

CAŁKOWANIE NUMERYCZNE

INFORMATYKA
Transport, studia niestacjonarne I stopnia, semestr I
rok akademicki 2012/2013

Instytut L-5, Wydział Inżynierii Lądowej, Politechnika Krakowska

EWA PABISEK
ADAM WOSATKO

Kiedy stosujemy całkowanie numeryczne?

W przypadkach elementarnych obliczanie wartości całki oznaczonej odbywa się na podstawie wzoru Newtona-Leibnitz'a

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

Powyższy wzór możemy stosować wtedy, gdy znana jest tzw. **funkcja pierwotna $F(x)$** spełniająca związek:

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x)$$

Jeśli **wyznaczenie funkcji pierwotnej jest bardzo trudne lub niemożliwe i/lub funkcja podcałkowa $f(x)$ zadana jest w postaci tablicy**, to możliwe jest stosowanie całkowania numerycznego.

Na czym polega numeryczne całkowanie?

Gdy przedział całkowania jest skończony, wówczas numeryczne całkowanie polega na **zastąpieniu funkcji podcałkowej $f(x)$ odpowiednim wielomianem interpolacyjnym lub aproksymacyjnym $\varphi(x)$** zbudowanym na zbiorze $n + 1$ węzłów o współrzędnych x_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$.

Wymaga to wówczas całkowania jedynie prostych funkcji bazowych z wykorzystaniem wzoru na $I(f)$. W dalszym ciągu omówione zostaną najprostsze metody całkowania numerycznego wykorzystujące interpolację (aproksymację) funkcji za pomocą **wielomianów algebraicznych**.

Podstawiając w miejsce funkcji podcałkowej $f(x)$ wielomian algebraiczny

$$\varphi(x) = f_0 N_0(x) + f_1 N_1(x) + \cdots + f_n N_n(x)$$

otrzymamy tzw. wzór kwadraturowy.

Kwadratura całkowania

Wzorem kwadraturowym albo krócej **kwadraturą** nazywamy:

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

w którym

$$w_i = \int_a^b N_i(x) dx, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

są tzw. **współczynnikami wagowymi** (wagami). Wartość w_i określa wielkość udziału rzędnej $f_i \equiv f(x_i)$ w wartości całej sumy $S(f)$.

Dokładność kwadratury $S(f)$ jest tym większa, im mniejsza jest różnica $I(f) - S(f)$ nazywana błędem kwadratury.

Rząd kwadratury

Najczęściej stosowaną miarą dokładności jest tzw. **rzęd kwadratury**.

Kwadratura $S(f)$ jest rzędu r , jeśli

- dla wszystkich wielomianów $W(x)$ stopnia mniejszego od r jest $I(W) = S(W)$ oraz
- jeśli istnieje taki wielomian $W(x)$ stopnia r dla którego $I(W) \neq S(W)$.

Można wykazać, że kwadratury interpolacyjne zbudowane na $n + 1$ węzłach są rzędu co najmniej $n + 1$.

Kwadratury dla węzłów równoodległych

Najprostszymi kwadraturami interpolacyjnymi są kwadratury zbudowane na węzłach równoodległych, o danych współrzędnych

$x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$. Niewiadome współczynniki w_i są obliczane z układu $n+1$ **liniowych równań algebraicznych**, które otrzymamy na podstawie kwadratury zastosowanej dla wielomianów $W_k(x) = x^k$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$, dla których $I(W_k) = S(W_k)$.

$$I(W_k) = \int_a^b x^k \, dx = \sum_{i=0}^n w_i x_i^k = S(W_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n$$

skąd

$$\sum_{i=0}^n w_i x_i^k = \frac{1}{k+1} (b^{k+1} - a^{k+1})$$

Kwadratury interpolacyjne – układ równań

$$\begin{array}{lclclclclcl} 1 & w_0 & + & 1 & w_1 & \cdots & + & 1 & w_n & = & p_0 \\ x_0 & w_0 & + & x_1 & w_1 & \cdots & + & x_n & w_n & = & p_1 \\ x_0^2 & w_0 & + & x_1^2 & w_1 & \cdots & + & x_n^2 & w_n & = & p_2 \\ \dots & & & & & & & & & & \\ x_0^n & w_0 & + & x_1^n & w_1 & \cdots & + & x_n^n & w_n & = & p_n \end{array}$$

