Ewa Pabisek
Adam Wosatko
Piotr Pluciński

Matematyka stosowana i metody numeryczne

Konspekt z wykładu

10 Całkowanie numeryczne

Wzory całkowania numerycznego pozwalają na obliczenie przybliżonej wartości całki:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

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

$$\varphi(x) = f_0\,N_0(x) + f_1\,N_1(x) + \cdots + f_n\,N_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i N_i(x)$$

otrzymamy tzw. wzór kwadraturowy.

10.1 Kwadratura całkowania

Wzorem kwadraturowym (kwadraturą) nazywamy:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f_i \int_a^b N_i(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} w_i\,f_i = S(f)$$

w którym

$$w_i = \int_a^b N_i(x)\,\mathrm{d}x, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n$$

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

W zależności od sposobu postępowania przy wyborze położeń węzłów interpolacji w przedziale całkowania kwadratury dzielimy na dwie grupy:

1. kwadratury Newtona - Cotesa, węzły są rozmieszczone równomiernie w całym przedziale całkowania (zamknięte końce)

2. kwadratury Gaussa, węzły są rozmieszczone nierównomiernie, tak aby zminimalizować błąd kwadratury (otwarte końce)

10.2 Kwadratury Newtona - Cotessa

10.2.1 Wzór prostokątów

Po zastosowaniu interpolacji funkcji podcałkowej $f(x)$ za pomocą wielomianu

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

otrzymujemy

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b f(x_0)\,\mathrm{d}x \;\rightarrow\; S(f) = (b-a)\,f(x_0) \tag{1}$$

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 $x_0 = b$

10.2.2 Wzór trapezów

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

$$\begin{gathered} I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \Big[\, f_0\,L_0 + f_1\,L_1 \Big]\,\mathrm{d}x = \\ \int_a^b \Big[\, f(a)\,\frac{x-b}{a-b} + f(b)\,\frac{x-a}{b-a} \Big] \;\rightarrow\; S(f) = \frac{b-a}{2}\,\Big[\, f(a) + f(b) \Big] \end{gathered} \tag{2}$$

10.2.3 Wzór Simpsona

Zastosowanie kwadratowej interpolacji Lagrange'a prowadzi do wzoru:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \Big[\, f_0\,L_0 + f_1\,L_1 + f_2\,L_2 \Big]\,\mathrm{d}x =$$

$$\int_a^b \Big[f_0 \frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)} + f_1 \frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} + f_2 \frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} \Big]\,\mathrm{d}x$$

Ostatecznie kwadratura (wzór) Simpsona przyjmuje postać:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}\,h\,\big(f_0 + 4\,f_1 + f_2\big) = S(f), \quad h = \frac{b-a}{2} \tag{3}$$

Wzór Simpsona 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 $I(W_4) \neq S(W_4)$

10.3 Kwadratury Gaussa

Dokładność kwadratury można zwiększyć rezygnując z warunku równomiernego rozmieszczenia węzłów interpolacji. Wartości wag oraz położenia węzłów całkowania ustala się tak aby kwadratura całkowania przybliżona była wzorem dokładnym dla jednomianu możliwie wysokiego stopnia.

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

W praktyce wagi i punkty Gaussa nie wyznacza się z powyższego warunku. Są one stablicowane dla rodziny pewnych wielomianów ortogonalnych (z wagą) w przedziale $< -1, 1 >$.

$l.p.$	$\xi_i, \quad i = 0, \ldots, n$	$w_i, \quad i = 0, \ldots, n$
1	$\xi_0 = 0$	$w_0 = 2$
2	$\xi_0 = +1/\sqrt{3}$	$w_0 = 1$
	$\xi_1 = -1/\sqrt{3}$	$w_1 = 1$
3	$\xi_0 = +\sqrt{0.6}$	$w_0 = 5/9$
	$\xi_1 = 0$	$w_1 = 8/9$
	$\xi_2 = -\sqrt{0.6}$	$w_2 = 5/9$
4	$\xi_0 = +0.86113631$	$w_0 = 0.34785485$
	$\xi_1 = +0.33998104$	$w_1 = 0.65214515$
	$\xi_2 = -0.33998104$	$w_2 = 0.65214515$
	$\xi_3 = -0.86113631$	$w_3 = 0.34785485$

W ogólnym przypadku gdy liczymy całkę z dowolnego przedziału (a, b), konieczna jest transformacja liniowa między danym przedziałem a przedziałem $< -1, 1 >$, tak aby można było zastosować dane z tabeli. Wzory na transformację $(a, b) \rightarrow < -1, 1 >$

