

Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur

Plan wykładu:

1. Kwadratury Newtona-Cotesa

- a) wzory: trapezów, parabol etc.
- b) kwadratury złożone

2. Ekstrapolacja

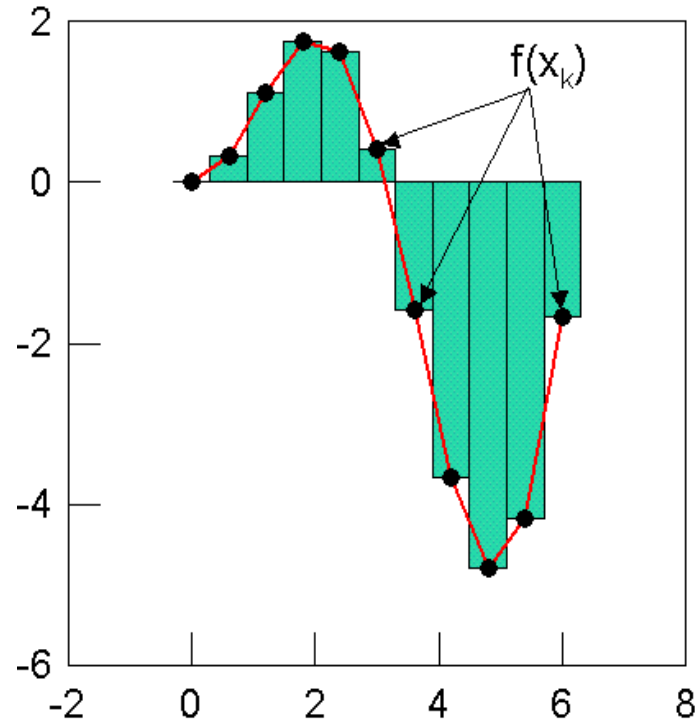
- a) Ekstrapolacja Richardsona
- b) Metoda Romberga
- c) Metody adaptacyjne
- d) Formuła sumacyjna Eulera-Maclaurina (Romberg, Burilisch)

3. Kwadratury Gaussa

- a) Gaussa-Legendre'a
- b) Gaussa-Hermitte'a
- c) Gaussa-Laguerre'a

4. Całkowanie funkcji wielu zmiennych

Całkowanie numeryczne oznacza zastosowanie metod numerycznych w celu wyznaczenia przybliżonej wartości **całki oznaczonej**.



$$C = \int_a^b f(x) dx$$

Skoro funkcję podcałkową możemy interpolować to wielomian interpolacyjny można wykorzystać do całkowania. Dla danego ciągu wartości funkcji podcałkowej $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N)$ definiujemy wielomian interpolacyjny Lagrange'a:

$$\varphi(x) = L_N(x) = \sum_{k=0}^N \Phi_k(x) F(x_k)$$

$$\Phi_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_N)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_N)} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^N \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \quad 2$$

Podstawiamy wielomian interpolacyjny w miejsce funkcji podcałkowej:

$$\int_a^b F(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx = \sum_{k=0}^N A_k F(x_k)$$

$$A_k = \int_a^b \Phi_k(x)dx$$

Powyższe wzory definiują tzw. kwadraturę. A_k są współczynnikami kwadratur.

Jeśli spełniony jest warunek

$$|f(x) - \varphi(x)| < \varepsilon, \quad x \in [a, b]$$

To wtedy

$$\begin{aligned} & \left| \int_a^b F(x)dx - \sum_{k=0}^N A_k F(x_k) \right| = \\ & = \left| \int_a^b (F(x) - \varphi(x))dx \right| \leq \varepsilon(b-a) \end{aligned}$$

Dokładność wyznaczonej wartości całki jest ograniczona dokładnością przybliżenia funkcji podcałkowej wielomianem (lub inną funkcją).

Jeśli funkcja podcałkowa posiada osobliwości (np. jest nieograniczona, lub przedział całkowania jest nieskończony) wówczas powyższy schemat całkowania ulega modyfikacji – funkcję podcałkową zastępujemy iloczynem funkcji wagowej i nowej gładkiej funkcji:

$$F(x) = p(x)f(x)$$

Funkcja wagowa $p(x)$ zawiera wszystkie osobliwości funkcji $F(x)$ lub jej dobór wynika z zastosowanych wielomianów ortogonalnych:

$$\begin{aligned} \int_a^b F(x)dx &= \int_a^b p(x)f(x)dx \approx \\ &\approx \int_a^b p(x)\varphi(x)dx = \sum_{k=0}^N A'_k f(x_k) \end{aligned}$$

$$A'_k = \int_a^b p(x)\Phi_k(x)dx$$

Chcemy wyznaczyć wartość całki:

$$I(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx$$

Stosując wzór

$$S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k), \quad x \in [a, b]$$

Powyższy wzór nosi nazwę kwadratury, a punkty x_1, x_2, \dots, x_N węzłami kwadratury.

Błąd przybliżenia całki kwadraturą (błąd metody):

$$E(f) = I(f) - S(f)$$

Kryterium dokładności kwadratury można przyjąć zgodność $I(W)$ z $S(W)$, gdy W jest wielomianem. Wówczas mówimy że dana kwadratura jest rzędu r ($r \geq 1$) jeśli

$$I(W) = S(W)$$

dla wszystkich wielomianów stopnia mniejszego niż r .