Powyższy układ równań można zapisać w postaci:

$$\left[\begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \dots & & & & \\ x_0^n & x_1^n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} b - a \\ \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ \frac{1}{3}(b^3 - a^3) \\ \dots \\ \frac{1}{(n+1)}(b^{(n+1)} - a^{(n+1)}) \end{array} \right]$$

Rozwiązaniem tego układu algebraicznych równań liniowych są wartości wag w_i .

Wzór prostokątów

Najprostszym sposobem obliczania przybliżonej wartości $S(f)$ całki oznaczonej $I(f)$ jest zastosowanie aproksymacji funkcji $f(x)$ za pomocą wielomianu

$$\varphi(x) = f(x_0) = \text{const.}$$

Po podstawieniu do wzoru

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

otrzymujemy

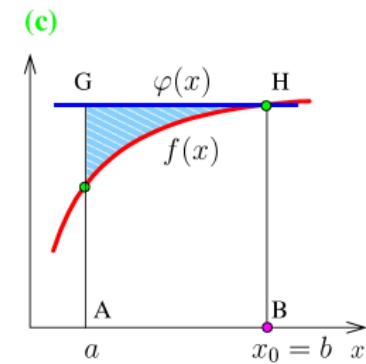
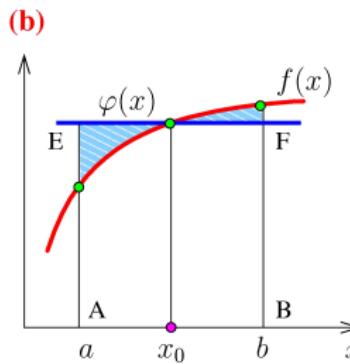
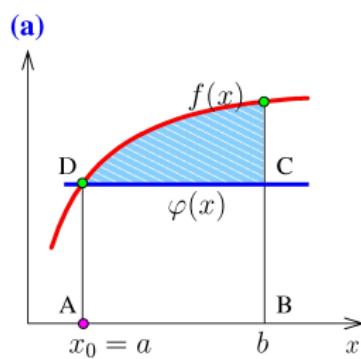
$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f(x_0) dx = (b - a) \cdot f(x_0) = S(f). \quad (1)$$

przy czym $w_0 = b - a$.

Wybór położenia węzła dla wzoru prostokątów

W zależności od wyboru położenia węzła x_0 otrzymujemy wzory:

- (a) **lewych prostokątów, gdy $x_0 = a$**
- (b) **środkowych prostokątów, gdy $x_0 = (a + b)/2$**
- (c) **prawych prostokątów, gdy $x_0 = b$**

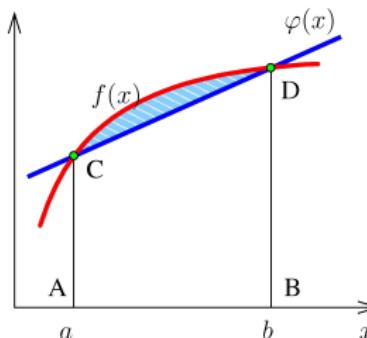


Wzór trapezów

Jeśli do interpolacji funkcji $f(x)$ zastosujemy interpolację za pomocą wielomianu liniowego zbudowanego na bazie Lagrange'a, to otrzymamy wzór kwadraturowy, nazywany **wzorem trapezów**.

