

II.
RÓŻNICZKOWANIE
I CAŁKOWANIE NUMERYCZNE

Janusz Adamowski

1 Różniczkowanie numeryczne

Rozważmy funkcję $f(x)$ określoną na sieci równoodległych węzłów. Funkcja $f(x)$ może być dana za pomocą wzoru analitycznego lub za pomocą tabeli wartości. Definiujemy sieć węzłów

$$x_n = nh, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1)$$

oraz odpowiadających im wartości funkcji

$$f_n = f(x_n) . \quad (2)$$

Naszym celem jest wyznaczenie pierwszej pochodnej

$$f' = f'(0) \quad (3)$$

za pomocą wartości f_n .

Pochodną w dowolnym punkcie $x = x_n$ znajdziemy dokonując translacji otrzymanego wyniku dla $x = 0$ o wartość x_n . Oznacza to, że dokonujemy zmiany zmiennych:

$$x \longrightarrow x' = x + x_n .$$

Rozwijamy funkcję $f(x)$ w szereg Taylora wokół punktu $x = 0$.

$$f(x) = f_0 + xf' + \frac{x^2}{2!}f'' + \frac{x^3}{3!}f''' + \frac{x^4}{4!}f^{iv} + \frac{x^5}{5!}f^v + \dots \quad (4)$$

przy czym wszystkie pochodne obliczane są w punkcie $x = 0$.

Na podstawie wzoru (4) obliczamy

$$f_{\pm 1} = f(\pm h) = f_0 \pm hf' + \frac{h^2}{2}f'' \pm \frac{h^3}{6}f''' + \frac{h^4}{4!}f^{iv} \pm \frac{h^5}{5!}f^v + \mathcal{O}(h^6) \quad (5)$$

oraz

$$f_{\pm 2} = f(\pm 2h) = f_0 \pm 2hf' + 2h^2f'' \pm \frac{4h^3}{3}f''' + \frac{2h^4}{3}f^{iv} \pm \frac{h^5}{5!}f^v + \mathcal{O}(h^6) . \quad (6)$$

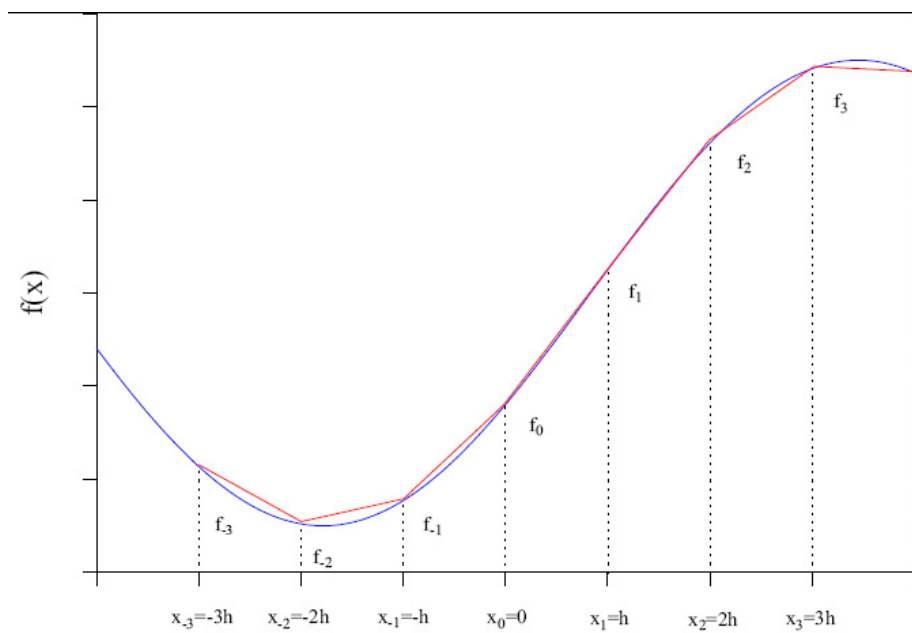
W powyższych wzorach $\mathcal{O}(h^6)$ oznacza wyrazy rzędu h^6 i rzędów wyższych.