Kwadratura jest zbieżna dla każdej funkcji $f \in C([a, b])$ wtedy gdy:

- 1) Jest ona zbieżna dla każdego wielomianu
- 2) Istnieje liczba M niezależna od N taka że

$$B_N = \sum_{k=0}^N |A_k^N| \leq M, \quad N = 1, 2, \dots$$

Kwadratury Newtona-Cotesa

Rozważamy przypadek z węzłami równoodległymi $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, \dots, N$. Jeśli końce przedziału są również węzłami wówczas kwadratury noszą nazwę **kwadratur zamkniętych**.

Przybliżamy funkcję podcałkową wielomianem Lagrange'a stopnia co najwyżej N

$$f(x_i) = L_N(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

$$L_N(x) = \sum_{k=0}^N f(x_k) \Phi_k(x)$$

$$\Phi_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^N \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

Błąd przybliżenia (interpolacji)

$$\begin{aligned} R_{N+1}(x) &= f(x) - L_N(x) \\ &= \frac{1}{(N+1)!} \omega_{N+1}(x) f^{(N+1)}(\xi) \\ \xi &\in (a, b) \end{aligned}$$

Wprowadzamy nową zmienną t

$$x = a + ht \quad \Phi_k(t) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^N \frac{t - j}{k - j} \quad 4$$

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b \varphi(x)dx = \\
&= \sum_{k=0}^N f_k \int_a^b \Phi_k(x)dx \\
&= h \sum_{k=0}^N f_k \int_0^N \varphi_k(t)dt \\
&= h \sum_{k=0}^N f_k A_k
\end{aligned}$$

Ostatecznie otrzymujemy:

$$S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f_k$$

$$A_k = h \frac{(-1)^{N-k}}{k!(N-k)!} \int_0^N \frac{t(t-1)\dots(t-N)}{(t-k)} dt$$

gdzie:

$$f_k = f(a + kh)$$

$$h = \frac{b-a}{N}$$

Własności:

- 1) Gdy N jest nieparzyste wówczas kwadratura jest rzędu (N+1) (dokładna dla wielomianów stopnia N), dla parzystego N rząd kwadratury wynosi (N+2)
- 2) Jeżeli funkcja podcałkowa jest r-krotnie różniczkowalna, wówczas błąd metody można przedstawić w postaci:

$$E(f) = C_r f^{(r)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

współczynnik C_r nie zależy od f.

- 3) Dla dużych N oszacowanie błędu jest trudne ze względu na pochodne wysokich rzędów lub ze względu na numeryczne kasowanie się współczynników A_k

- 4) Współczynniki A_k zależą od N. W szczególności (wzór na A_k) zachodzi

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |A_k| = \infty$$

dlatego metoda kwadratur Newtona-Cotesa nie jest zbieżna w klasie funkcji ciągłych.

W praktyce przedział całkowania dzieli się na m podprzedziałów. W każdym podprzedziale określa się N (N=1,2,3) i przeprowadza całkowanie. Taka procedura prowadzi do uzyskania **kwadratur złożonych**.

Kwadratury dla $N=1,2,\dots,6$ (całkowanie w podprzedziale)

$N=1$ (**wzór trapezów**)

$$h = b - a$$

$$A_0 = -h \int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}h$$

$$A_1 = h \int_0^1 tdt = \frac{1}{2}h$$

$$S(f) = \frac{1}{2}h(f_0 + f_1)$$

Ze wzoru na błąd interpolacji wynika, że kwadratura dokładnie przybliża wielomian $N+1=1+1=2$ stopnia.

Zatem błąd wyznaczenia przybliżonej wartości całki wynosi

$$\begin{aligned} E(f) &= \frac{1}{2!} \int_a^b (x-a)(x-b)f^{(2)}(\xi)dx \\ &= -\frac{1}{12}h^3 f^{(2)}(\xi), \quad \xi \in [a, b] \end{aligned}$$

$N=2$ (**wzór parabol - Simpsona**)

$$h = \frac{b-a}{2}$$

$$A_0 = \frac{1}{3}h \quad A_1 = \frac{4}{3}h \quad A_2 = \frac{1}{3}h$$

$$S(f) = \frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

Ponieważ N jest parzyste więc kwadratura jest dokładna dla wielomianów stopnia $N+1$ i jest rzędu $N+2$

$$\begin{aligned} E(f) &= \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{4!} \int_a^b (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)dx \\ &= -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi) \end{aligned}$$

$$\xi \in [a, b]$$

N	w	A_0/w	A_1/w	A_2/w	A_3/w	A_4/w	A_5/w	A_6/w	błąd	wzór
1	$(1/2)h$	1	1						$h^3 (1/12) f^{(2)}(\xi)$	trapezów
2	$(1/3)h$	1	4	1					$h^5 (1/90) f^{(4)}(\xi)$	parabol
3	$(3/8)h$	1	3	3	1				$h^5 (3/80) f^{(4)}(\xi)$	3/8
4	$(4/90)h$	7	32	12	32	7			$h^7 (8/945) f^{(6)}(\xi)$	Milne'a
5	$(5/288)h$	19	75	50	50	75	19		$h^7 (275/12096) f^{(6)}(\xi)$	-----
6	$(6/840)h$	41	216	27	272	27	216	41	$h^9 (9/1400) f^{(8)}(\xi)$	Weddle'a

Kwadratury złożone Newtona-Cotesa

Kwadratury wyższych rzędów są rzadko stosowane. Natomiast błąd kwadratur niższych rzędów jest proporcjonalny do długości przedziału całkowania w odpowiedniej potęgze. Zatem niski rząd kwadratury może nie zapewnić wymaganej dokładności.

Problemu tego można uniknąć, dzieląc przedział całkowania na m podprzedziałów, w których przeprowadza się całkowanie kwadaraturami niższych rzędów a wyniki całkowania sumuje się.