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b \left[f_0 L_0^1(x) + f_1 L_1^1(x) \right] dx = \quad (2)$$

$$\int_a^b \left[f(a) \frac{x-b}{a-b} + f(b) \frac{x-a}{b-a} \right] = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] = S(f).$$



Wagi dla wzoru trapezów

Wagi w_i , $i = 0, 1$ występujące we wzorze trapezów można wyznaczyć rozwiązuając układ równań:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b - a \\ \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \end{bmatrix}$$

skąd $w_0 = w_1 = \frac{1}{2}(b - a)$.

Wzór Simpsona

Zastosowanie kwadratowej interpolacji Lagrange'a prowadzi do wzoru kwadraturowego:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b [f_0 L_0 + f_1 L_1 + f_2 L_2] dx =$$

$$\int_a^b \left[f_0 \frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)} + f_1 \frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} + f_2 \frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} \right] dx$$

Ostatecznie **kwadratura (wzór) Simpsona** przyjmuje postać:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{3} h (f_0 + 4 f_1 + f_2) = s(f), \quad h = \frac{b-a}{2} \quad (3)$$

Wagi dla wzoru Simpsona

Dla 3 węzłów równoodległych, tzn. gdy $c = 0.5 \cdot (a + b)$ współczynniki wagowe w_i , $i = 0, 1, 2$ we wzorze Simpsona oblicza się z układu równań:

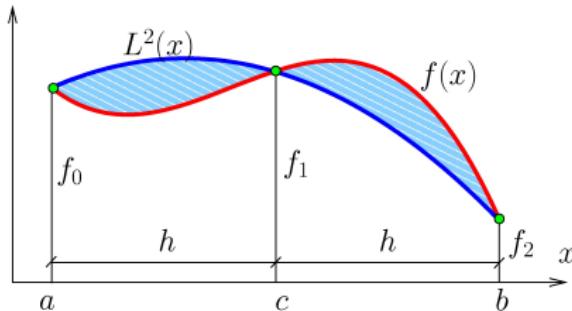
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & c & b \\ a^2 & c^2 & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b - a \\ \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ \frac{1}{3}(b^3 - a^3) \end{bmatrix}$$

Po rozwiązaniu tego układu otrzymamy

$$w_0 = w_2 = \frac{b - a}{6}, \quad w_1 = \frac{2 \cdot (b - a)}{3}.$$

Wzór Simpsona

$$\int_a^b f(x) \, dx = \frac{1}{3} h (f_0 + 4f_1 + f_2) = s(f), \quad h = \frac{b-a}{2}$$



Uwaga:

Wzór Simpsona jest jest rzędu czwartego, co oznacza, że jest dokładny nie tylko dla wielomianów stopnia drugiego, lecz także dla wielomianów stopnia trzeciego tzn. $I(W_3) = S(W_3)$ oraz $I(W_4) \neq S(W_4)$.

Wzory Newtona-Cotesa

Zastosowanie wielomianów $\varphi(x)$ coraz to wyższych stopni we wzorze kwadraturowym prowadzi do tzw. **wzorów Newtona-Cotesa**.

$$S(W_k) = \int_{x_0=a}^{x_n=b} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) = S(f) \quad (4)$$

Dla wielomianów $\varphi(x)$ kolejnych stopni n wartości współczynników wagowych w_i otrzymuje się z rozwiązania układu równań.

Zestawienie współczynników wagowych

Wzory Newtona-Cotesa

W poniższej tablicy są zestawione wartości współczynników wagowych w_i :

n	w'_0	w'_1	w'_2	w'_3	w'_4	w'_5	m
1	1						2
2	1	4	1				6
3	1	3	3	1			8
4	7	32	12	32	7		90
5	19	75	50	50	75	19	228

Wartości wag występujące we wzorze (4) obliczane są według wzoru

$$w_i = \frac{w'_i}{m}$$

Uwaga:

Kwadratury Newtona-Cotesa uzyskane przy zastosowaniu wielomianów interpolujących $\varphi(x)$ stopni $n > 8$ ujawniają cechy narastającej niestabilności kwadratury interpolacyjnej (3).

