

Pracownia z Analizy numerycznej (M)

Sprawozdanie do zadania P2.1

Jadwiga Świerczyńska

Wrocław, 05.01.2023 r.

1 Wstęp

Całkowanie numeryczne (nazywane inaczej *kwadraturą*) to przybliżone obliczanie wartości całek oznaczonych. Dla wielu funkcji obliczenie dokładnej postaci całki nieoznaczonej jest zadaniem skomplikowanym. Wobec tego stosujemy metody numeryczne umożliwiające poznanie aproksymacji wartości całki.

Jedną z metod całkowania numerycznego jest kwadratura interpolacyjna. Interpolacja wielomianowa pozwala na przybliżanie funkcji poprzez wielomian w zadanych punktach. Całka z wielomianu interpolacyjnego jest więc przybliżeniem całki z danej funkcji.

Wzory na kwadraturę interpolacyjną są różne w zależności od doboru węzłów interpolacji. W poniższej pracy zbadano kwadraturę Newtona–Cotesa, w której węzły są równoodległe. W szczególności opisano wzory na tę metodę z dwoma węzłami (*wzór trapezów*), trzema (*wzór Simpsona*), a także z n węzłami. Ponadto wyprowadzono wzory na kwadratury złożone wykorzystujące *wzór trapezów* oraz *wzór Simpsona*.

W rozdziale 4 opisano eksperymenty polegające na zastosowaniu kwadratury Newtona–Cotesa do różnych typów funkcji oraz porównano ich wyniki z wartościami zwracanymi przez funkcję `quadgk` z biblioteki `QuadGK.jl` z języka `Julia`, które przyjęto jako wartości dokładne.

W rozdziale 5 opisano, jak dokładne wyniki można osiągnąć, wykorzystując metodę trapezów i metodę Simpsona przy obliczeniach trwających nie dłużej niż 0,001 sekundy.

2 Opis metody Newtona–Cotesa

Metoda Newtona–Cotesa jest kwadraturą numeryczną wykorzystującą węzły równoodległe. Przypomnijmy sobie zatem wzór interpolacyjny Lagrange’a.

Fakt 2.1 (Wzór interpolacyjny Lagrange’a). Niech $f(x)$ będzie funkcją określoną na $[a, b]$ oraz niech $a \leq x_0, x_1, \dots, x_n \leq b$ i $x_i \neq x_j$ dla $i \neq j$. Określmy

$$\lambda_k(x) = \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

Wówczas wielomian

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k(x)$$

spełnia

$$L_n(x_i) = f(x_i) \quad \text{dla } i = 0, 1, \dots, n.$$

Wartość całki z funkcji f możemy przybliżać wartością całki z wielomianu L_n , czyli

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx.$$

Wyprowadźmy dokładny wzór na $\int_a^b L_n(x) dx$ dla różnych wartości n .

2.1 Dwa węzły (wzór trapezów)

Przyjmijmy $n = 1$. Mamy wówczas

$$\begin{aligned} L_1(x) &= f(x_0)\lambda_0(x) + f(x_1)\lambda_1(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} \\ &= \frac{f(b) - f(a)}{b-a}x - \frac{af(b) - bf(a)}{b-a}. \end{aligned}$$

Wobec tego

$$\begin{aligned} \int_a^b L_1(x) dx &= \int_a^b f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} dx \\ &= \frac{f(a)}{a-b} \left(\frac{b^2 - a^2}{2} - b(b-a) \right) + \frac{f(b)}{b-a} \left(\frac{b^2 - a^2}{2} - a(b-a) \right) \\ &= f(a) \left(\frac{-b-a}{2} + b \right) + f(b) \left(\frac{b+a}{2} - a \right) \\ &= f(a)\frac{b-a}{2} + f(b)\frac{b-a}{2} = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)). \end{aligned}$$

A zatem

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) \quad (\text{WTrap})$$

2.2 Trzy węzły (wzór Simpsona)

Przyjmijmy teraz $n = 2$. Mamy wówczas

$$\begin{aligned} L_n(x) &= f(x_0)\lambda_0(x) + f(x_1)\lambda_1(x) + f(x_2)\lambda_2(x) \\ &= f(a)\frac{(x - \frac{a+b}{2})(x-b)}{(a - \frac{a+b}{2})(a-b)} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\frac{(x-a)(x-b)}{(\frac{a+b}{2}-a)(\frac{a+b}{2}-b)} + f(b)\frac{(x-a)(x - \frac{a+b}{2})}{(b-a)(b - \frac{a+b}{2})}. \end{aligned}$$

