11. Numerikus integrálás

11.1. Feladat

Interpolációs típusú-e az alábbi kvadratúra formula? Miért?

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{2} \left[f\left(\frac{1}{3}\right) + f\left(\frac{2}{3}\right) \right]$$

Két lehetséges megoldás közül választhatunk.

(i) Az interpolációs kvadratúra formula definícióját felhasználva ellenőrizzük, hogy a formulában szereplő A_k együtthatókra teljesül-e bármely k esetén az

$$A_k = \int_0^1 \ell_k(x) \mathrm{d}x$$

A feladat által megadott kvadratúra formula

$$A_0 \cdot f(x_0) + A_1 \cdot f(x_1)$$

alakú, ahol

$$x_0 = \frac{1}{3}, \quad A_0 = \frac{1}{2},$$

 $x_1 = \frac{2}{3}, \quad A_1 = \frac{1}{2}.$

Tehát az k=0,1 esetekben kell ellenőriznünk, hogy az A_k súlyok a megfelelő ℓ_k Lagrange-alappolinomok kijelölt intervallumon vett integráljai-e. A k=0 eset ellenőrzéséhez először is írjuk fel ℓ_0 -t:

$$\ell_0(x) = \frac{x - \frac{2}{3}}{\frac{1}{3} - \frac{2}{3}} = (-3) \cdot \left(x - \frac{2}{3}\right),$$

melyből

$$\int_0^1 \ell_0(x) \, dx = (-3) \int_0^1 x - \frac{2}{3} \, dx = (-3) \left[\frac{x^2}{2} - \frac{2}{3} x \right]_0^1 = (-3) \cdot \left(-\frac{1}{6} \right) = \frac{1}{2} = A_0,$$

ezért egyelőre nem sérült az interpolációs kvadratúra tulajdonság. Vizsgáljuk meg $A_1\text{-et}$ is. Most

$$\ell_1(x) = \frac{x - \frac{1}{3}}{\frac{2}{3} - \frac{1}{3}} = 3 \cdot \left(x - \frac{1}{3}\right),$$

melyből

$$\int_0^1 \ell_1(x) \, dx = 3 \cdot \int_0^1 \left(x - \frac{1}{3} \right) dx = 3 \cdot \left[\frac{x^2}{2} - \frac{1}{3} x \right]_0^1 = 3 \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{2} = A_1,$$

vagyis a megadott kvadratúra formula interpolációs típusú.

(ii) A pontossági tételt is alkalmazhatjuk annak eldöntésére, hogy egy kvadratúra formula interpolációs típúsú-e. Mivel a kvadratúraformulánk két alappontra támaszkodik, akkor és csak akkor interpolációs, ha az alappontok, súlyok és momentumok között fennáll a következő összefüggés:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ x_0 & x_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \mu_1 \end{bmatrix}.$$

Számítsuk ki a momentumokat:

$$\mu_0 = \int_0^1 1 \, dx = \left[x \right]_0^1 = 1,$$

$$\mu_1 = \int_0^1 x \, dx = \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^1 = \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \right) = \frac{1}{2}.$$

Így könnyen ellenőrizhető, hogy a LER teljesül:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad \checkmark$$

Vagyis a megadott formula interpolációs típusú.

11.2. Feladat

Interpolációs típusú-e az alábbi kvadratúra formula? Miért?

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx \frac{1}{4} \left[f(-1) + 2 \cdot f(0) + f(1) \right]$$

Ismét vizsgáljuk meg a megadott kvadratúra formulát mindkét módszerünk segítségével.

(i) Először is nézzük meg, hogy a definíció alapján interpolációs típusú-e az adott kvadratúra formula. A formulát három alappontra írtuk fel, és

$$\frac{1}{4}\left[f(-1) + 2 \cdot f(0) + f(1)\right] = \frac{1}{4} \cdot f(-1) + \frac{1}{2} \cdot f(0) + \frac{1}{4} \cdot f(1)$$

alakú, melyből látszik, hogy

$$x_0 = -1,$$
 $A_0 = \frac{1}{4},$
 $x_1 = 0,$ $A_1 = \frac{1}{2},$
 $x_2 = 1,$ $A_2 = \frac{1}{4}.$