Wzór złożony trapezów

Przedział całkowania dzieli się na m poprzedziałów:

$$h = \frac{b-a}{m}$$

$$\begin{aligned} S(f) &= \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2} h (f_k + f_{k+1}) \\ &= h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{m-1} + \frac{1}{2} f_m \right) \end{aligned}$$

Gdzie

$$f_k = f(a + k \cdot h)$$

Zakładamy że

$$f \in C^2([a, b])$$

Błąd złożonego wzoru trapezów

$$\begin{aligned} E(f) &= -\frac{h^3}{12} \sum_{k=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_k) \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12m^2} \cdot \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_k) \end{aligned}$$

$$\xi_k \in (a + kh, a + (k+1)h)$$

Wyraz

$$\frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_k) = f^{(2)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

jest średnią arytmetyczną wartości drugiej pochodnej w przedziale całkowania.

Można więc zapisać

$$E(f) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f^{(2)}(\xi)$$

Błąd zależy od 3 potęgi długości przedziału. Ale zwiększając m można istotnie ograniczyć jego wartość.

Wzór złożony parabol.

Przedział całkowania $[a, b]$ dzielimy na m podprzedziałów (**m jest parzyste**).

W podprzedziałach $[a, a+2h], \dots, [a+(m-1)h, b]$ stosuje się wzór parabol a wyniki cząstkowe sumuje:

$$\begin{aligned} S(f) &= \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{m/2} (f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}) \\ &= \frac{h}{3} [f_0 + f_m + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{m-2}) \\ &\quad + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{m-1})] \end{aligned}$$

Zakładamy

$$f \in C^4([a, b])$$

$$E(f) = -\frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{m/2} f^{(4)}(\xi_k)$$

$$\xi_k \in (a + 2(k-1)h, a + 2kh)$$

Ze względu na ciągłość pochodnej istnieje taki punkt że:

$$\frac{2}{m} \sum_{k=1}^{m/2} f^{(4)}(\xi_k) = f^{(4)}(\xi)$$

Wówczas błąd złożonego wzoru parabol wyraża się wzorem

$$E(f) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{(4)}(\xi)$$

Ekstrapolacja Richardsona

(przypadek dla różniczkowania ale zastosowanie ogólne)

Rozwijamy funkcję $f(x)$ w szereg Taylora w otoczeniu punktów

$$x \pm h$$

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k f^{(k)}(x)$$

$$f(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-1)^k h^k f^{(k)}(x)$$

$$f(x+h) = f(x) + hf^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2} f^{(2)}(x) + \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x) + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2} f^{(2)}(x) - \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x) + \dots$$

i odejmujemy od siebie oba wyrażenia

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf^{(1)}(x) + \frac{2}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{2}{5!} h^5 f^{(5)}(x) + \dots$$

a następnie przegrupowujemy wyrazy by obliczyć pierwszą pochodną

$$f^{(1)}(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \left[\frac{1}{3!} h^2 f^{(3)}(x) + \frac{1}{5!} h^4 f^{(5)}(x) + \frac{1}{7!} h^6 f^{(7)}(x) + O(h^8) \right] \quad 10$$

Powyższa formuła w postaci ogólnej

$$L_{1,h} = \phi(h) + a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots$$

co można interpretować jako przybliżenie $f^{(1)}(x)$.
Za h podstawimy $h/2$

$$L_{1,h/2} = \phi\left(\frac{h}{2}\right) + a_2 \frac{h^2}{4} + a_4 \frac{h^4}{16} + a_6 \frac{h^6}{64} + \dots$$

i obliczymy różnicę

$$\begin{aligned} L_2 &= (L_h - 4L_{h/2})/3 \\ &= \frac{4}{3}\phi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}\phi(h) - a_4 \frac{h^4}{4} - 5a_6 \frac{h^6}{16} - \dots \end{aligned}$$

Zatem L_1 przybliża $f^{(1)}(x)$ z dokładnością $O(h^4)$
(wyrazów rzędu h^4).

Dokonujemy podstawienia

$$\psi(h) = \frac{4}{3}\phi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}\phi(h)$$

w L_1

$$L_{2,h} = \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \dots$$

$$L_{1,h/2} = \psi\left(\frac{h}{2}\right) + b_4 \frac{h^4}{16} + b_6 \frac{h^6}{64}$$

$$\begin{aligned} L_3 &= (L_{1,h} - 4L_{1,h/2})/3 \\ &= \frac{15}{16}\psi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15}\psi(h) - b_6 \frac{h^6}{20} - \dots \end{aligned}$$

Podstawiając do L_2

$$\varphi(h) = \frac{15}{16}\psi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15}\psi(h)$$

Otrzymujemy

$$L_{3,h} = \varphi(h) + c_6 h^6 + c_8 h^8 + \dots$$

Powtarzając M -krotnie powyższy proces dostaniemy
coraz lepsze przybliżenie pierwszej pochodnej tzn.
dokładność jej przybliżenia jest na poziomie $O(h^{2^M})$.
(o ile $h < 1$).