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

$$\mathrm{d}\xi = \frac{2}{b-a}\mathrm{d}x \quad \Leftrightarrow \quad \mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\mathrm{d}\xi$$

co daje:

$$\int_a^b f(x)\, \mathrm{d}x = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\Big(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\xi\Big)\, \mathrm{d}\xi$$

oraz wzór kwadraturowy Gaussa:

$$\int_a^b f(x)\, \mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^{n} w_i\, f\Big(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\,\xi_i\Big). \tag{4}$$

Przykład:

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

Zastosować dwupunktową metodę Gaussa ($n = 1$):

Rozwiązanie:

$w_0 = w_1 = 1, \quad \xi_0 = 1/\sqrt{3},\, \xi_1 = -1/\sqrt{3}$

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

$$\frac{b-a}{2}\Big[\, f\Big(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\Big) + f\Big(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\Big)\Big] = 5.33333$$

Wyniki dla przedstawianych wzorów:

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

10.4 Wzory złożone (sumacyjne)

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

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

Teraz można zapisać:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{N}\int_{a_j}^{b_j} f(x)\,\mathrm{d}x = I_1(f) + I_2(f) + \cdots + I_N(f) \tag{5}$$

Do obliczania każdego składnika $I_i(f)$ sumy można wykorzystać dowolny wzór kwadraturowy.

10.4.1 Metoda lewych, środkowych i prawych prostokątów

(a) $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx H\sum_{j=1}^{N} f(x_{j-1}) = H\,\big(f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1}\big)$$

(b) $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx H\sum_{j=1}^{N} f(\frac{x_j - x_{j-1}}{2}) = H\,\big(f_{01} + f_{12} + f_{23} + \cdots + f_{N-1\,N}\big)$$

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

(c) $\displaystyle\int\limits_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx H \sum_{j=1}^{N} f\big(x_j\big) = H\left(f_1 + f_2 + \cdots + f_N\right)$

10.4.2 Metoda trapezów

$$\int\limits_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{2}H \sum_{j=1}^{N} \Big[f(x_{j-1} + f(x_j)\Big] = H\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + 12 f_N\right)$$

lub

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

10.4.3 Metoda Simpsona

$$\int\limits_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}\,H\,\big[\,(\,f_0 + f_N\,) + 4\,(\,f_1 + f_3 + \cdots + f_{N-1}\,) + 2\,(f_2 + f_4 + \cdots + f_{N-2}\,)\,\big],$$

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

10.4.4 Metoda Gaussa

$$\int\limits_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{2}\,\frac{b-a}{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{i=0}^{lpc=2} w_i\, f(X_i),$$

gdzie

$$X_i = \frac{x_j + x_{j+1}}{2} + \frac{x_{j+1} - x_j}{2}\,\xi_i.$$

11 Różniczkowanie numeryczne

Zadanie różniczkowania numerycznego polega na obliczeniu wartości pochodnych k– tego rzędu funkcji $y = f(x)$, za pomocą wzorów przybliżonych tzw. wzorów różnicowych. Są to wzory służące do obliczenia pochodnej w węźle i za pomocą znanych wartości funkcji w innych węzłach, np.: mamy dane wartości funkcji $f(x_0)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$ w równo oddalonych węzłach x_0, x_1, x_2, należy zbudować wzory różnicowe do obliczenia pierwszej i drugiej pochodnej w węzłach $x_i, i = 0, 1, 2$.

11.1 Rozwinięcie funkcji w szereg Taylora

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{6}h^3 f'''(x) + \frac{1}{24}h^4 f^{IV}(x) + \ldots$$

11.1.1 Centralne wzory różnicowe

$$f_1' = \frac{1}{2h}\,(-f_0 + f_2), \quad f_1'' = \frac{1}{h^2}\,(f_0 - 2\,f_1 + f_2)$$

11.1.2 Iloraz wprzód

$$f_0' = \frac{1}{2h}\,(-3\,f_0 + 4\,f_1 - f_2), \quad f_0'' = \frac{1}{h^2}\,(f_0 - 2\,f_1 + f_2)$$

11.1.3 Iloraz wstecz

$$f_2' = \frac{1}{2h}(f_0 - 4\,f_1 + 3\,f_2), \quad f_2'' = \frac{1}{h^2}\,(f_0 - 2\,f_1 + f_2)$$