Dalej mamy

$$\begin{aligned} \int_a^b \lambda_0(x) dx &= \int_a^b \frac{(x - \frac{a+b}{2})(x-b)}{(a - \frac{a+b}{2})(a-b)} dx = \frac{2}{(a-b)^2} \int_a^b x^2 + \frac{-a-3b}{2}x + b\frac{a+b}{2} dx \\ &= \frac{2}{(a-b)^2} \left(\frac{x^3}{3} + \frac{-a-3b}{2} \frac{x^2}{2} + b\frac{a+b}{2}x \right) \Big|_a^b \\ &= \frac{2}{(a-b)^2} \left(\frac{b^3-a^3}{3} + \frac{b^2(-a-3b)-a^2(-a-3b)}{4} + \frac{b^2(b+a)-ab(a+b)}{2} \right) \\ &= \frac{2}{(a-b)^2} \frac{4b^3-4a^3-3ab^2-9b^3+3a^3+9a^2b+6b^3+6ab^2-6a^2b-6ab^2}{12} \\ &= \frac{2}{(a-b)^2} \frac{b^3-3ab^2+3a^2b-a^3}{12} = \frac{2}{(b-a)^2} \frac{(b-a)^3}{12} = \frac{b-a}{6} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_a^b \lambda_1(x) dx &= \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{(\frac{a+b}{2}-a)(\frac{a+b}{2}-b)} dx = \frac{-4}{(b-a)^2} \int_a^b x^2 - (a+b)x + ab dx \\ &= \frac{-4}{(b-a)^2} \left(\frac{x^3}{3} - (a+b)\frac{x^2}{2} + abx \right) \Big|_a^b \\ &= \frac{-4}{(b-a)^2} \left(\frac{b^3-a^3}{3} - (a+b)\frac{b^2-a^2}{2} + ab(b-a) \right) \\ &= \frac{-4}{(b-a)^2} \frac{2b^3-2a^3-3(a+b)(b^2-a^2)+6ab(b-a)}{6} \\ &= \frac{-4}{(b-a)^2} \frac{2b^3-2a^3-3ab^2+3a^3-3b^3+3a^2b+6ab^2-6a^2b}{6} \\ &= \frac{-4}{(b-a)^2} \frac{a^3-3a^2b+3ab^2-3b^3}{6} = \frac{-4}{(a-b)^2} \frac{(a-b)^3}{6} \\ &= \frac{-2(a-b)}{3} = \frac{2(b-a)}{3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_a^b \lambda_2(x) dx &= \int_a^b \frac{(x-a)(x-\frac{a+b}{2})}{(b-a)(b-\frac{a+b}{2})} dx = \frac{2}{(b-a)^2} \int_a^b x^2 + \frac{-3a-b}{2}x + a\frac{a+b}{2} dx \\
&= \frac{2}{(b-a)^2} \left(\frac{x^3}{3} + \frac{-3a-b}{2} \frac{x^2}{2} + a\frac{a+b}{2}x \right) \Big|_a^b \\
&= \frac{2}{(b-a)^2} \left(\frac{b^3-a^3}{3} + \frac{b^2(-3a-b) - a^2(-3a-b)}{4} + \frac{ab(b+a) - a^2(a+b)}{2} \right) \\
&= \frac{2}{(b-a)^2} \frac{4b^3 - 4a^3 - 9ab^2 - 3b^3 + 9a^3 + 3a^2b + 6ab^2 + 6a^2b - 6a^3 - 6a^2b}{12} \\
&= \frac{2}{(b-a)^2} \frac{b^3 - 3ab^2 + 3a^2b - a^3}{12} = \frac{2}{(b-a)^2} \frac{(b-a)^3}{12} = \frac{b-a}{6}
\end{aligned}$$

Wobec tego

$$\begin{aligned}
\int_a^b L_n(x) dx &= f(a) \int_a^b \lambda_0(x) dx + f\left(\frac{a+b}{2}\right) \int_a^b \lambda_1(x) dx + f(b) \int_a^b \lambda_2(x) dx \\
&= f(a) \frac{b-a}{6} + f\left(\frac{a+b}{2}\right) \frac{2(b-a)}{3} + f(b) \frac{b-a}{6} \\
&= \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)
\end{aligned}$$