Le kell ellenőrznünk, hogy $A_k = \int_{-1}^1 \ell_k(x) dx$ teljesül-e. Kezdjük az ellenőrzést ℓ_0 -lal:

$$\ell_0(x) = \frac{x-0}{-1-0} \cdot \frac{x-1}{-1-1} = -x \cdot \frac{x-1}{-2} = \frac{x^2}{2} - \frac{x}{2}.$$

Innen

$$\int_{-1}^{1} \ell_0(x) \, dx = \int_{-1}^{1} \frac{x^2}{2} - \frac{x}{2} \, dx =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} x^2 - x \, dx = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} \right]_{-1}^{1} = \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} = \frac{1}{3} \neq \frac{1}{4} = A_0,$$

vagyis a kvadratúra formula nem interpolációs típusú.

(ii) Most oldjuk meg a feladatot a pontossági tétel alkalmazásával. A kvadratúra formulában három alappont szerepel, így a pontosságot a legfeljebb másodfokú polinomokra, \mathcal{P}_2 -re kell ellenőriznünk. Ehhez elegendő az $1, x, x^2$ bázisra megmutatni a pontosságot, ehhez pedig elő kell állítanunk a momentumokat:

$$\mu_0 = \int_{-1}^{1} 1 \, \mathrm{d}x = [x]_{-1}^{1} = 2,$$

azonban

$$\sum_{k=0}^{2} 1 \cdot A_k = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = 1 \neq 2 = \mu_0,$$

vagyis a pontosság már az 1 bázisfüggvényre sem teljesül, így a kvadratúra formula nem lehet interpolációs típusú, nem is érdemes tovább számolnunk.

11.1. Megjegyzés

Érdemes megjegyezni, hogy a nulladik momentumra vonatkozó összefüggés egy könnyen ellenőrizhető szükséges feltételt ad egy kvadratúraformula interpolációs tulajdonságára:

$$\sum_{k=0}^{n} A_k \cdot 1 = \int_{a}^{b} 1 \, dx = b - a \iff \sum_{k=0}^{n} A_k = b - a,$$

vagyis ha a formula interpolációs, akkor a súlyok összege éppen az intervallum hosszával egyenlő. Azonban felhívjuk a figyelmet arra, hogy ez a feltétel szükséges és nem elégséges.

11.2. Megjegyzés

Jelen fejezetben a kvadratúraformula alappontjait adottnak feltételezzük, csak a súlyok meghatározásával törődünk, tehát a 2n+2 szabad paraméterből csak n+1 szabad paramétert használunk fel. A paraméterek optimális beállításával elérhető, hogy a szintén n+1 szabad paraméter (együttható) által meghatározott legfeljebb n-edfokú polinomok mindegyikére pontos legyen egy formula. A pontosság ilyen módon tovább nem növelhető. Ha viszont egy kvadratúraformulában az alappontokat és a súlyokat is változóként kezeljük, akkor összesen 2n+2 szabadsági fokunk van, ezért elvileg akár 2n+1 fokú polinomokra pontos kvadratúrát is szerkeszthetünk n+1 alappont és súly használatával! Ez az állítás valóban igaz, az elméletileg elérhető legmagasabb 2n+1 fokszámig pontos kvadratúraformulák az úgynevezett Gauss-kvadratúrák, melyeket ebben a félévben nem tárgyalunk. Például érdemes ellenőrizni, hogy az

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

mindössze két alappontra támaszkodó kvadratúraformula pontos minden legfeljebb harmadfokú polinom esetén.

11.3. Feladat

Adjuk meg az

$$\int_1^2 \frac{1}{x} \, \mathrm{d}x = \ln(2)$$

határozott integrál értékének (racionális) közelítését

- (a) érintő-
- (b) trapéz- és
- (c) Simpson-

formula segítségével. Minden esetben adjunk hibabecslést!