Wzór Gaussa

Do podwyższenia dokładność wzorów kwadraturowych można zastosować propozycję **Gaussa**, polegającą na **optymalizacji położenia n węzłów interpolacyjnych** oraz **doborze odpowiednich wartości współczynników wagowych**. Można przyjąć, że we wzorze:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) \quad (5)$$

niewiadomymi są nie tylko **współczynniki wagowe w_i** ale także **współrzędne węzłów x_i** . Zatem równanie (5) zawiera $2(n + 1)$ niewiadomych.

Kwadratura będzie dokładna gdy $f(x)$ będzie wielomianem co najwyżej stopnia $(2n + 1)$. Wszystkie niewiadome można wyznaczyć z układu $2n + 2$ równań dla $n + 1$ wag w_i oraz $n + 1$ węzłów x_i , $i = 0, 1, \dots, n$.

Postać układu równań dla kwadratury Gaussa

Dla funkcji podcałkowej $f(x)$, która przyjmuje postać wielomianu zgodnie ze wzorem:

$$\int_a^b x^k \, dx = \sum_{i=0}^n w_i x_i^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2n + 1$$

otrzymujemy układ równań:

$$\sum_{i=0}^n w_i x_i^k = \frac{1}{k+1} (b^{k+1} - a^{k+1}), \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2n + 1 \quad (6)$$

który jest **liniowy** ze względu na wagę i **nieliniowy** ze względu na węzły.

Wzór kwadraturowy Gaussa w przedziale wzorcowym

Odwzorowanie przedziału $[a, b]$ na osi x na unormowany przedział $[-1, 1]$ na pomocniczej osi ξ i odwzorowanie do niego odwrotne można opisać za pomocą wzorów:

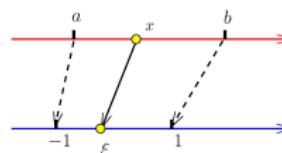
$$\xi = \frac{2x - a - b}{b - a} \Leftrightarrow x = \frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2}\xi \quad (7)$$

co daje wygodny sposób zapisu całki:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\xi\right) d\xi$$

oraz **wzoru kwadraturowego Gaussa**:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n \bar{w}_i f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\xi_i\right). \quad (8)$$



Obliczanie współczynników dla wzoru Gaussa

Dla tej postaci wzoru wartości \bar{w}_i , ξ_i można obliczyć z układu równań

$$\int_{-1}^1 \xi^k d\xi = \sum_{i=0}^n \bar{w}_i \xi_i^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2n+1. \quad (9)$$

Przykład:

$$I = \int_{-1}^1 (\alpha_1 + \alpha_2 \xi + \alpha_3 \xi^2 + \alpha_4 \xi^3) d\xi$$

$$\text{Wynik ścisły: } I = 2\alpha_1 + \frac{2}{3}\alpha_3 = 2\alpha_1 + 0\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_3 + 0\alpha_4$$

$$I = w_0 f(\xi_0) + w_1 f(\xi_1) =$$

$$= w_0 (\alpha_1 + \alpha_2 \xi_0 + \alpha_3 \xi_0^2 + \alpha_4 \xi_0^3) + w_1 (\alpha_1 + \alpha_2 \xi_1 + \alpha_3 \xi_1^2 + \alpha_4 \xi_1^3) =$$

$$= (w_0 + w_1)\alpha_1 + (w_0 \xi_0 + w_1 \xi_1)\alpha_2 + (w_0 \xi_0^2 + w_1 \xi_1^2)\alpha_3 + (w_0 \xi_0^3 + w_1 \xi_1^3)\alpha_4$$

$$w_0 + w_1 = 2$$

$$w_0 \xi_0 + w_1 \xi_1 = 0$$

$$w_0 \xi_0^2 + w_1 \xi_1^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow w_0 = w_1 = 1 \quad \xi_{0,1} = \pm 1/\sqrt{3}$$