Otrzymujemy ostatecznie

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \quad (\text{WSimp})$$

2.3 Dowolna liczba węzłów (wzór Newtona–Cotesa)

Ustalmy dowolne n . Oznaczmy $h = \frac{b-a}{n}$. Wówczas otrzymujemy

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k(x)$$

Mamy zatem

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx = \int_a^b \sum_{k=0}^n f(x_k) \lambda_k(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b \lambda_k(x) dx \quad (*)$$

Oznaczmy

$$\begin{aligned} A_k &= \int_a^b \lambda_k(x) dx = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx = \left[\begin{matrix} x = a + th \\ dx = h dt \end{matrix} \right] = \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{t - j}{k - j} h dt \\ &= h \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{t - j}{k - j} dt \stackrel{\text{ozn.}}{=} h C_k \end{aligned}$$

Zauważmy, że wielkość C_k zależy jedynie od liczby węzłów (w szczególności nie zależy od funkcji f). Ponadto, gdy $f \in \Pi_n$, wzór (*) jest dokładny. Wobec tego możemy napisać (przyjmując, że interpolujemy funkcję x^j na $[0, n]$ w węzłach $0, 1, 2, \dots, n$):

$$\frac{n^{j+1}}{j+1} = \int_0^n x^j dx = \sum_{k=0}^n C_k k^j \quad \text{dla } j = 0, 1, \dots, n.$$

Oznaczmy

$$\begin{aligned} A &= [A_0 \quad A_1 \quad \dots \quad A_n] \\ C &= [C_0 \quad C_1 \quad \dots \quad C_n] \\ B &= \left[\begin{matrix} \frac{n^1}{1} & \frac{n^2}{2} & \dots & \frac{n^{n+1}}{n+1} \end{matrix} \right] \\ M &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 2 & \dots & 2^n \\ \vdots & & \ddots & \\ 1 & n & \dots & n^n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Otrzymujemy zatem

$$C \cdot M = B,$$

czyli (oczywiście macierz M jest odwracalna)

$$C = B \cdot M^{-1}.$$

Macierz M jest macierzą Vandermonde'a. Skorzystamy z rozkładu LU macierzy M (gdzie L jest macierzą dolnotrójkątną, a U – górnortrójkątną). Zauważmy, że ponieważ nasze węzły są teraz liczbami $0, 1, 2, \dots, n$, więc mamy

$$L^{-1} = [l_{ij}]_{(n+1) \times (n+1)} \quad \text{gdzie } l_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{(i-1)!} \binom{i-1}{j-1}$$

oraz

$$U^{-1} = [u_{ij}]_{(n+1) \times (n+1)} \quad \text{gdzie } u_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{gdzie } i = j = 1 \\ 0 & \text{gdzie } i \neq 1, j = 1 \\ S_i^{(j-1)} & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

(patrz: [2]). Tutaj $S_p^{(k)}$ oznacza liczby Stirlinga pierwszego rodzaju. Wobec tego otrzymujemy

$$A = h \cdot C = h \cdot B \cdot M^{-1} = h \cdot B \cdot U^{-1} \cdot L^{-1},$$

czyli wzór na współczynniki metody Newtona–Cotesa w przypadku n węzłów.

3 Kwadratury złożone

Kwadratury złożone powstają poprzez podzielenie wyjściowego przedziału $[a, b]$ na mniejsze podprzedziały, na których stosujemy znane wzory na kwadratury Newtona–Cotesa. Rozważmy następujące złożone kwadratury.

Lemat 3.1 (Złożona metoda trapezów). *Niech $f(x)$ będzie określona na $[a, b]$ oraz niech $n \in \mathbb{N}$. Oznaczmy $h = \frac{b-a}{n}$ oraz $x_i = a + ih$ dla $i = 0, 1, 2, \dots, n$. Wówczas złożona metoda trapezów dla węzłów x_0, x_1, \dots, x_n wyraża się wzorem*

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{k=0}^n {}'' f(x_k).$$

Dowód. Stosujemy metodę trapezów (WTrap) dla przedziałów $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ i otrzymujemy

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n \frac{x_k - x_{k-1}}{2} (f(x_k) + f(x_{k-1})) = \sum_{k=1}^n \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k-1})) = h \sum_{k=0}^n {}'' f(x_k)$$