(a) Az érintőformulát az

$$E(f) = (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right)$$

alakban írhatjuk fel. Jelen esetben $f(x) = \frac{1}{x}$, illetve a = 1 és b = 2, így

$$E(f) = (2-1) \cdot \frac{1}{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}.$$

Az érintőformulára vonatkozó hibabecslést az

$$\left| \int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x - E(f) \right| \le \frac{M_2}{24} \cdot (b - a)^3$$

formulával adhatjuk meg, ahol $M_2:=\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|$. Az alkalmazásához szükségünk van M_2 értékére:

$$f(x) = \frac{1}{x} = x^{-1},$$

$$f'(x) = -x^{-2},$$

$$f''(x) = 2x^{-3} = \frac{2}{x^3} \implies |f''(x)| \le 2 =: M_2 \quad (x \in [1, 2]).$$

Ez utóbbit és a feladatból kapott további paramétereket behelyettesítve a hibabecslésbe:

$$\left| \int_{1}^{2} \frac{1}{x} \, dx - \frac{2}{3} \right| \le \frac{2}{24} \cdot 1^{3} = \frac{1}{12}.$$

(b) Vizsgáljuk most a trapézformula segítségével kapott közelítést. A trapézformulát a

$$T(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$$

képlettel adjuk meg. A feladatra alkalmazva:

$$T\left(f\right) = \frac{2-1}{2}\left(\frac{1}{1} + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{4}.$$

A trapézformulára vonatkozó hibabecslés:

$$\left| \int_{a}^{b} f(x) \, dx - T(f) \right| \le \frac{M_2}{12} \cdot (b - a)^3.$$

Az érintőformula hibabecslésénél már kiszámítottuk M_2 értékét, így fel tudjuk írni a konkrét hibabecslésünket:

$$\left| \int_{1}^{2} \frac{1}{x} \, dx - \frac{3}{4} \right| \le \frac{2}{12} \cdot 1^{3} = \frac{1}{6}.$$

(c) Végül adjuk meg az integrál racionális közelítését Simpson-formula segítségével. A Simpson-formulát az

$$S(f) = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

összefüggéssel írhatjuk fel. A konkrét feladatra vonatkoztatva:

$$S(f) = \frac{2-1}{6} \left(\frac{1}{1} + 4 \cdot \frac{1}{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{6} \left(1 + \frac{8}{3} + \frac{1}{2} \right) = \frac{25}{36}.$$

A Simpson-formulához tartozó hibabecslés a következő:

$$\left| \int_{a}^{b} f(x) \, dx - S(f) \right| \le \frac{M_4}{4! \cdot 5!} (b - a)^5.$$

A hibabecslés felírásához számítsuk ki $M_4\text{-}\mathrm{et}\colon$

$$f'''(x) = -6x^{-4}$$

 $f^{(4)}(x) = 24x^{-5} = \frac{24}{x^5} \to \left| \frac{24}{x^5} \right| \le 24 = M_4 \quad (x \in [1, 2]).$

Ez alapján tehát

$$\left| \int_{1}^{2} \frac{1}{x} \, dx - \frac{25}{36} \right| \le \frac{24}{4! \cdot 5!} 1^{5} = \frac{1}{5!} = \frac{1}{120}.$$

11.4. Feladat

Számítsuk ki az

$$\int_{-1}^{1} 2^{-x} \, \mathrm{d}x$$

határozott integrál közelítését

- (a) trapéz- és
- (b) Simpson-formulával!

Hány függvénykiértékelést kell végeznünk, ha összetett formulák alkalmazásával szeretnénk elérni a 10^{-3} pontosságot?

(a) Először is közelítsük az integrál értékét trapézformulával:

$$T(f) = \frac{1 - (-1)}{2} (2^{-(-1)} + 2^{-1}) = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2}.$$

Írjuk fel a közelítéshez tartozó hibabecslést. Eh
hez szükségünk lesz a hibaformulában szereplő M_2 értékére:

$$f(x) = 2^{-x},$$

$$f'(x) = -\ln(2) \cdot 2^{-x},$$

$$f''(x) = (\ln(2))^2 \cdot 2^{-x}, \implies |(\ln(2))^2 \cdot 2^{-x}| \le (\ln(2))^2 \cdot 2^1 = M_2 \quad (x \in [-1, 1]).$$

Innen a hibabecslés

$$\left| \int_{-1}^{1} 2^{-x} dx - \frac{5}{2} \right| \le \frac{(\ln(2))^2 \cdot 2}{12} \cdot 2^3 = \frac{4}{3} \cdot \ln^2(2) \approx 0.6406.$$