$$w_0 \xi_0^3 + w_1 \xi_1^3 = 0$$

Tablica węzłów i wag Gaussa

n	$\xi_i, \quad i = 0, \dots, n$	$\bar{w}_i, \quad i = 0, \dots, n$
0	$\xi_0 = 0$	$\bar{w}_0 = 2$
1	$\xi_0 = +1/\sqrt{3}$ $\xi_1 = -1/\sqrt{3}$	$\bar{w}_0 = 1$ $\bar{w}_1 = 1$
2	$\xi_0 = +\sqrt{0.6}$ $\xi_1 = 0$ $\xi_2 = -\sqrt{0.6}$	$\bar{w}_0 = 5/9$ $\bar{w}_1 = 8/9$ $\bar{w}_2 = 5/9$
3	$\xi_0 = +0.86113631$ $\xi_1 = +0.33998104$ $\xi_2 = -0.33998104$ $\xi_3 = -0.86113631$	$\bar{w}_0 = 0.34785485$ $\bar{w}_1 = 0.65214515$ $\bar{w}_2 = 0.65214515$ $\bar{w}_3 = 0.34785485$

Uwaga:

Niezależnie od postaci funkcji $f(x)$

- 1^o wartości wag w_i i węzłów Gaussa ξ_i są **zawsze takie same**,
2^o zależą tylko od **liczby węzłów interpolacji n** .

Przykład

Zastosowanie wzorów kwadraturowych dla 1 przedziału

Obliczyć $S(f) = \int_a^b f(x)dx$ gdy $f(x) = 4 \cdot x^3 + 5 \cdot x^2 + 1$ dla $a = -1.0$, $b = 1.0$, co oznacza, że $h = b - a = 2$.

Rozwiązanie:

Przykładowy tok postępowania – dwupunktowa metoda Gaussa ($n = 1$):

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f(\xi) d\xi \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^1 w_i f(\xi_i) =$$

$$\frac{b-a}{2} \left[f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{b-a}{2} 0.5773502692 \right] +$$

$$f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2} 0.5773502692\right) = 5.33333$$

Przykład

Wyniki dla prezentowanych wzorów

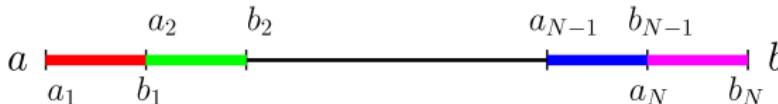
Wartość dokładna $I(f)$ = 5.3333

Wzór	Postać kwadratury	Wartość
prostokątów:		
lewych	$S(f) = h \cdot f(a)$	= 4
środkowych	$S(f) = h \cdot f(\frac{a+b}{2})$	= 2
prawych	$S(f) = h \cdot f(b)$	= 20
trapezów	$S(f) = \frac{h}{2} \cdot [f(a) + f(b)]$	= 12
Simpsona	$S(f) = \frac{1}{3} \frac{h}{2} \cdot [f(a) + 4 \cdot f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$	= 5.3333
Gaussa dla $n = 1$	$S(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^1 w_i f(\xi_i)$	= 5.3333

Podział przedziału całkowania na podprzedziały

Bardzo skutecznym sposobem podwyższania dokładności całkowania numerycznego jest dokonanie podziału przedziału $[a, b]$ na podprzedziały $[a_j, b_j]$, $j = 1, 2, \dots, N$ przy zachowaniu związków:

$$a_1 = a, \quad b_N = b, \quad b_i = a_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1.$$



Można zapisać:

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \sum_{j=1}^N \int_{a_j}^{b_j} f(x) dx = I_1(f) + I_2(f) + \dots + I_N(f)$$

Każda z całek oznaczonych $I_j(f)$, występujących we wzorze różni się od całki $I(f)$ tylko wartościami granic całkowania.