Przy oszacowaniu rzędu wielkości kolejnych wyrazów rozwinięcia Taylora zakładamy, że funkcja $f(x)$ i wszystkie jej pochodne są wielkościami tego samego rzędu. Zgodnie z wzorem (5) otrzymujemy

$$f_{+1} - f_{-1} = 2hf' + \frac{h^3}{3}f''' + \mathcal{O}(h^5) , \quad (7)$$

a stąd

$$f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f''' + \mathcal{O}(h^4) . \quad (8)$$



Ze wzoru (8) wynika **trójpunktowa aproksymacja pierwszej pochodnej**

$$f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) . \quad (9)$$

Jeżeli w przedziale $[-h, h]$ funkcja $f(x)$ jest wielomianem drugiego stopnia, to wzór (9) (bez drugiego wyrazu po prawej stronie) jest dokładny. Wzór ten wykorzystuje **symetryczną różnicę** wartości funkcji f wokół punktu $x = 0$ (trzy punkty na osi x).

W celu oszacowania pierwszej pochodnej funkcji $f(x)$ można również użyć innych różnic, a mianowicie **różnicy "do przodu" (przedniej)**

$$f' = \frac{f_1 - f_0}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (10)$$

lub **różnicy "do tyłu" (tylnej)**

$$f' = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (11)$$

Wzory (10) i (11) są **dwupunktowymi aproksymacjami pierwszej pochodnej**.

Błąd popełniany przy użyciu dwupunktowych wzorów (10) i (11) jest o jeden rząd wielkości większy niż we wzorze (9). Wzory (10) i (11) opierają się na liniowej interpolacji funkcji $f(x)$ w podprzedziałach $[0, h]$ i $[-h, 0]$.

Dokładność obliczania pierwszej pochodnej można poprawić używając wartości funkcji $f(x)$ w punktach bardziej oddalonych od punktu $x = 0$. Możemy w tym celu zastosować rozwinięcie (6), zgodnie z którym

$$f_2 - f_{-2} = 4hf' + \frac{8h^3}{3}f''' + \mathcal{O}(h^5). \quad (12)$$

Uwaga

Przy szacowaniu błędu we wzorze (12) korzystamy z faktu, że pomnożenie przez 2^n nie zmienia rzędu wielkości w rozwinięciu Taylora (4), czyli

$$\mathcal{O}[(2h)^5] \sim \frac{2^5}{5!}h^5 \sim \mathcal{O}(h^5).$$

Wynika to z następującego przejścia granicznego:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2^n}{n!} \rightarrow 0.$$

Wzór (12) pozwala na obliczenie poprawki potrzebnej do oszacowania pierwszej pochodnej

$$\frac{h^3}{3}f''' = f_1 - f_{-1} - 2hf' + \mathcal{O}(h^5). \quad (13)$$

Podstawienie (13) do (8) prowadzi do

$$f' = \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) + \mathcal{O}(h^4). \quad (14)$$

Otrzymujemy **pięciopunktowy wzór na pierwszą pochodną (pięciopunktową aproksymację pierwszej pochodnej)**, który jest dokładniejszy o dwa rzędy wielkości od trójpunktowego wzoru (9).

Wyższe pochodne obliczamy podobnie stosując odpowiednie kombinacje liniowe wzorów (5) i (6). Na przykład dodanie stronami wzorów (5) prowadzi do

$$f_1 + f_{-1} = 2f_0 + h^2f'' + \mathcal{O}(h^4). \quad (15)$$

Otrzymujemy stąd

$$f'' = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (16)$$

Jest to **trójpunktowy wzór na drugą pochodną**, czyli przybliżenie drugiej pochodnej z dokładnością do h^2 .

Bardzo dużą dokładność przy numerycznym obliczaniu drugiej pochodnej funkcji $f(x)$ można uzyskać stosując rozwinięcie

$$f'' = \frac{1}{h^2} \sum_{n=-N}^N c_n f_n + \mathcal{O}(h^{2N}), \quad (17)$$

w którym wartości współczynników podaje tabela wzięta z publikacji: B. Fornberg & D.M. Sloan, Acta Numerica '94 (ed. A. Iserles, Cambridge University Press, 1994).

Wartości współczynników rozwinięcia we wzorze (17) podane są w tabeli 2.1.

Tabela 2.1. Wartości współczynników rozwinięcia we wzorze (17) dla różnej liczby wyrazów określonej przez N .