Mivel ez a kívánt 10^{-3} -os pontosságnál lényegesen rosszabb, alkamazzunk összetett trapézformulát. Az összetett trapézformulára vonatkozó hibabecslés:

$$\left| \int_{-1}^{1} 2^{-x} \, dx - T_m(f) \right| \le \left(\frac{M_2}{12} \cdot (b - a)^3 \right) \cdot \frac{1}{m^2},$$

ahol

$$T_m(f) = \frac{b-a}{2m} \left[f(x_0) + 2f(x_1) + \ldots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m) \right]$$

az összetett trapézformula. Célunk most meghatározni azt a legkisebb pozitív egész m számot, melyre az előző egyenlőtlenség jobb oldala kisebb vagy egyenlő lesz, mint 10^{-3} . Vegyük észre azonban, hogy az összetett formula hibabecslésében felhasználhatjuk az egyetlen formulára adott hibabecslésünket, ennek segítségével:

$$\left(\frac{4}{3} \cdot \ln^2(2)\right) \cdot \frac{1}{m^2} \le 10^{-3}.$$

Átrendezve az egyenlőtlenséget kapjuk, hogy

$$\frac{4}{3} \cdot \ln^2(2) \cdot 10^3 \le m^2$$

$$\sqrt{\frac{4}{3} \cdot \ln^2(2) \cdot 10^3} \approx 25,310 \le m \implies m \ge 26.$$

(b) Először írjuk fel az integrál közelítését Simpson-formula segítségével:

$$S(f) = \frac{1 - (-1)}{6} \left(2^{1} + 4 \cdot 2^{0} + 2^{-1} \right) = \frac{13}{6}.$$

Írjuk fel a közelítéshez tartozó hibabecslést is. Ehhez szükségünk van az M_4 értékekre.

$$f'''(x) = -(\ln(2))^3 \cdot 2^{-x}$$

$$f^{(4)}(x) = (\ln(2))^4 \cdot 2^{-x} \implies \left| (\ln(2))^4 \cdot 2^{-x} \right| \le (\ln(2))^4 \cdot 2 =: M_4 \ (x \in [-1, 1]).$$

Innen a hibabecslés

$$\left| \int_{1}^{1} 2^{-x} dx - \frac{13}{6} \right| \le \frac{2 \ln^{4}(2)}{4! \cdot 5!} \cdot 2^{5} = \frac{\ln^{4}(2)}{45} \approx 0.0051.$$

Ez rosszabb a kívánt pontosságnál, ezért alkalmazzunk összetett Simpson formulát. Ennek a hibaképlete:

$$\left| \int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x - S_m(f) \right| \le \left(\frac{M_4}{4! \cdot 5!} \cdot (b - a)^5 \right) \cdot \left(\frac{2}{m} \right)^4$$

Vegyük figyelembe, hogy az összetett Simpson-formulát páratlan számú alappont, azaz páros m esetén értelmezzük, kiszámítási módja:

$$S_m(f) = \frac{b-a}{3m} \left(f(x_0) + 2 \cdot \sum_{k=1}^{\frac{m}{2}-1} f(x_{2k}) + 4 \cdot \sum_{k=1}^{\frac{m}{2}} f(x_{2k-1}) + f(x_m) \right)$$

Előző eredményeinket felhasználva az összetett formula hibabecslése:

$$\left| \int_{-1}^{1} 2^{-x} \, \mathrm{d}x - S_m(f) \right| \le \frac{\ln^4(2)}{45} \cdot \left(\frac{2}{m} \right)^4 = \frac{16 \cdot \ln^4(2)}{45 \cdot m^4}.$$

Feladatunk a továbbiakban annak a legkisebb pozitív páros m számnak a meghatározása, amelyre a fenti mennyiség 10^{-3} -nál kisebb lesz:

$$\frac{16 \cdot \ln^4(2)}{45 \cdot m^4} \le 10^{-3}$$

$$\frac{10^3 \cdot 16 \cdot \ln^4(2)}{45} \le m^4$$

$$\sqrt[4]{\frac{10^3 \cdot 16 \cdot \ln^4(2)}{45}} \approx 2,7464 \le m \implies m \ge 4$$

Az összetett trapézformula esetén tehát m=26-ot kaptunk, ami azt jelenti, hogy a megadott 10^{-3} pontosság eléréséhez legalább 27 függvénykiértékelést kell végeznünk! Ha viszont összetett Simpson-formulát használunk, ugyanezen pontosság eléréséhez elegendő mindössze 5 függvénykiértékelés!