□

Lemat 3.2 (Złożona metoda Simpsona). *Niech $f(x)$ będzie określona na $[a, b]$ oraz niech $n \in \mathbb{N}$ i $2|n$. Oznaczmy $h = \frac{b-a}{n}$ oraz $x_i = a + ih$ dla $i = 0, 1, 2, \dots, n$. Wówczas złożona metoda Simpsona dla węzłów x_0, x_1, \dots, x_n wyraża się wzorem*

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left(2 \sum_{k=0}^{n/2} {}'' f(x_{2k}) + 4 \sum_{k=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) \right).$$

Dowód. Stosujemy metodę Simpsona (WSimp) dla przedziałów $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{n-2}, x_n]$ i otrzymujemy

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \sum_{k=1}^{n/2} \frac{x_{2k} - x_{2k-2}}{6} [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})] \\ &= \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{n/2} [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})] \\ &= \frac{h}{3} \left(2 \sum_{k=0}^{n/2} {}'' f(x_{2k}) + 4 \sum_{k=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) \right) \end{aligned}$$

□

4 Eksperymenty

Zauważmy, że wraz ze zwiększaniem liczby węzłów, dokładność kwadratury złożonej rośnie. Istotnie, jeśli chcemy policzyć przybliżoną wartość $\int_a^b f(x) dx$, to błąd złożonego wzoru trapezów wynosi

$$-\frac{1}{12n^2}(b-a)^3 f''(\xi) \quad \text{dla pewnego } \xi \in (a, b),$$

natomiast błąd złożonego wzoru trapezów wynosi

$$-\frac{1}{2880n^4}(b-a)^5 f^{(4)}(\eta) \quad \text{dla pewnego } \eta \in (a, b),$$

o czym można się przekonać w [1] w rozdziale 7.2.

Poniżej można przyjrzeć się wykresom ilustrującym wielkość błędu względnego aproksymacji całek obliczanych na $[-1, 1]$.

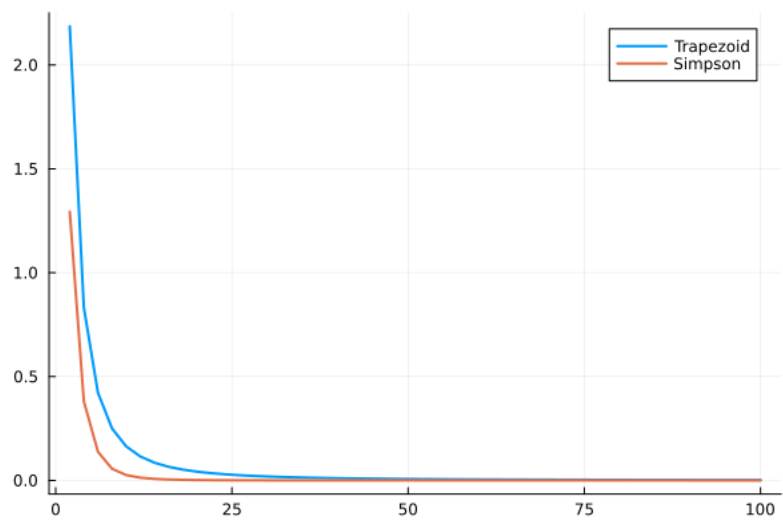
4.1 Funkcje wielomianowe

Definiujemy

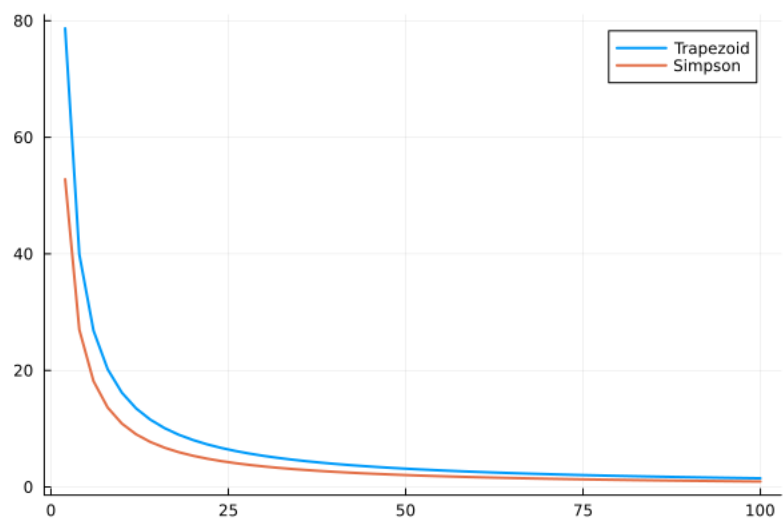
$$W_1(x) = 328x^{10} + 49x^9 - 2x^7 + 54x^4 - 23x^2 + 8x - 100$$

$$W_2(x) = (x+0,5)(x+0,25)(x+0,2)(x+0,1)(x-0,1)(x-0,7)(x-1) + 8x^{1000} + 5,8x^{97}$$