Algorytm dla powyższej procedury jest następujący

1. Wybieramy h i liczymy

$$D_{n,0} = \phi\left(\frac{h}{2^n}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, M$$

2. Następnie obliczamy

$$D_{n,k} = \frac{4^k}{4^k - 1} D_{n,k-1} - \frac{1}{4^k - 1} D_{n-1,k-1}$$

$$k = 1, 2, \dots, M$$

$$n = k, k+1, \dots, M$$

Obliczając rekurencyjnie wyrazy wg 2 dostajemy przybliżenia

$$D_{n,0} = L + O(h^2)$$

$$D_{n,1} = L + O(h^4)$$

$$D_{n,2} = L + O(h^6)$$

$$D_{n,3} = L + O(h^8)$$

... ..

$$D_{n,k-1} = L + O(h^{2k}), \quad h \rightarrow 0$$

Algorytm ten definiuje tzw. **ekstrapolację**

Richardsona. Generalnie jest to proces rekurencyjnego wyznaczania pewnej wielkości (pochodnej, całki), co można zdefiniować przy pomocy wzoru

$$D_{n,k-1} = L + \sum_{j=k}^{\infty} A_{jk} \left(\frac{h}{2^n}\right)^{2j}$$

co w połączeniu z pkt. 2 daje szukane przybliżenie D_{m,m^*}

Kolejne kroki algorytmu można zapisać w postaci tablicy

$$\begin{array}{ccccccc} D_{0,0} & & & & & & \\ D_{1,0} & D_{1,1} & & & & & \\ D_{2,0} & D_{2,1} & D_{2,2} & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ D_{M,0} & D_{M,1} & D_{M,2} & \dots & D_{M,M} & & \end{array}$$

Metoda Romberga

Korzystamy z wzoru trapezów

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

$$\begin{aligned} S_n &= h \sum_{i=0}^n f(a + ih) - \frac{f(a) + f(b)}{2} \\ &= \frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^n f\left(a + i \frac{b-a}{n}\right) - \frac{f(a) + f(b)}{2} \end{aligned}$$

Jeśli $x \in [0, 1]$

to dla kolejnych wartości n dostajemy poniższy ciąg przybliżeń wartości całki

$$S_1 = \frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(1)$$

$$S_2 = \frac{1}{4}f(0) + \frac{1}{2} \left[f\left(\frac{1}{2}\right) \right] + \frac{1}{4}f(1)$$

$$S_4 = \frac{1}{8}f(0) + \frac{1}{4} \left[f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{1}{2}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right) \right] + \frac{1}{8}f(1)$$

$$\begin{aligned} S_8 &= \frac{1}{16}f(0) + \frac{1}{8} \left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{1}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right) \right] + \frac{1}{16}f(1) \end{aligned}$$

Łatwo zauważyć, że do obliczenia T_{2n} można wykorzystać już obliczone T_n

$$S_2 = \frac{1}{2}S_1 + \frac{1}{2} \left[f\left(\frac{1}{2}\right) \right]$$

$$S_4 = \frac{1}{2}S_2 + \frac{1}{4} \left[f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right) \right]$$

$$S_8 = \frac{1}{2}S_4 + \frac{1}{8} \left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right) \right]$$

co ogólnie dla przedziału całkowania $[a, b]$ można zapisać jako

$$S_{2n} = \frac{1}{2}S_n + h \sum_{i=1}^n f(a + (2i-1)h)$$

W metodzie Romberga zakładamy, że odległość między $(n+1)$ węzłami wynosi

$$h_n = \frac{b-a}{2^n}$$

Do obliczenia całki wykorzystujemy rekurencyjną formułę z wzorem trapezów

$$R_{0,0} = \frac{1}{2}(b-a)[f(a) + f(b)]$$

$$R_{n,0} = \frac{1}{2}R_{n-1,0} + \frac{b-a}{2^n} \sum_{i=1}^{2^n-1} f\left(a + (2i-1)\frac{b-a}{2^n}\right)$$

$$R_{n,m} = R_{n,m-1} + \frac{R_{n,m-1} - R_{n-1,m-1}}{4^m - 1}$$

Wartości kolejnych przybliżeń można uporządkować w postaci tablicy podobnie jak w przypadku ekstrapolacji Richardsona.

Obliczenia przerywa się gdy spełniony jest warunek

$$|R_{k,k} - R_{k-1,k-1}| \leq \varepsilon, \quad \varepsilon \in R$$

lub po osiągnięciu zadanej liczby iteracji k .

Metoda Romberga jest przykładem **kwadratury adaptacyjnej**.

Metody adaptacyjne

Liczymy numerycznie całkę np. wzorem parabol

$$\int_a^b f(x)dx = S(a,b) - \frac{(b-a)^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

$$\xi \in [a, b]$$

$$S(a,b) = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

Dzielimy przedział $[a,b]$ na n podprzedziałów i stosujemy wzór parabol w każdym z nich

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n (S_i + e_i)$$

gdzie: e_i jest **lokalnym błędem** przybliżenia wartości całki w i -tym podprzedziale $[x_{i-1}, x_i]$.

Założmy że jego wartość możemy oszacować zgodnie z poniższym wzorem

$$|e_i| \leq \varepsilon \frac{x_i - x_{i-1}}{b-a}$$

wówczas oszacowanie błędu całkowitego od góry jest następujące

$$\left| \sum_{i=1}^n e_i \right| \leq \sum_{i=1}^n |e_i| \leq \frac{\varepsilon}{b-a} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) = \varepsilon$$

co pozwala oszacować wartość bezwzględną błędu całki wyznaczonej numerycznie

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=1}^n S_i \right| \leq \varepsilon$$

Wniosek: przy założonej wartości ε , odpowiednio niski poziom błędu wartości całki osiągniemy zwiększając liczbę węzłów całkowania.

