(x)}^{wstaw. (**)} \varphi_n(x) dx}_{(***)} + \int_a^b w(x) R(x) dx$$

$$(***) = \sum_{i=1}^{n-1} d_i \int_a^b w(x) \varphi_i \varphi_n(x) dx = 0 \quad (i < n)$$

Twierdzenie stopień dokładności kwadratury Gaussa

Czyli:

$$\int_a^b w(x) \underbrace{P(x)}_{2n-1} dx = \int_a^b w(x) \underbrace{R(x)}_{<n} dx = \sum_{i=1}^n a_i R_i + 0$$

R_i stopnia $< n \rightarrow$ kwadratura ma przynajmniej taki stopień dokładności.

Z drugiej strony: $x_i, i = 1, 2, \dots, n$ – pierwiastki $\varphi_n(x)$ tzn.

$$P(x_i) = Q(x_i) \cdot \varphi_n(x_i) + R(x_i) = 0 + R(x_i) = R(x_i)$$

co oznacza, że kwadratura jest dokładna dla $P_{2n-1}(x)$:

$$\int_a^b w(x) P_{2n-1}(x) dx = \sum_{i=1}^n a_i P(x_i)$$

Wyznaczanie wag a_1, a_2, \dots, a_n

Znając odcięte $x_1, x_2, \dots, x_n \rightarrow$ wagi wyznaczamy z układu równań:

$$\begin{bmatrix} \varphi_0(x_1) & \dots & \varphi_0(x_n) \\ \vdots & & \\ \varphi_{n-2}(x_1) & \dots & \varphi_{n-2}(x_n) \\ \varphi_{n-1}(x_1) & \dots & \varphi_{n-1}(x_n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_a^b w(x) \varphi_0(x) dx \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Uwaga: Zera w wektorze z prawej strony powyższego równania - bo $\varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ są ortogonalne do $\varphi_0(x)$ - stałej > 0 czyli : dla $i = 1, \dots, n-1$ $\int_a^b w(x) \varphi_i(x) dx = \frac{1}{\varphi_0} \varphi_0 \int_a^b w(x) \varphi_i(x) dx = \int_a^b w(x) \varphi_0(x) \varphi_i(x) dx = 0$

Praktyczne postacie kwadratur Gaussa...

| Kwadratura Gaussa- | (a,b) | w(x) | $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ |
|--------------------|---------------------|--------------------------|--|
| -Legendre'a | (-1,1) | 1 | $P_0(x) = 1, P_1(x) = x$ $(i+1)P_{i+1} = (2i+1)xP_i - iP_{i-1}$ |
| -Chebyshev'a | (-1,1) | $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ | $T_0(x) = 1, T_1(x) = x$ $T_{i+1} = 2xT_i - T_{i-1}$ |
| -Laguerre'a | (0, ∞) | $x^c e^{-x}$ | $L_0(x) = 1, L_1(x) = 1 - x$ $(i+1)L_{i+1}^c = (-x + 2i + c + 1)L_i^c - (i+c)L_{i-1}^c$ |
| -Hermite'a | $(-\infty, \infty)$ | e^{-x^2} | $H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x$ $H_{i+1} = 2xH_i - 2iH_{i-1}$ |

Biblioteki do całkowania numerycznego

Biblioteki:

- QUADPACK
 - Klasyczny pakiet, zawiera procedury do obliczania typowych całek jednowymiarowych w języku Fortran
 - <http://www.netlib.org/quadpack/>
- GSL - GNU Scientific Library
 - Reimplementacja metod całkowania z pakietu QUADPACK dla języka C
 - <https://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/integration.html>
- Inne pakiety:
 - Python:
<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/tutorial/integrate.html>
 - Julia: <https://github.com/JuliaMath/QuadGK.jl>