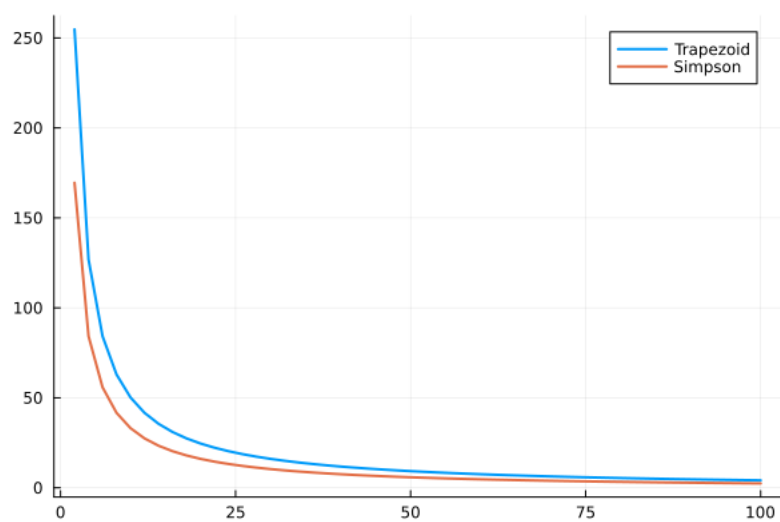
$$W_3(x) = \sum_{i=1}^{1023} (-1)^{i+1} \frac{(x-1)^i}{i}$$



Rysunek 1: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $W_1(x)$.



Rysunek 2: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $W_2(x)$.



Rysunek 3: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $W_3(x)$.

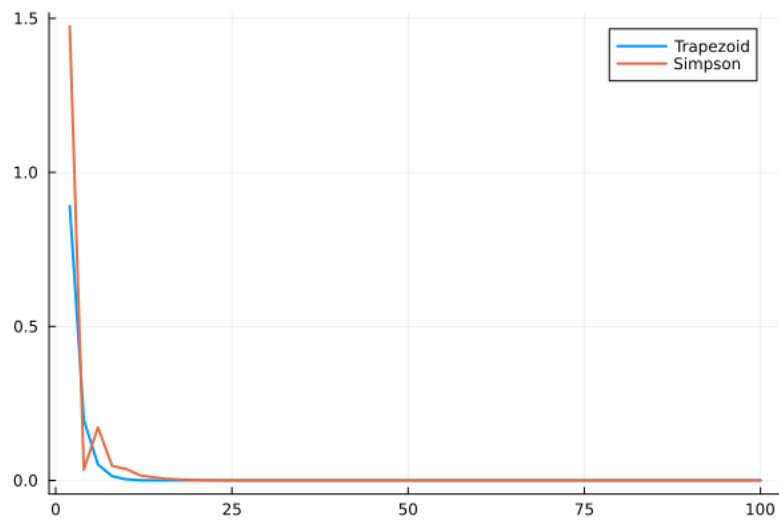
4.2 Funkcje wymierne

Definiujemy

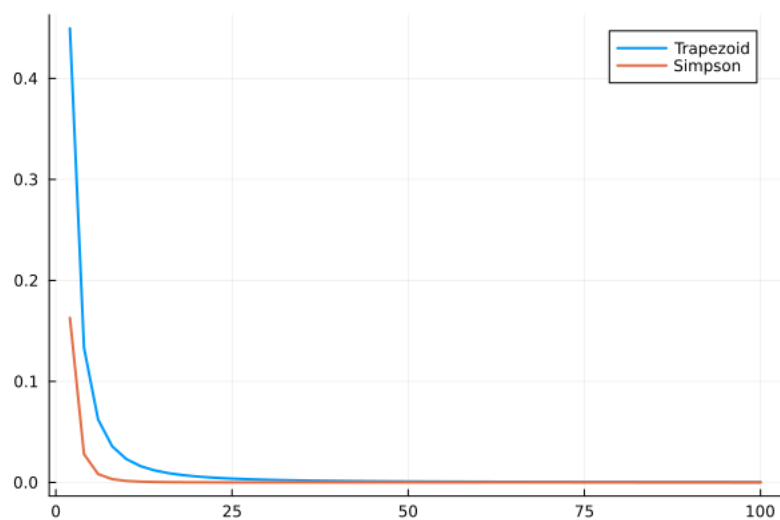
$$P_1(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$$