N	c_0	$c_{\pm 1}$	$c_{\pm 2}$	$c_{\pm 3}$	$c_{\pm 4}$	$c_{\pm 5}$	$c_{\pm 6}$
1	-2	1					
2	-5/2	4/3	-1/12				
3	-49/18	3/2	-2/20	1/90			
4	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560		
5	-5269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1008	1/3150	
6	-5369/1800	12/7	-15/56	10/189	-1/112	2/1925	-1/16632

Uwaga Podany powyżej sposób przybliżania pochodnych, wykorzystujący rozwinięcie w szereg Taylora (4), można uogólnić na pochodne wyższych rzędów. Ponadto możemy otrzymywać dokładniejsze przybliżenia pochodnych pierwszej i drugiej.

2 Całkowanie numeryczne za pomocą metod klasycznych

Wstęp

Szukamy wartości całki oznaczonej funkcji $f(x)$ w przedziale $[a, b]$, czyli

$$I = \int_a^b f(x) dx. \quad (18)$$

W przedziale $[a, b]$ możemy zdefiniować sieć jednakowo odległych węzłów $x_n = a + nh$, gdzie $n = 0, 1, 2, \dots$, przy czym

$$h = \frac{b - a}{N}, \quad (19)$$

a N jest liczbą całkowitą. Wygodnie jest przyjąć, że N jest liczbą parzystą.

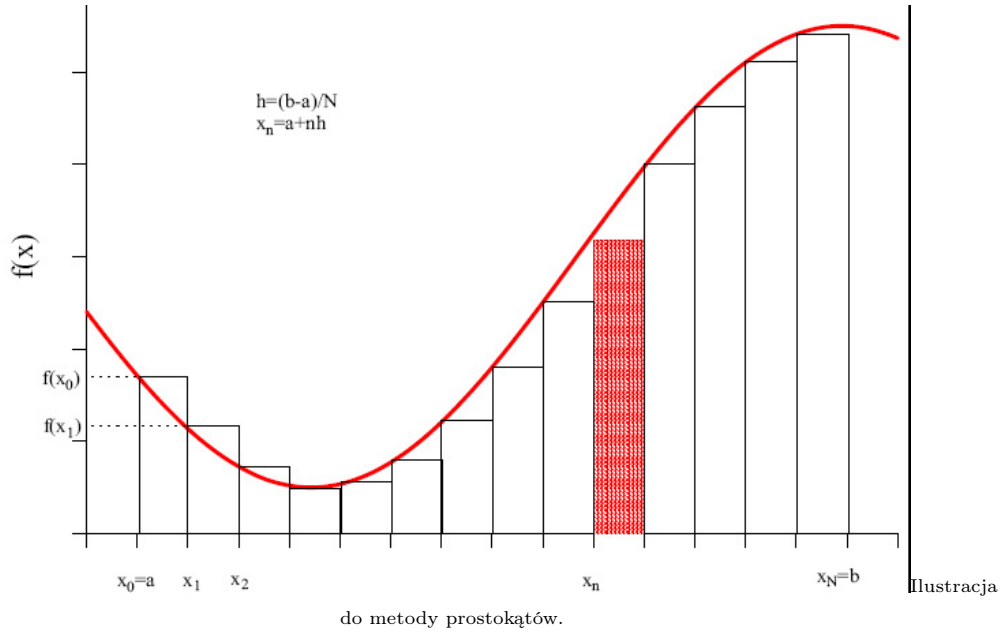
Przy wyprowadzaniu większości metod numerycznego całkowania korzystamy z addytywności operacji całkowania

$$I = \left(\int_a^{a+2h} + \int_{a+2h}^{a+4h} \dots + \int_{b-2h}^b \right) f(x) dx \quad (20)$$

W celu numerycznego obliczenia całki I w skończonym przedziale $[a, b]$ wystarczy znaleźć przybliżoną formułę na całkę w podprzedziale $[0, 2h]$ lub $[-h, h]$, a następnie zastosować wzór (20). W przypadku zastosowania metody prostokątów stosujemy podział przedziału $[a, b]$ na podprzedziały o szerokości h .

2.1 Metoda prostokątów

Metoda prostokątów opiera się na oszacowaniu pola pod krzywą $y = f(x)$ za pomocą prostokątów.



