11. Numerikus integrálás

11.1. Feladat

Interpolációs típusú-e az alábbi kvadratúra formula? Miért?

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

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

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

alakú, ahol

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{1}{3}, \quad A_0 = \frac{1}{2}, \\ x_1 &= \frac{2}{3}, \quad A_1 = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

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

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

ezért egyelőre nem sérült az interpolációs kvadratúra tulajdonság. Vizsgáljuk meg A_1-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

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

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:

$$\mu_0 = \int_0^1 1\ \mathrm{d}x = \big[x\big]_0^1 = 1,$$
$$\mu_1 = \int_0^1 x\ \mathrm{d}x = \left[\frac{x^2}{2}\right]_0^1 = \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\right) = \frac{1}{2}.$$

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?

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

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

$$\begin{aligned} x_0 &= -1, \quad & A_0 &= \frac{1}{4}, \\ x_1 &= 0, & A_1 &= \frac{1}{2}, \\ x_2 &= 1, & A_2 &= \frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Le kell ellenőrznünk, hogy $A_k = \int_{-1}^{1} \ell_k(x)\mathrm{d}x$ 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

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} \ell_0(x)\ \mathrm{d}x &= \int_{-1}^{1} \frac{x^2}{2} - \frac{x}{2}\ \mathrm{d}x = \\ &= \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} x^2 - x\ \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\cdot\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3} = \frac{1}{3} \neq \frac{1}{4} = A_0, \end{aligned}$$

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:

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

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

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

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

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

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:

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

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

$$\left|\int_1^2 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x - \frac{2}{3}\right| \leq \frac{2}{24}\cdot 1^3 = \frac{1}{12}.$$

(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:

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T(f)\right| \leq \frac{M_2}{12}\cdot(b-a)^3.$$

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

$$\left|\int_1^2 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x - \frac{3}{4}\right| \leq \frac{2}{12}\cdot 1^3 = \frac{1}{6}.$$

(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:

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

A Simpson-formulához tartozó hibabecslés a következő:

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S(f)\right| \leq \frac{M_4}{4!\cdot 5!}(b-a)^5.$$

A hibabecslés felírásához számítsuk ki M_4-et:

$$f'''(x) = -6x^{-4}$$
$$f^{(4)}(x) = 24x^{-5} = \frac{24}{x^5} \to \left|\frac{24}{x^5}\right| \leq 24 = M_4 \quad (x \in [1,2]).$$

Ez alapján tehát

$$\left|\int_1^2 \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x - \frac{25}{36}\right| \leq \frac{24}{4! \cdot 5!}1^5 = \frac{1}{5!} = \frac{1}{120}.$$

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:

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

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

$$\begin{aligned}
&f(x) = 2^{-x},\\
&f'(x) = -\ln(2)\cdot 2^{-x},\\
&f''(x) = (\ln(2))^2\cdot 2^{-x}, \implies \left|(\ln(2))^2\cdot 2^{-x}\right| \leq (\ln(2))^2\cdot 2^1 = M_2 \quad (x\in[-1,1]).
\end{aligned}$$

Innen a hibabecslés

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

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

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

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:

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

Átrendezve az egyenlőtlenséget kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
&\frac{4}{3}\cdot \ln^2(2)\cdot 10^3 \leq m^2 \\
&\sqrt{\frac{4}{3}\cdot \ln^2(2)\cdot 10^3} \approx 25,310 \leq m \quad \Longrightarrow \quad m \geq 26.
\end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned}
&f'''(x) = -(\ln(2))^3\cdot 2^{-x} \\
&f^{(4)}(x) = (\ln(2))^4\cdot 2^{-x} \quad \Longrightarrow \quad \left|(\ln(2))^4\cdot 2^{-x}\right| \leq (\ln(2))^4\cdot 2 =: M_4 \ (x\in[-1,1]).
\end{aligned}$$

Innen a hibabecslés

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

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

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

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:

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

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

$$\begin{aligned} \frac{16 \cdot \ln^4(2)}{45 \cdot m^4} &\leq 10^{-3} \\ \frac{10^3 \cdot 16 \cdot \ln^4(2)}{45} &\leq m^4 \\ \sqrt[4]{\frac{10^3 \cdot 16 \cdot \ln^4(2)}{45}} &\approx 2,7464 \leq m \quad \Longrightarrow \quad m \geq 4 \end{aligned}$$

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!