Całkowianie numeryczne

Wykład z przedmiotu Metody numeryczne

Jakub Bielawski
Uniwersytet Ekonomiczny w Krakowie

12 listopada 2016

Całkowanie numeryczne

Problematyka:

Całkowanie numeryczne funkcji polega na obliczaniu wartości całki oznaczonej:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

na podstawie zbioru wartości funkcji podcałkowej w przedziale $[a, b]$.

Całkowanie numeryczne w oparciu o wzory Newtona-Cotesa polega na zastąpieniu funkcji całkowanej wielomianem interpolacyjnym zadanego stopnia, którego całkę łatwo już wyliczyć korzystając z odpowiednich formuł.

Plan:

1. Metoda trapezów
2. Metoda Simpsona (parabol)
3. Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

Dla uzyskania lepszego przybliżenia wartości całki przedział całkowania dzieli się na odpowiednią liczbę podprzedziałów oznaczaną zwykle przez n i zastosowaniu danej metody całkowania na każdym z podprzedziałów z osobna.

Metoda trapezów

W metodzie trapezów w każdym z n podprzedziałów przybliżamy funkcję całkowaną wielomianem stopnia pierwszego, tj. funkcją liniową. W związku z tym potrzebujemy obliczyć wartość funkcji podcałkowej w $n+1$ punktach przedziału $[a, b]$, które obliczamy wykorzystując krok h.

$$h = \frac{b-a}{n} \tag{7.1}$$

$$x_0 = a, x_1 = a+h, x_2 = a+2h, \dots x_k = a+kh, \dots x_n = b$$
$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \dots y_k = f(x_k), \dots y_n = f(x_n)$$

Metoda trapezów

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \ldots + 2y_{n-1} + y_n\right) \tag{7.2}$$

Metoda trapezów

Obliczenia wygodnie jest zestawić w następującej tabeli:

x_i	x_0	x_1	x_2	...	x_{n-1}	x_n
y_i	y_0	y_1	y_2	...	y_{n-1}	y_n
α_i	1	2	2	...	2	1

Wówczas wyrażenie w nawiasie formuły (7.2) jest iloczynem dwóch ostatnich wierszy powyższej tabeli z pominięciem kolumny nagłówka.

Uwaga 7.1

Jeżeli liczba podprzedziałów nie jest podana, należy przyjąć $n = 1$ i w powyższych wzorach nie wystąpią współczynniki $\alpha_i = 2$ (pierwszy i ostatni współczynnik zawsze są równe 1).

Błąd metody trapezów

Błąd metody trapezów

Metoda trapezów jest metodą dokładną dla wielomianów stopnia co najwyżej pierwszego, a błąd bezwzględny wartości całki R jest oszacowany przy pomocy drugiej pochodnej funkcji podcałkowej:

$$R \leqslant \frac{1}{12}(b-a)h^2 f''(\xi), \tag{7.3}$$

gdzie $\xi \in (a, b)$.

W zastosowaniach szacujemy błąd wykorzystując wartość największą modułu drugiej pochodnej na przedziale (a, b), tj. $M_2 = \max\limits_{x\in(a,b)} |f''(x)|$.

Metoda trapezów

Przykład 7.1.
Wykorzystać metodę trapezów do oszacowania wartości całki

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

przyjmując $n = 3$. Następnie obliczyć całkę analitycznie i wyznaczyć błąd uzyskanego przybliżenia.