Startujemy z własności addytywności całkowania, czyli

$$I = \sum_{n=0}^{N-1} i_n . \quad (21)$$

Zgodnie z metodą prostokątów obliczamy oszacowanie całki I jako sumę pól prostokątów, czyli całkę i_n przybliżamy za pomocą wzoru

$$i_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x) dx \simeq f(x_n)h + \mathcal{O}(h^2) = f_n h + \mathcal{O}(h^2) . \quad (22)$$

Ostatecznie

$$I \simeq h \sum_{n=0}^{N-1} f_n + \mathcal{O}(h) . \quad (23)$$

W metodzie prostokątów funkcję $f(x)$ przybliżamy w przedziale $[a, b]$ za pomocą funkcji przedziałami stałej równej $f(x_n)$ w każdym podprzedziale $[x_n, x_{n+1}]$.

2.2 Metoda Newtona-Cotesa (metoda trapezów)

Zgodnie z tą metodą funkcję podcałkową $f(x)$ przybliżamy funkcją za pomocą funkcji liniowej w podprzedziałach $[-h, 0]$ i $[0, h]$ stosując przy tym dwupunktowe aproksymacje pierwszej pochodnej (10) i (11).

$$f(x) = f_0 + \frac{f_0 - f_{-1}}{h} x + \mathcal{O}(x^2) , \quad x \in [-h, 0] , \quad (24)$$

$$f(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_0}{h}x + \mathcal{O}(x^2), \quad x \in [0, h]. \quad (25)$$

Następnie obliczamy całki po podprzedziałach $[-h, 0]$ i $[0, h]$, czyli

$$i_1 = \int_{-h}^0 f(x)dx = f_0 h + \frac{f_{-1} - f_0}{h} \frac{h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3) \quad (26)$$

oraz

$$i_2 = \int_0^h f(x)dx = f_0 h + \frac{f_1 - f_0}{h} \frac{h^2}{2} + \mathcal{O}(h^3). \quad (27)$$

Całkę po podprzedziale $[-h, h]$

$$i = \int_{-h}^h f(x)dx \quad (28)$$

obliczamy jako sumę całek

$$i = i_1 + i_2. \quad (29)$$

Otrzymujemy stąd **wzór trapezów** w postaci

$$i = \frac{h}{2}(f_{-1} + 2f_0 + f_1) + \mathcal{O}(h^3) \quad (30)$$

Zauważmy, że wzór (30) jest wzorem na sumę pól trapezów. Pole j -tego trapezu wyrażone jest wzorem

$$A_j = \frac{1}{2}(\text{wysokość}) \times (\text{suma podstaw}).$$

Wzór (30) można otrzymać z bezpośredniego sumowania pól trapezów $A_1 + A_2$, przy czym

$$A_1 = \frac{h}{2}(f_{-1} + f_0), \quad (31)$$

$$A_2 = \frac{h}{2}(f_0 + f_1). \quad (32)$$

2.3 Metoda Simpsona (metoda parabol)

Przybliżamy funkcję $f(x)$ za pomocą funkcji kwadratowej (paraboli). Stosujemy trójpunktowe aproksymacje pochodnych pierwszej (9) i drugiej (16).

$$f(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}x + \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}x^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (33)$$

dla przedziału $|x| < h$.

Zauważmy, że w tym przedziale wartości x maksymalny błąd popełniony w rozwinięciu (33) jest rzędu $\mathcal{O}(h^2)x \simeq \mathcal{O}(x^3)$.

Obliczamy całkę

$$i = \int_{-h}^h f(x) dx$$

podstawiając za $f(x)$ rozwinięcie (33) i otrzymujemy

$$i = \frac{h}{3}(f_1 + 4f_0 + f_{-1}) + \mathcal{O}(h^5) . \quad (34)$$

Jest to **wzór Simpsona (parabol)**, który jest dokładniejszy o dwa rzędy wielkości od wzoru trapezów.