Formuła sumacyjna Eulera-Maclaurina

Jest metodą ekstrapolacyjną (można z niej uzyskać np. metodę Romberga)

Dla funkcji $f(x) \in C^{2m+2}$, $x \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x) dx &= \frac{f(0)}{2} + \frac{f(1)}{2} + \sum_{l=1}^m \frac{B_{2l}}{(2l)!} (f^{(2l-1)}(0) - f^{(2l-1)}(1)) \\ &\quad - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi), \quad 0 < \xi < 1 \end{aligned}$$

gdzie: współczynniki B_{2l} oraz B_{2m+2} są liczbami Bernoulliego.

Dowód - Stoer, Burilisch „Introduction to ...”

Liczby te wyznacza się korzystając z wielomianów Bernoulliego
- to wartości wielomianu dla $x=0$

$$B'_{k+1}(x) = (k+1)B_k(x)$$

$$B_0(x) = 1, \quad B_1(x) = x - \frac{1}{2}, \quad B_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}$$

$$B_3(x) = x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x, \quad B_4(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}$$

$$B_k = B_k(0) \Rightarrow B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \quad B_8 = -\frac{1}{30}, \dots$$

Zastępując funkcję $g(x)$ jej wartościami określonymi na siatce równoodległych węzłów

$$\begin{aligned}
 \int_0^{x_N} f(x) dx &= \sum_{i=1}^N \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = h \left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{N-1}) + \frac{f(x_N)}{2} \right) \\
 &= h \sum_{i=0}^N f(x_i) - h \left(\frac{f(x_0) + f(x_N)}{2} \right) \\
 &= \sum_{l=1}^m h^{2l} \frac{B_{2l}}{(2l)!} (f^{(2l-1)}(x_0) - f^{(2l-1)}(x_N)) \\
 &\quad - h^{2m+2} \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b-a) f^{(2m+2)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_N
 \end{aligned}$$

h	$=$	$\frac{b-a}{N}$
x_i	$=$	$a + ih$
i	$=$	$0, 1, \dots, N$

W powyższym wzorze rozpoznajemy wzór złożony trapezów. Po przegrupowaniu wyrazów dostajemy związek formuły Eulera-Maclaurina z kwadraturą:

$$\begin{aligned}
 S_N &= \sum_{i=0}^N f(x_i) \\
 &= \frac{1}{h} \left(\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx + \frac{f(x_0)}{2} + \frac{f(x_N)}{2} \right) + \sum_{l=1}^m h^{2l-1} \frac{B_{2l}}{(2l)!} (f^{(2l-1)}(x_0) - f^{(2l-1)}(x_N)) \\
 &\quad - h^{2m+2} \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b-a) f^{(2m+1)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_N
 \end{aligned}$$

Związek formuły E-L z metodą Romberga

$$S(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \dots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2}$$

$$\tau_0 = \int_a^b f(x) dx$$

$$\tau_k = \frac{B_{2k}}{(2k)!} (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)), \quad k = 1, 2, \dots, m$$

$$\alpha_{m+1}(h) = \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b-a) f^{(2m+2)}(\xi(h)), \quad a < \xi < b$$

Jeśli pochodna $f^{(2m+2)}$ jest ciągła w $[a,b]$ oraz istnieje taka liczba L , że

$$|f^{(2m+2)}(x)| \leq L, \quad x \in [a, b]$$

(czyli pochodna nie posiada osobliwości) to wówczas istnieje także taka liczba M_{m+1} , że zachodzi:

$$|\alpha_{m+1}(h)| \leq M_{m+1}$$

Sposoby podziału przedziału całkowania:

a) Romberga

$$h_0 = \frac{b-a}{2^i}, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

b) Burilscha - liczba wykonywanych operacji nie rośnie tak szybko jak w metodzie Romberga

$$h_0 = b-a, \quad h_1 = \frac{h_0}{2}, \quad h_2 = \frac{h_0}{3}, \dots, h_i = \frac{h_{i-2}}{2}, \quad i = 3, 4, \dots$$

$$S_{m,m} \approx \tau_0$$

$$S_{ik} = S_{i,k-1} + \frac{S_{i,k-1} - S_{i-1,k-1}}{\left[\frac{h_{i-k}}{h_i}\right]^2 - 1}$$

Wzór na $S(h)$ jest rozwinięciem asymptotycznym w h jeśli współczynniki τ_k $k \leq m$ nie zależą od h . Jeśli $m \rightarrow \infty$ wówczas prawa strona w formule E-M staje się szeregiem nieskończonym

$$\tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \dots$$

Uwaga: dla $h > 0$ nieskończony szereg jest rozbieżny, ale dla m skończonego (małe) wzór pracuje dobrze, tj. zwiększając m minimalizujemy wszystkie wyrazy poza τ_0 (czyli poszukiwaną wartością całki).

Przykład. Obliczyć wartość całki

$$I = \int_0^1 t^5 dt \qquad h_0 = 1, \quad h_1 = \frac{1}{2}, \quad h_2 = \frac{1}{4}$$

$$S_{00} = 0.500000$$

$$S_{11} = 0.187500$$

$$S_{10} = 0.265625$$

$$S_{22} = 0.166667 (= 1/6)$$

$$S_{21} = 0.167969$$

$$S_{20} = 0.192383$$

Przykład. Stosując wzór sumacyjny EM obliczyć wartość sumy

$$I = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(1+j)^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

Przyjmijmy $f(x) = \frac{1}{x^2}$ $x_0 = h = 1$

$$S \approx \int_1^{\infty} \frac{1}{x^2} dx + \frac{f(x)}{2} \Big|_{x=x_0} + \frac{f(x)}{2} \Big|_{x=\infty} + \sum_{l=1}^m B_{2l}$$

m	I-S
0	0.145
1	-0.022
2	0.012
3	-0.012
4	0.021
5	-0.055
6	0.198
7	-0.968
8	6.124
9	-48.847

Brak zbieżności wynika z wartości $h=1$.
Dla $h>1$ zbieżność jest osiągnięta bardzo szybko
(około 10 pierwszych wyrazów).