Rozwiązanie:
Obliczamy najpierw krok $h = \frac{1-(-1)}{3} = \frac{2}{3}$.
Konstruujemy tabelę wartości całkowanej funkcji oraz współczynników α_i.

x_i	-1	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	1
y_i	0	$\frac{3}{5}$	$\frac{6}{5}$	1
α_i	1	2	2	1

Wyznaczamy przybliżoną wartość całki korzystając ze wzoru (7.2):

$$\int_{-1}^{1} \frac{x+1}{x^2+1}\,\mathrm{d}x \approx \frac{\frac{2}{3}}{2}\left(0\cdot 1 + \frac{3}{5}\cdot 2 + \frac{6}{5}\cdot 2 + 1\cdot 1\right) = \frac{23}{15} \approx 1,5(3)$$

Metoda trapezów

Obliczamy całkę analitycznie:

$$\int_{-1}^{1} \frac{x+1}{x^2+1}\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \frac{x}{x^2+1} + \frac{1}{x^2+1}\,\mathrm{d}x = \left[\frac{1}{2}\ln(x^2+1) + \operatorname{arctg}(x)\right]_{-1}^{1}$$
$$= \frac{1}{2}\ln(2) + \operatorname{arctg}(1) - \frac{1}{2}\ln(2) - \operatorname{arctg}(-1) = \frac{\pi}{4} - \left(-\frac{\pi}{4}\right)$$
$$= \frac{\pi}{2} \approx 1,5708$$

Wobec tego błąd oszacowania jest równy:

$$R \approx |1,5708 - 1,5333| = 0,0375$$

Metoda Simpsona

W metodzie Simpsona w każdym z n podprzedziałów przybliżamy funkcję całkowaną wielomianem stopnia drugiego, tj. funkcją kwadratową (stąd inna nazwa – metoda parabol). W związku z tym potrzebujemy obliczyć wartość funkcji podcałkowej w $2n+1$ punktach przedziału $[a, b]$, które obliczamy wykorzystując krok h.

$$h = \frac{b-a}{2n} \tag{7.4}$$

$$x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, \ldots x_k = a + kh, \ldots x_{2n} = b$$
$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \ldots y_k = f(x_k), \ldots y_{2n} = f(x_{2n})$$

Metoda Simpsona

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}\left(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \ldots + 4y_{2n-1} + y_{2n}\right) \tag{7.5}$$

Metoda Simpsona

Obliczenia wygodnie jest zestawić w następującej tabeli:

x_i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	...	x_{2n-1}	x_{2n}
y_i	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	...	y_{2n-1}	y_{2n}
α_i	1	4	2	4	2	...	4	1

Wówczas wyrażenie w nawiasie formuły (7.5) jest iloczynem dwóch ostatnich wierszy powyższej tabeli z pominięciem kolumny nagłówka.

Uwaga 7.2

Jeżeli liczba podprzedziałów nie jest podana, należy przyjąć $n = 1$ i w powyższych wzorach wystąpią jedynie współczynniki: $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = 4$, $\alpha_2 = 1$.

Błąd metody Simpsona

Błąd metody Simpsona

Metoda Simpsona jest metodą dokładną dla wielomianów stopnia co najwyżej trzeciego, a błąd bezwzględny wartości całki R jest oszacowany przy pomocy czwartej pochodnej funkcji podcałkowej:

$$R \leqslant \frac{1}{180}(b-a)h^4 f^{(4)}(\xi), \tag{7.6}$$

gdzie $\xi \in (a, b)$.

Jako oszacowanie pochodnej znów możemy wykorzystać wartość największą modułu czwartej pochodnej na przedziale (a, b), tj. $M_4 = \max\limits_{x \in (a,b)} |f^{(4)}(x)|$.

Metoda Simpsona

Przykład 7.2.
Wykorzystać metodę Simpsona do aproksymacji wartości $\arcsin\frac{4}{5}$ przyjmując $n = 2$. Następnie oszacować błąd tego przybliżenia wykorzystując wzór (7.6) i porównać go z błędem rzeczywistym wiedząc, że $\arcsin\frac{4}{5} \approx 0,9273$.