Całkę po przedziale $[a, b]$ liczymy metodą Simpsona zgodnie z (20) następująco:

$$\begin{aligned} I &= \frac{h}{3} [f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) \\ &\quad + 2f(a+4h) + \dots + 2f(b-2h) + 4f(b-h) \\ &\quad + f(b)] . \end{aligned} \quad (35)$$

2.4 Metody Gaussa

Metody te opierają się na aproksymacji funkcji podcałkowej $f(x)$ za pomocą wielomianu odpowiedniego stopnia, a następnie wykonaniu analitycznego całkowania tego wielomianu.

W obliczeniach stosowane są najczęściej metody Gaussa w wersji zmodyfikowanej, zgodnie z którą funkcja podcałkowa ma postać iloczynu $w(x)f(x)$, gdzie $w(x)$ jest pewną znaną funkcją, tzw. funkcją wagową. Funkcja wagowa może być wybrana tak, aby usunąć osobliwości funkcji podcałkowej.

Ogólny wzór na całkę obliczoną metodą Gaussa ma postać

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \simeq \sum_{j=1}^N w_j f(x_j) , \quad (36)$$

przy czym $\{w_j\}$ jest zbiorem wag, $\{x_j\}$ jest zbiorem współrzędnych, natomiast $j = 1, \dots, N$.

Jeżeli funkcja $f(x)$ jest wielomianem stopnia N , to wzór (36) jest dokładny.

Dla dowolnej funkcji $f(x)$ wzór (36) podaje na ogół bardzo dokładną aproksymację całki.

Rozmaitość metod Gaussa bierze się z użycia różnych wielomianów ortogonalnych do aproksymacji funkcji $f(x)$. Np. mamy do dyspozycji metody Gaussa-Legendre'a, Gaussa-Laguerre'a, Gaussa-Hermite'a, itd.

We wzorze (36) wartości wag $\{w_j\}$ i położeń $\{x_j\}$ zależą od wielomianu wybranego do aproksymacji funkcji i są zwykle zadane w procedurze numerycznej. Stopień wielomianu N jest wybierany przez użytkownika. Określa on dokładność przybliżenia.

Programy z zastosowaniem metod Gaussa dostępne są w większości bibliotek numerycznych.

2.5 Szczególne problemy przy całkowaniu numerycznym

(A) Nieskończona granica całkowania

Naszym zadaniem jest numeryczne obliczenie całki

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx . \quad (37)$$

Do obliczenia całki (37) nie możemy zastosować w sposób bezpośredni podziału przedziału całkowania na skończoną sieć węzłów.

Możemy natomiast zastosować jeden z następujących sposobów postępowania.

(1) Podział przedziału całkowania i zmiana zmiennej

Przekształcamy całkę (37) następująco:

$$I = \left(\int_0^c + \int_c^{\infty} \right) f(x) dx . \quad (38)$$

W drugiej całce podstawiamy $t = 1/x$, przy czym $0 \leq t \leq 1/c$. Otrzymujemy stąd

$$I = \int_0^c f(x) dx + \int_0^{1/c} \frac{dx}{x^2} f\left(\frac{1}{x}\right) . \quad (39)$$

W ten sposób unikamy nieskończoności w górnej granicy całkowania.

(2) Zmiana zmiennej przekształcająca nieskończony przedział całkowania w przedział skończony

Dokonujemy podstawienia

$$x = \frac{t}{1-t} , \quad (40)$$

które pozwala nam na przekształcenie całki (37) do postaci

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 \frac{dt}{(1-t)^2} f\left(\frac{t}{1-t}\right) . \quad (41)$$

(B) Osobliwość w funkcji podcałkowej

Metodę postępowania w tym przypadku pokażemy na przykładzie.

Powiedzmy, że naszym zadaniem jest numeryczne obliczenie całki

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (42)$$

z funkcji $f(x)$, która posiada osobliwość typu $f(x) \sim 1/\sqrt{x}$ dla $x \rightarrow 0$.

Zapisujemy całkę (42) w postaci sumy całek

$$I = \int_0^\varepsilon f(x) dx + \int_\varepsilon^1 f(x) dx \quad (43)$$

Druga całka we wzorze (43) jest regularna i możemy ją obliczyć numerycznie. Pierwszą całkę obliczamy analitycznie jako

$$\int_0^\varepsilon \frac{dx}{\sqrt{x}} = 2\sqrt{\varepsilon} . \quad (44)$$

Odpowiedni dobór wartości ε (metodą prób i błędów) zapewnia żadaną dokładność.