Do obliczania każdego składnika sumy można posłużyć się dowolnym wzorem kwadraturowym.

Metoda prostokątów

Gdy długości wszystkich podprzedziałów $[a_j, b_j]$ są sobie równe czyli $b_j - a_j = H, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad H = \frac{b-a}{N}$, to możemy określić **wzory sumacyjne**. Przedział całkowania a, b dzielimy na N równych podprzedziałów $\langle x_0, x_1 \rangle, \langle x_1, x_2 \rangle, \dots, \langle x_{n-1}, x_n \rangle$ gdzie $H = (b - a)/N$. W każdym z nich stosujemy wzór złożony:

(a) **lewych prostokątów**

$$\int_a^b f(x)dx \approx H \cdot \sum_{j=1}^N f(x_{j-1}) = H \cdot (f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1})$$

(b) **środkowych (średnich) prostokątów**

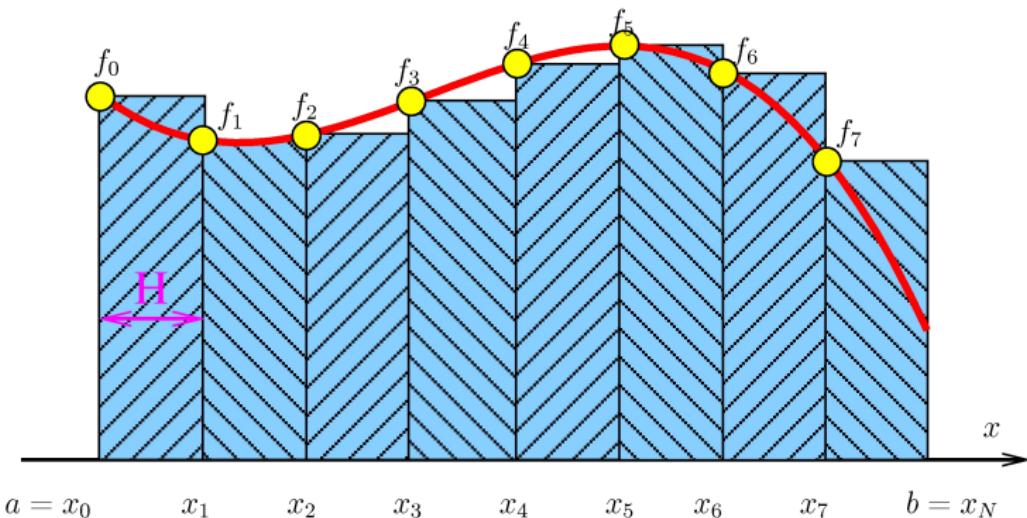
$$\int_a^b f(x)dx \approx H \cdot \sum_{j=1}^N f\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{2}\right) = H \cdot (f_{01} + f_{12} + f_{23} + \dots + f_{N-1N})$$

gdzie $f_{j-1j} = f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right), \quad j = 1, 2, \dots, N$,

(c) **prawych prostokątów**

$$\int_a^b f(x)dx \approx H \cdot \sum_{j=1}^N f(x_j) = H \cdot (f_1 + f_2 + \dots + f_N)$$

Ilustracja metody prostokątów lewych



Algorytm metody prostokątów

- 1: **funkcja** $[pr_l, pr_p, pr_s] = MetodaProstokatow(a, b, N)$
- 2: $H = \frac{b-a}{N}$
- 3: $pr_l = pr_p = pr_s = 0$
- 4: **dla** $j = 0, 1, \dots, N - 1$ **w wykonaj**
- 5: $x_l = a + j \cdot H, \quad pr_l = pr_l + f(x_l)$
- 6: $x_p = x_l + H, \quad pr_p = pr_p + f(x_p)$
- 7: $x_s = \frac{x_l + x_p}{2}, \quad pr_s = pr_s + f(x_s)$
- 8: **koniec dla**
- 9: $pr_l = pr_l \cdot H, \quad pr_p = pr_p \cdot H, \quad pr_s = pr_s \cdot H$
- 10: **koniec funkcji**