$$P_2(x) = \frac{(x - 34)(x - 398)(x - 23)}{(x - 230)(x + 1,5)(x + 7)(x + 2)}$$

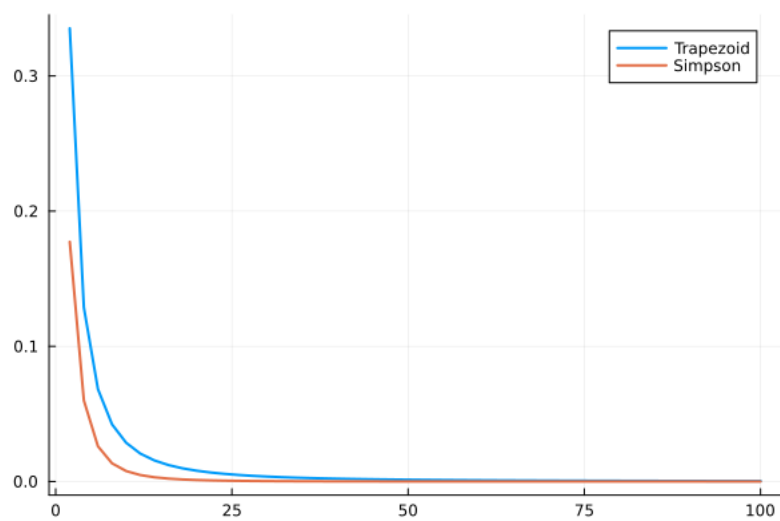
$$P_3(x) = \frac{1}{x^5 + x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 7}$$



Rysunek 4: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $P_1(x)$.



Rysunek 5: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $P_2(x)$.



Rysunek 6: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $P_3(x)$.

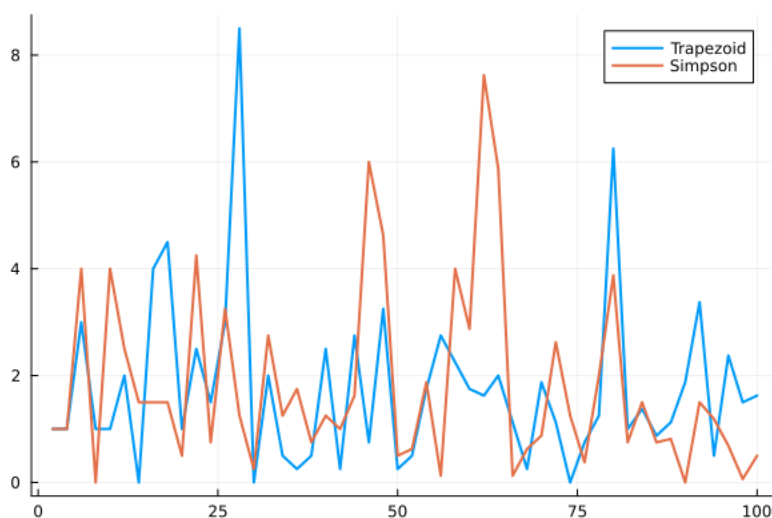
4.3 Funkcje wymierne złożone z funkcji trygonometrycznych