Rozwiązanie:
Wyrażenie $\arcsin\frac{4}{5}$ zapisujemy za pomocą całki

$$\arcsin\frac{4}{5} = \arcsin\frac{4}{5} - \arcsin 0 = \int_0^{\frac{4}{5}} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x$$

Obliczamy krok $h = \frac{\frac{4}{5}-0}{2\cdot 2} = \frac{1}{5}$ oraz wartości funkcji podcałkowej w kolejnych węzłach:

x_i	0	$\frac{1}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{4}{5}$
y_i	1	$\frac{5\sqrt{6}}{12}$	$\frac{5\sqrt{2}}{21}$	$\frac{5}{4}$	$\frac{5}{3}$
α_i	1	4	2	4	1

Wyznaczamy przybliżoną wartość wyrażenia korzystając ze wzoru (7.5):

$$\arcsin\frac{4}{5} = \int_0^{\frac{4}{5}} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \approx \frac{\frac{1}{5}}{3}\left(1\cdot 1 + \frac{5\sqrt{6}}{12}\cdot 4 + \frac{5\sqrt{2}}{21}\cdot 2 + \frac{5}{4}\cdot 4 + \frac{5}{3}\cdot 1\right)$$
$$\approx 0,9288$$

Metoda Simpsona

Aby oszacować dokładność przybliżenia z wykorzystaniem wzoru (7.5) obliczamy pochodne funkcji podcałkowej $f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$:

$$f'(x) = \frac{x}{(\sqrt{1-x^2})^3} \qquad f''(x) = \frac{2x^2+1}{(\sqrt{1-x^2})^5}$$

$$f'''(x) = \frac{6x^3+9x}{(\sqrt{1-x^2})^7} \qquad f^{(4)}(x) = \frac{24x^4+72x^2+9}{(\sqrt{1-x^2})^9}$$

Czwarta pochodna jest na przedziale $\left[0, \frac{4}{5}\right]$ funkcją rosnącą (licznik rośnie z rosnącym argumentem, a mianownik – maleje), wobec czego wartość największą osiąga na prawym krańcu przedziału, tj. w punkcie $\frac{4}{5}$. Ponieważ $M_4 = f^{(4)}\left(\frac{4}{5}\right) \approx 6441$, to błąd przybliżenia obliczamy za pomocą wzoru (7.6):

$$R \leqslant \frac{1}{180}\left(\frac{4}{5} - 0\right)\left(\frac{1}{5}\right)^4 6441 \approx 0,0458.$$

Rzeczywisty błąd aproksymacji wynosi: $R \approx 0,0015$. Widać, że oszacowanie uzyskane ze wzoru (7.5) znacznie przekracza rzeczywisty błąd aproksymacji.

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

W metodzie $\frac{3}{8}$ Newtona w każdym z n podprzedziałów przybliżamy funkcję całkowaną wielomianem stopnia trzeciego. W związku z tym potrzebujemy obliczyć wartość funkcji podcałkowej w $3n+1$ punktach przedziału $[a,b]$, które obliczamy wykorzystując krok h.

$$h = \frac{b-a}{3n} \tag{7.7}$$

$$x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, \ldots x_k = a + kh, \ldots x_{3n} = b$$
$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \ldots y_k = f(x_k), \ldots y_{3n} = f(x_{3n})$$

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{3}{8} h \left(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + \ldots + 3y_{3n-1} + y_{3n}\right) \tag{7.8}$$

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

Obliczenia wygodnie jest zestawić w następującej tabeli:

x_i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	...	x_{3n-1}	x_{3n}
y_i	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	...	y_{3n-1}	y_{3n}
α_i	1	3	3	2	3	3	2	3	...	3	1

Wówczas wyrażenie w nawiasie formuły (7.8) jest iloczynem dwóch ostatnich wierszy powyższej tabeli z pominięciem kolumny nagłówka.

Uwaga 7.3

Jeżeli liczba podprzedziałów nie jest podana, należy przyjąć $n = 1$ i w powyższych wzorach wystąpią jedynie współczynniki: $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = 3$, $\alpha_2 = 3$, $\alpha_3 = 1$.