Wywołanie funkcji:

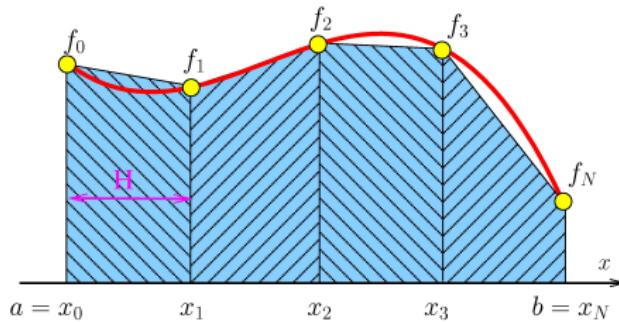
$$[Le, Pr, Sr] = MetodaProstokatow(a, b, N)$$

Metoda trapezów

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}H \cdot \sum_{j=1}^N \left[f(x_{j-1}) + f(x_j) \right] = H \cdot \left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + \frac{f_N}{2} \right)$$

lub

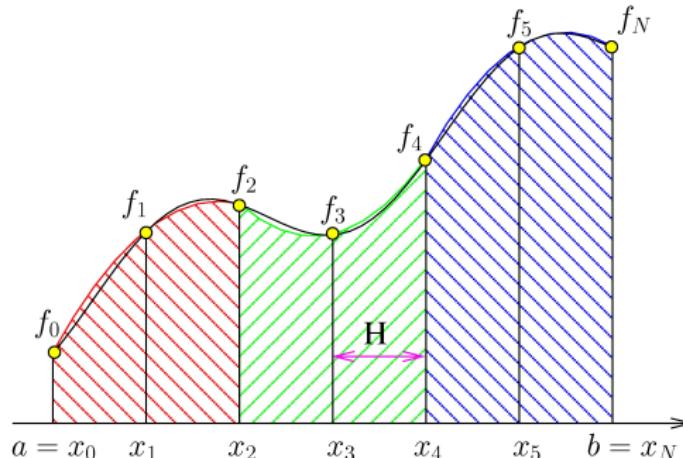
$$\int_a^b f(x)dx \approx H \cdot \left[\frac{1}{2}f_0 + \sum_{j=1}^{N-1} f_j + \frac{1}{2}f_N \right]$$



Metoda Simpsona

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{3} H \cdot [(f_0 + f_N) + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{N-1}) + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{N-2})],$$

przy czym $H = (x_N - x_0)/N$ i **N musi być liczbą parzystą.**



Zastosowanie kwadratury Gaussa

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2} \cdot \frac{b-a}{N} \cdot \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^{lpc} w_i f(X_i).$$

gdzie $X_i = \frac{x_j+x_{j+1}}{2} + \frac{x_{j+1}-x_j}{2} \cdot \xi_i$

Tablica węzłów Gaussa $\xi = [0.555555555, 0.88888888, 0.555555555]$

Tablica wag $w = [-0.77459667, 0.0, 0.77459667]$

Wywołanie funkcji:

`[Ga] = MetodaGaussa(a, b, N, tabWag, tabWez)`

Przykład – podsumowanie

Oblicz $S = \int_a^b f(x)dx$, gdzie $f(x) = 4 \cdot x^4 + 5 \cdot x^3 + 1$.

Przyjmij $a = -5$, $b = 5$, $N = 3$.

- 1: funkcja $[y] = f(x)$
- 2: $y = 4 \cdot x^4 + 5 \cdot x^3 + 1$
- 3: koniec funkcji

Metoda	Wynik
prostokątów lewych	6465.761317
prostokątów prawych	10632.427984
prostokątów średnich	3302.181070
trapezów	8549.094650
Simpsona	5051.152263
Gaussa 3pkt	5009.999985
dokładne	5010.000000