1 Całkowanie numeryczne-kwadratury Newtona-Cotesa

Niech f będzie funkcją określoną na przedziale $[a, b]$ i niech $I(f)$ oznacza całkę z funkcją wagową p, tzn.

$$I(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx, \tag{1}$$

gdzie funkcja p jest nieujemna na przedziale $[a, b]$, zeruje co najwyżej w skończonej liczbie punktów i jest całkowalna.

Do przybliżonego obliczenia $I(f)$ stosujemy wzory zwane kwadraturami. Najczęściej stosowanymi w praktyce są kwadratury korzystające jedynie z wartości funkcji f w punktach zwanych węzłami, tzn.:

$$S(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \qquad x_k \in [a, b]. \tag{2}$$

Chcielibyśmy korzystać z takich kwadratur, dla których błąd przybliżenia całki

$$|E(f)| = |I(f) - S(f)| \tag{3}$$

jest jak najmniejszy. Dodatkowo stawiamy żądanie, aby kwadratura o ustalonej liczbie węzłów była dokładna dla wielomianów możliwie wysokiego rzędu.
Mówimy, że kwadratura S jest rzędu r ($r \geq 1$), jeżeli $I(w) = S(w)$ dla wszystkich wielomianów w stopnia mniejszego niż r oraz istnieje wielomian w stopnia r taki, że $I(w) \neq S(w)$.

Kwadraturę $S(f)$ możemy uzyskać poprzez zastąpienie w całce funkcji f funkcją F, która ją interpoluje. Najłatwiej uzyskać wzór na kwadraturę, gdy funkcja F jest wielomianem interpolacyjnym.

Korzystając z wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a stopnia n postaci $L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$ dostajemy kwadratury

$$S(f) = \int_a^b p(x)L_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{4}$$

gdzie $A_k = \int_a^b p(x)l_k(x)dx$, $l_k(x) = \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$.

Jeżeli węzły w kwadraturze interpolacyjnej są równoodległe ($x_0 = a$, $x_n = b$, $x_k = a+kh$, $h = \frac{b-a}{n}$) to kwadratury nazywamy kwadraturami Newtona-Cotesa. Najprostszym przypadkiem jest funkcja wagowa $p(x) \equiv 1$. Współczynniki $A_k = \int_a^b \prod_{j=0,j\neq k}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx = h\int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^{n} \frac{t-j}{k-j}dt$ spełniają równość $A_k = A_{n-k}$.

Podstawowe kwadratury N-C:

(1) Kwadratura trapezów-bierzemy wielomian interpolacyjny L_1 stopnia $n = 1$ oparty na węzłach a, b

$$A_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = h\int_0^1 \frac{t-1}{0-1}dt = \frac{b-a}{2} \tag{5}$$

oraz

$$A_1 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = h\int_0^1 \frac{t-0}{1-0}dt = \frac{b-a}{2}, \tag{6}$$

czyli

$$S_T(f) = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right). \tag{7}$$

Jeżeli funkcja f należy do klasy $C^2([a,b])$ to reszta dla wzoru trapezów wynosi

$$E_T(f) = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \tag{8}$$

dla pewnego $\eta \in (a,b)$.

(2) Kwadratura Simpsona (parabol)-wielomian interpolacyjny L_2 oparty na węzłach $a, (a+b)/2, b$

$$S_P(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right). \tag{9}$$

Reszta dla wzoru Simpsona wynosi

$$E_P(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \tag{10}$$

dla pewnego $\eta \in (a,b)$.

(3) Złożony wzór trapezów-dzielimy przedział $[a,b]$ na n podprzedziałów o tej samej długości $h = (b-a)/n$

$$S_{ZT}(f) = \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih)\right). \tag{11}$$

(4) Złożony wzór parabol

$$S_{ZP}(f) = \frac{h}{6}\left(f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(a+ih+h/2)\right). \tag{12}$$

Zadanie 1. Zbadaj rząd kwadratury trapezów.

Rozwiązanie. Wystarczy badać kwadraturę i całkę tylko dla wielomianów bazowych $(1, x, x^2 ...)$. Postać kwadratury trapezów to:

$$S_T(f) = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right). \tag{13}$$

Po kolei bierzemy wielomiany bazowe:

$$I(1) = \int_a^b 1dx = b-a \tag{14}$$

oraz

$$S_T(1) = \frac{b-a}{2}(1+1) = b-a. \tag{15}$$

Dla wielomianu stopnia zero mamy więc równość $I(1) = S(1)$. Bierzemy kolejny wielomian:

$$I(x) = \int_a^b xdx = \frac{b^2-a^2}{2} \tag{16}$$

oraz

$$S_T(x) = \frac{b-a}{2}(a+b) = \frac{b^2-a^2}{2}. \tag{17}$$

Dla wielomianów stopnia 1 też mamy równość całki i kwadratury.

$$I(x^2) = \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3-a^3}{3} \tag{18}$$

oraz

$$S_T(x^2) = \frac{b-a}{2}\left(a^2+b^2\right) = \frac{b^3-ab^2+ba^2-a^3}{2}. \tag{19}$$

Stąd dla wielomianów stopnia dwa nie ma równości całki i kwadratury, a wielomianem dla którego zachodzi nierówność jest x^2. Zatem rząd kwadratury trapezów wynosi 2.