Kwadratury Gaussa

Nadal rozpatrujemy kwadratury typu:

$$S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k)$$

$$A_k = \int_a^b p(x) \Phi_k(x) dx$$

ale nieco zmienimy metodologię postępowania.

Ustalamy funkcję wagową $p(x)$

oraz liczbę węzłów $(N+1)$. Szukamy:

a) położenia węzłów

b) współczynników A_k

tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy.

Kwadratura tego typu nosi nazwę **kwadratury**

Gaussa. Do wyznaczenia kwadratur Gaussa

używa się **wielomianów ortogonalnych**.

Ciąg wielomianów

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)\}$$

Nazywamy ortogonalnymi w przedziale $[a,b]$ jeśli zachodzi pomiędzy nimi związek:

$$(\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x) \varphi_r(x) \varphi_s(x) dx = 0$$
$$r \neq s$$

Tw.1. Wielomiany ortogonalne mają tylko pierwiastki rzeczywiste, leżące w przedziale $[a,b]$.

Tw.2. Nie istnieje kwadratura Gaussa rzędu wyższego niż $2(N+1)$. Kwadratura Gaussa jest rzędu $2(N+1)$ wtedy i tylko wtedy, gdy węzły x_k są pierwiastkami wielomianu $P_{N+1}(x)$.

Tw. 3. Wszystkie współczynniki A_k w kwadraturach Gaussa są dodatnie.

Dlaczego rząd kwadratury Gaussa jest tak wysoki?

Musimy ustalić położenia $N+1$ węzłów oraz

współczynniki kombinacji liniowej $N+1$ wielomianów ortogonalnych. Daje to $2n+2$ rząd.

Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w $[a,b]$. Kwadratury te są dokładne dla wielomianów stopnia $2N+1$.

Korzystamy z tożsamości Christoffela-Darboux

$$\sum_{k=0}^n \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(y)}{\gamma_k} = \frac{\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(y) - \varphi_n(x)\varphi_{n+1}(y)}{\alpha_n \gamma_n (x - y)}$$

$$\alpha_k = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_k} \quad \gamma_k = \int_a^b p(x) \varphi^2(x) dx$$

A_k - współczynnik stojący w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potędze

Podstawmy za y zero wielomianu n -tego stopnia

$$y = d_j$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = -\frac{\varphi_n(x)\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n (x - d_j)} \quad / \cdot p(x)\varphi_0(x)$$

Po wykonaniu mnożenia a następnie całkowania otrzymamy

$$\frac{\varphi_0(d_j)}{\gamma_0} \gamma_0 = -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b p(x) \frac{\varphi_0(x)\varphi_n(x)}{x - d_j} dx$$

Korzystamy teraz z definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a

$$f(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x)$$

$$l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - a_j) \omega'_n(a_j)}$$

Wybieramy oczywiście przypadek taki że:

$$\omega_n(x) = \varphi_n(x)$$

oraz korzystamy z faktu

$$\varphi_0(x) = 1$$

$$\begin{aligned} 1 &= -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b p(x) \frac{\varphi_n(x)}{x - d_j} dx \\ &= -\frac{\varphi_{n+1}(d_j) \varphi'_n(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b p(x) l_j(x) dx \\ &= -\frac{\varphi_{n+1}(d_j) \varphi'_n(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} A_j \end{aligned}$$

Skąd otrzymujemy ogólny wzór na współczynniki kwadratury A_j

$$A_j = -\frac{\beta_{n+1}\gamma_n}{\beta_n\varphi_{n+1}(d_j)\varphi'_n(d_j)} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Wzór na błąd całkowania

$$E = \frac{\gamma_n}{\beta_n^2(2n)!} f^{(2n)}(\eta) \quad \eta \in (a, b)$$

Jeśli uwzględnimy że węzły indeksujemy od 0 do n to wielomian będzie wyższego rzędu - zastępujemy n przez n+1

$$A_j = -\frac{\beta_{n+2}\gamma_{n+1}}{\beta_{n+1}\varphi_{n+2}(d_j)\varphi'_{n+1}(d_j)} \quad j = 1, 2, \dots, n, n+1$$

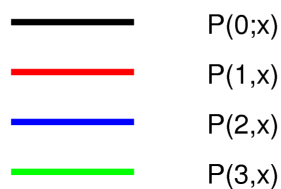
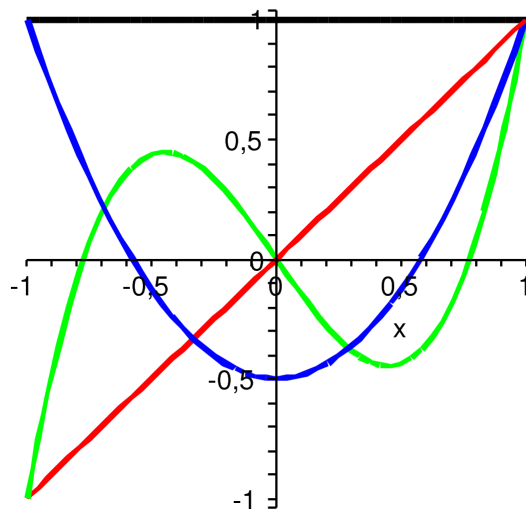
Kwadratura dla przedziału skończonego (Gaussa-Legendre'a).
Dla tego typu kwadratury przyjmujemy:

$$p(x) = 1$$

$$[a, b] = [-1, 1]$$

W tym przedziale ciąg wielomianów ortogonalnych tworzą wielomiany Legendre'a

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$



$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2}$$

$$P_3(x) = \frac{5x^3 - 3x^2}{2}$$

Współczynniki A_k :

$$A_k = -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}(x_k)P'_{N+1}(x_k)}$$

Błąd kwadratury:

$$E(f) = \frac{2^{2N+3}((N+1)!)^4}{(2N+3)((2N+2)!)^3} f^{(2N+3)}(\xi) \quad -1 < \xi < 1$$

Węzły x_k stanowią pierwiastki wielomianu $P_{N+1}(x)$.