Błąd metody $\frac{3}{8}$ Newtona

Błąd metody $\frac{3}{8}$ Newtona

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona jest metodą dokładną dla wielomianów stopnia co najwyżej trzeciego, a błąd bezwzględny wartości całki R jest oszacowany przy pomocy czwartej pochodnej funkcji podcałkowej:

$$R \leqslant \frac{1}{80}(b-a)h^4 f^{(4)}(\xi), \tag{7.9}$$

gdzie $\xi \in (a, b)$.

Jako oszacowanie pochodnej stosujemy zwykle wartość największą modułu czwartej pochodnej na przedziale (a, b), tj. $M_4 = \max\limits_{x\in(a,b)} |f^{(4)}(x)|$.

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

Przykład 7.3.
Wyznaczyć minimalną liczbę podprzedziałów, która pozwoli oszacować wartość $\ln 4$ z dokładnością do 3 miejsc po przecinku przy zastosowaniu metody $\frac{3}{8}$ Newtona.

Rozwiązanie:
Wyrażenie $\ln 4$ zapisujemy za pomocą całki

$$\ln 4 = \ln 4 - \ln 1 = \int_1^4 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x$$

Obliczamy krok, który zależy od niewiadomej liczby podprzedziałów

$$h = \frac{4-1}{3n} = \frac{1}{n}$$

Obliczamy kolejne pochodne funkcji podcałkowej $f(x) = \frac{1}{x}$:

$$f'(x) = -\frac{1}{x^2} \qquad f''(x) = \frac{2}{x^3} \qquad f'''(x) = -\frac{6}{x^4} \qquad f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}$$

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

Czwarta pochodna funkcji podcałkowej jest funkcją malejącą na przedziale $[1, 4]$, wobec tego wartość największą osiąga na lewym krańcu przedziału, tj. w punkcie 1, stąd $M_4 = f^{(4)}(1) = 24$.

Korzystając ze wzoru (7.9) możemy przystąpić do wyznaczenia minimalnej liczby podprzedziałów:

$$\frac{1}{80}(4-1)\left(\frac{1}{n}\right)^4 24 \leqslant \frac{1}{1000}$$

Skąd po przekształceniach otrzymujemy:

$$n \geqslant 5,4772$$

Wobec tego przyjmujemy $n = 6$.

Metoda $\frac{3}{8}$ Newtona

Sprawdzimy dodatkowo, czy rzeczywiście zastosowanie metody $\frac{3}{8}$ Newtona z podziałem na 6 podprzedziałów pozwoli obliczyć $\ln 4$ z dokładnością do 3 miejsc po przecinku.

Obliczamy krok $h = \frac{1}{6}$ i tworzymy tabelę wartości funkcji podcałkowej:

x_i	1	$\frac{7}{6}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{3}$	$\frac{11}{6}$	2	$\frac{13}{6}$	$\frac{7}{3}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{8}{3}$	$\frac{17}{6}$	3	$\frac{19}{6}$	$\frac{10}{3}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{11}{3}$	$\frac{23}{6}$	4
y_i	1	$\frac{6}{7}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{6}{11}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{6}{13}$	$\frac{3}{7}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{6}{17}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{6}{19}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{2}{7}$	$\frac{3}{11}$	$\frac{6}{23}$	$\frac{1}{4}$
α_i	1	3	3	2	3	3	2	3	3	2	3	3	2	3	3	2	3	3	1

Wstawiamy wartości do wzoru (7.8) i otrzymujemy oszacowanie $\ln 4$:

$$\ln 4 = \int_1^4 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x \approx \frac{3}{8}\cdot\frac{1}{6}\left(1\cdot 1 + \frac{6}{7}\cdot 3 + \frac{3}{4}\cdot 3 + \frac{2}{3}\cdot 2 + \frac{3}{5}\cdot 3 + \ldots + \frac{6}{23}\cdot 3 + \frac{1}{4}\cdot 1\right)$$
$$\approx 1,386346$$

Porównując otrzymaną wielkość z wartością tablicową $\ln 4 \approx 1,386294$ widzimy, że błąd przybliżenia wynosi $R \approx 5,2\cdot 10^{-5}$.