Definiujemy

$$T_1(x) = \frac{\sin(x)}{\cos(x)^3 + 7}$$

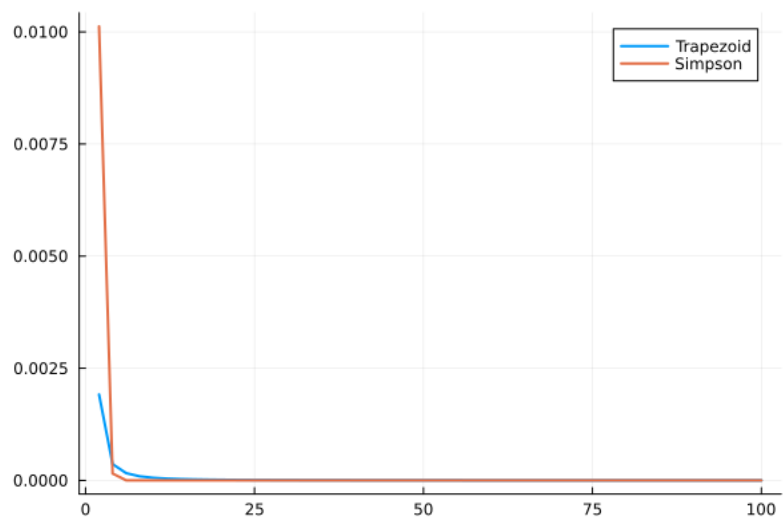
$$T_2(x) = \frac{\sin(x)^2 + \cos(x)^5 + \sin(x)\cos(x) + 100}{\sin(x)^2 \cos(x) + 8}$$

$$T_3(x) = \frac{\sin(x)}{\cos(x)^5 + 100}$$

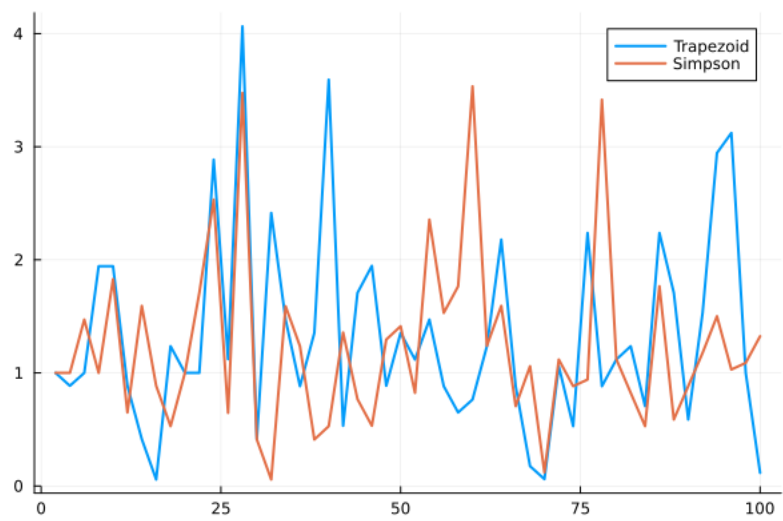


Rysunek 7: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $T_1(x)$.

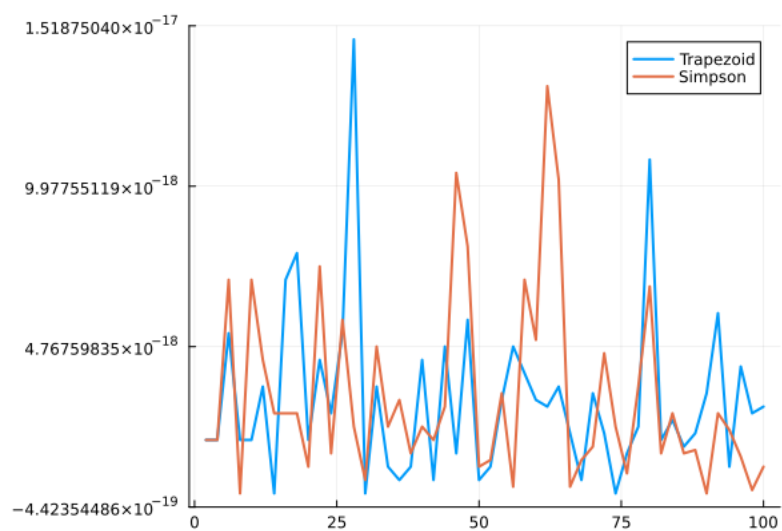
Można zauważyć, że wykresy 7 i 9 wyglądem odbiegają nieco od pozostałych. Dzieje się tak, ponieważ funkcje $T_1(x)$ oraz $T_3(x)$ są nieparzyste. Wobec tego całki z T_1 oraz T_3 na przedziale symetrycznym względem 0 są równe 0. Oczywiście przy „szczęśliwym” doborze węzłów bardzo szybko uzyskamy wynik zbliżony do dokładnego. Z drugiej strony przy obliczaniu kwadratur dla tych funkcji dodajemy liczby przeciwnych znaków bliskie sobie co do wartości bezwzględnej – wobec tego występuje utrata cyfr znaczących. Oznacza to, że błąd względny, nawet przy dużej liczbie węzłów, może być duży. Można natomiast zauważyć (na wykresach 10 oraz 11), że błąd bezwzględny jest mały – mniejszy niż precyzja arytmetyki).