Zadanie 2. Wyznacz kwadraturę Newtona-Cotesa dla $\int_0^1 f(x)dx$ korzystając z 4 równoodległych węzłów.

Rozwiązanie. Wyznaczamy po kolei współczynniki A_0, A_1, A_2, A_3 dla węzłów $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{3}$, $x_2 = \frac{2}{3}$, $x_3 = 1$.

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{1}{3}\int_0^3 \prod_{j=0,j\neq 0}^{3} \frac{t-j}{0-j}dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \left(\frac{t-1}{0-1}\right)\left(\frac{t-2}{0-2}\right)\left(\frac{t-3}{0-3}\right)dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \frac{(t-1)(t-2)(t-3)}{-6}dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \frac{(t^3-6t^2+11t-6)}{-6}dt = \frac{1}{8} \end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{3}\int_0^3 \prod_{j=0,j\neq 1}^{3} \frac{t-j}{0-j}dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \left(\frac{t-0}{1-0}\right)\left(\frac{t-2}{1-2}\right)\left(\frac{t-3}{1-3}\right)dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \frac{(t)(t-2)(t-3)}{2}dt \\ &= \frac{1}{3}\int_0^3 \frac{(t^3-5t^2+6t)}{2}dt = \frac{3}{8} \end{aligned} \tag{21}$$

Z własności kwadratur N-C pozostałe współczynniki wynoszą $A_0 = A_3 = \frac{1}{8}$ oraz $A_1 = A_2 = \frac{3}{8}$. Ostatecznie kwadratura wynosi

$$S(f) = \frac{1}{8}\left(f(0) + 3f(\frac{1}{3}) + 3f(\frac{2}{3}) + f(1)\right). \tag{22}$$

Zadanie 3. Za pomocą wzoru trapezów i parabol oblicz następujące całki

a) $\int_0^1 \sin(x)dx$

b) $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$

c) $\int_1^2 \ln(x)dx$

d) $\int_0^{0.1} x^{1/3}dx$

e) $\int_0^\pi e^{\sin(x)}dx$

Rozwiązanie. a) Dla wzoru trapezów na przedziale całkowania $[0,1]$ mamy dwa węzły $x_0 = 0$ oraz $x_1 = 1$. Podstawiając do wzoru odpowiednie wartości funkcji sinus dostajemy

$$S_T(f) = \frac{1}{2}\sin(0) + \frac{1}{2}\sin(1) = \frac{\sin(1)}{2}. \tag{23}$$

Analogicznie w przypadku wzoru parabol mamy trzy węzły $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{2}$ oraz $x_2 = 1$ i podstawiając wartości funkcji sinus mamy

$$S_P(f) = \frac{1}{6}\left(\sin(0) + 4\sin(\frac{1}{2}) + \sin(1)\right) = \frac{2}{3}\sin(\frac{1}{2}) + \frac{\sin(1)}{6}. \tag{24}$$

Zadanie 4. Za pomocą złożonego wzoru trapezów i parabol oblicz następujące całki

a) $\int_0^1 \sqrt{x}\sin(x)dx$

b) $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^3}$

Rozwiązanie. a) Wzory kwadratur dla N-podziałów przedziału $[0,1]$ wynoszą

$$S_{ZT}(\sqrt{x}\sin(x)) = \frac{1}{2N}\left(\sin(1) + 2\sum_{i=1}^{N-1}\sqrt{\frac{i}{N}}\sin(\frac{i}{N})\right) \tag{25}$$

oraz

$$S_{ZP}(\sqrt{x}\sin(x)) = \frac{1}{6N}\left(\sin(1) + 2\sum_{i=1}^{N-1}\sqrt{\frac{i}{N}}\sin(\frac{i}{N}) + 4\sum_{i=0}^{N-1}\sqrt{\frac{i+1/2}{N}}\sin(\frac{i+1/2}{N})\right) \tag{26}$$

Zadanie 5. Zaimplementuj złożone wzory trapezów oraz parabol. Przetestuj te kwadratury zmieniając liczbę podziałów dla całek

a) $\int_0^3 \cos(x^2)dx$

b) $\int_0^{2\pi} \left(x^2\cos(20x) + 0.5\right) dx.$

Przeanalizuj otrzymane wyniki.

Rozwiązanie. a) Wzór złożonej kwadratury trapezów dla N-podziałów przedziału $[0,3]$ wynosi

$$S_{ZT}^N(\cos(x^2)) = \frac{3}{2N}\left(1 + \cos(9) + 2\sum_{i=1}^{N-1}\cos(\frac{3i}{N})\right). \tag{27}$$

Algorytm obliczania powyższej kwadratury dla różnych n.

```
read n
s:=(1+cos(9))/2
for i:=1 to n do
  s:=s+cos(3*i/n)
end
s:=3*s/n
```

Ciąg kwadratur $\{S_{ZT}^N(f)\}_N$ jest zbieżny do całki z funkcji ciągłej f. Dla większych wartości N (lepszego podziału) dostajemy coraz dokładniejsze przybliżenia wartości całki.