(jak je znaleźć? => metody poszukiwania zer wielomianów)

Dla kwadratur niskiego rzędu węzły i współczynniki A_k są stabilizowane. Aby zastosować wzory z przedziału $[-1, 1]$ w przedziale $[a, b]$ należy dokonać transformacji liniowej zmiennej niezależnej:

$$x \in [-1, 1], \quad t \in [a, b]$$

$$t = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$$

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 g(x)dx$$

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

$$\int_a^b f(t)dt \approx S(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^N A_k f(t_k)$$

$$t_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_k$$

W praktyce nie używa się kwadratur wysokiego rzędu. O wiele lepszym rozwiązaniem jest zastosowanie kwadratur złożonych tj. kwadratur niskiego rzędu w każdym podprzedziale a wyniki sumuje się.

N	k	x_k	A_k
1	0, 1	(-/+)0.577350	1
2	0, 2 1	(-/+)0.774597 0	5/9 8/9
3	0, 3 1, 2	(-/+)0.861136 (-/+)0.339981	0.347855 0.652145
4	0, 4 1, 3 2	(-/+)0.906180 (-/+)0.538469 0	0.236927 0.478629 0.568889

Kwadratury dla przedziału jedno- i obustronnie nieskończonego

Kwadratura Gaussa-Laguerre'a

$$[a, b] = [0, \infty)$$

$$p(x) = e^{-x}$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Laguerre'a:

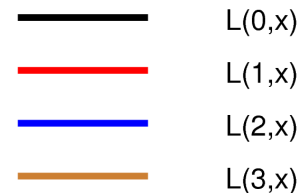
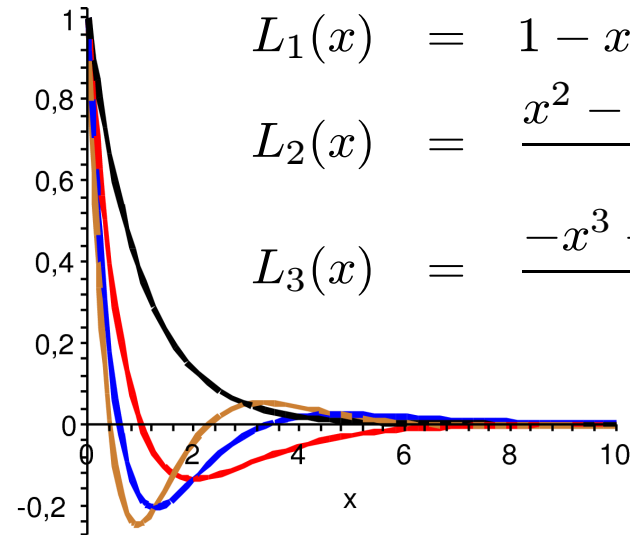
$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = 1 - x$$

$$L_2(x) = \frac{x^2 - 4x + 2}{2}$$

$$L_3(x) = \frac{-x^3 + 9x^2 - 18x + 6}{6}$$



Węzły x_k są pierwiastkami wielomianu $L_{N+1}(x)$.

$$A_k = \frac{((N+1)!)^2}{L'_{N+1}(x_k)L_{N+2}(x_k)}$$

$$E(f) = \frac{((N+1)!)^2}{(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\eta)$$

$$\eta \in (0, \infty)$$

Wzór całkowania:

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k)$$

Kwadratura Gaussa-Hermite'a

$$p(x) = e^{-x^2}$$

$$(a, b) = (-\infty, \infty)$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a

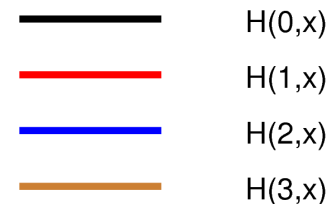
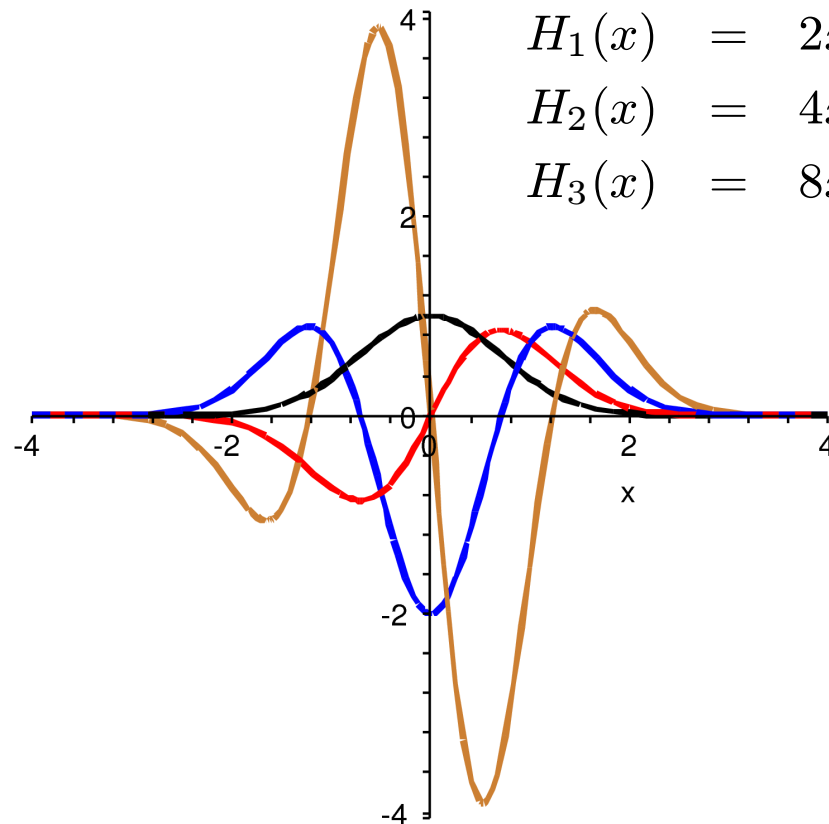
$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$