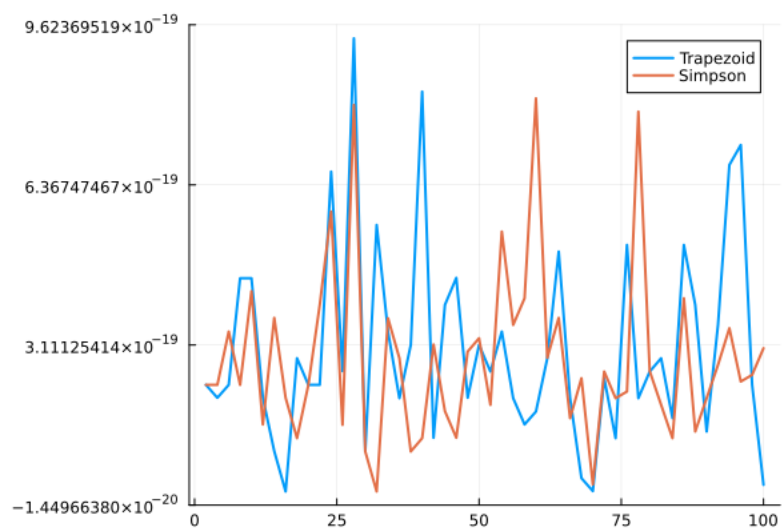
Rysunek 8: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $T_2(x)$.



Rysunek 9: Wykres błędu względnego aproksymacji całki z funkcji $T_3(x)$.



Rysunek 10: Wykres błędu bezwzględnego aproksymacji całki z funkcji $T_1(x)$.



Rysunek 11: Wykres błędu bezwzględnego aproksymacji całki z funkcji $T_3(x)$.

5 Porównanie czasu obliczeń

W tej sekcji przedstawiam, jakie są najlepsze przybliżenia wartości błędu względnego aproksymacji całki dla metod trapezów i Simpsona przy ograniczeniu czasowym na obliczenia wykonywane przez program równym 0,001 sekundy.

Funkcja	Wzór trapezów	Wzór Simpsona
W_1	$1,68701 \cdot 10^{-3}$	$3,08553 \cdot 10^{-6}$
W_2	1,49043	0,94002
W_3	35,53557	20,31242

Tabela 1: Błędy względne dla funkcji wielomianowych.

Funkcja	Wzór trapezów	Wzór Simpsona
P_1	$8,97520 \cdot 10^{-6}$	$2,54633 \cdot 10^{-9}$
P_2	$2,35639 \cdot 10^{-4}$	$1,97046 \cdot 10^{-7}$
P_3	$3,36773 \cdot 10^{-4}$	$3,440313 \cdot 10^{-6}$

Tabela 2: Błędy względne dla funkcji wymiernych.

Funkcja	Wzór trapezów	Wzór Simpsona
T_1	0	0
T_2	$5,84284 \cdot 10^{-7}$	$1,84524 \cdot 10^{-11}$
T_3	0,05718	0,05718

Tabela 3: Błędy względne dla funkcji wymiernych złożonych z funkcji trygonometrycznych.

Można zatem zauważyć, że wzór Simpsona daje szybciej bardziej dokładne wyniki.

6 Wnioski

Jak można zaobserwować na wykresach, wzór Simpsona daje dokładniejsze wyniki niż wzór trapezów dla takiej samej liczby węzłów. Ponadto, jak można zauważyć w tabelach 1, 2 oraz 3, wzór Simpsona przy ograniczeniu czasowym w postaci 0,001 sekundy umożliwi nam poznanie dokładniejszych wyników niż wzór trapezów. W wynikach przeprowadzonych eksperymentów dostrzegamy więc przewagę wzoru Simpsona.

Literatura

- [1] David Kincaid, Ward Cheney, *Analiza numeryczna*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 2005
- [2] L. Richard Turner, *Inverse of the Vandermonde matrix with applications*, National Aeronautics and Space Administration, 1966