x_k są zerami wielomianu H_{N+1}

$$A_k = \frac{2^{N+2}(N+1)!}{H'_{N+1}(x_k)H_{N+2}(x_k)}$$

$$E(f) = \frac{(N+1)!\sqrt{\pi}}{2^{N+1}(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\eta)$$

$$\eta \in (-\infty, \infty)$$

Wzór przybliżonego całkowania:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k)$$

Uwagi końcowe:

- 1) Kwadratury Gaussa są dokładniejsze od kwadratur Newtona-Cotesa przy uwzględnieniu tej samej liczby węzłów
- 2) Kwadratury Gaussa mają rząd $r=2N+2$ dla $(N+1)$ węzłów, podczas gdy kwadratury NC osiągają ten rząd dla $(2N+1)$ węzłów
- 3) Po ustaleniu rzędu kwadratury stosuje się wzory złożone dla coraz mniejszego kroku całkowania do momentu braku zmian w kolejnym przybliżeniu
- 4) Całkowanie stabilizowanej funkcji podcałkowej lepiej wykonać przy użyciu kwadratur Newtona-Cotes'a (użycie kwadratur Gaussa może wymagać dodatkowej interpolacji)

Całkowanie funkcji wielu zmiennych

Przy całkowaniu funkcji wielu zmiennych pojawiają się problemy:

- 1) Konstrukcja wielomianów interpolacyjnych jest możliwa tylko dla odpowiednio położonych węzłów i regularnych obszarów całkowania
- 2) Czas obliczeń rośnie bardzo szybko wraz z liczbą zmiennych. W praktyce liczba zmiennych nie przekracza 4.

Zakładamy, że obszar całkowania można opisać układem nierówności:

$$\Omega \subset R^M$$

$$\begin{array}{rcl} a_1 & \leq & x_1 \leq b_1 \\ a_2(x_1) & \leq & x_2 \leq b_2(x_1) \\ \dots\dots\dots & \dots & \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1}) & \leq & x_M \leq b_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1}) \end{array}$$

Szukamy wartości całki wielokrotnej:

$$I(f) = \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} f(x_1, x_2, \dots, x_M) dx_1 \dots dx_M$$

$$I(f) = \int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2(x_1)}^{b_2(x_1)} dx_2 \dots \int_{a_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1})}^{b_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1})} f(x_1, x_2, \dots, x_M) dx_M$$

Wartość całki wielokrotnej oblicza się poprzez M-krotne zastosowanie kwadratur jednowymiarowych.

Przykład dla dwóch wymiarów.

$$I(f) = \int_{a_1}^{b_1} g(x_1) dx_1 \quad g(x_1) = \int_{a_2}^{b_2} f(x_1, x_2) dx_2$$

$$I_{N_1}(g) = \sum_{n=0}^{N_1} A_n g(x_{1,n}) \quad g(x_{1,n}) \approx I_{N_{2,n}}(f_n) = \sum_{\nu=0}^{N_{2,n}} B_{\nu,n} f(x_{1,n}, x_{2,\nu})$$

Po złożeniu obu kwadratur otrzymujemy:

$$\begin{aligned} I(f) = \iint_{\Omega} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 &= \sum_{n=0}^{N_1} \sum_{\nu=0}^{N_{2,n}} B_{\nu,n} f(x_{1,n}, x_{2,\nu}) + R_{N_1}(g) + \\ &+ \sum_{n=0}^{N_{2,n}} A_n R_{N_{2,n}}(f_n) \end{aligned}$$

gdzie: $R_{N_1}(g)$ -reszta kwadratury $I_{N_1}(g)$

$R_{N_{2,n}}(f_n)$ -reszta kwadratury $I_{N_{2,n}}(f_n)$

Uwagi:

- 1) Przedział całkowania po zmiennej x_2 może się zmieniać wraz z wartością x_1
- 2) Liczba węzłów kwadratur $I_{N_{2,n}}(f_n)$ może być różna dla każdego węzła $x_{1,n}$
- 3) Liczba użytych węzłów

$$\sum_{n=0}^{N_1} (N_{2,n} + 1)$$

Jeśli liczba w każdej kwadraturze byłaby jednakowa i równa $(N+1)$ wówczas obliczenie wartości całki w M wymiarowej przestrzeni wiązałoby się z wykonaniem $(N+1)^M$ obliczeń.

Przykład.

Jeśli $N=1$ i $M=10$ wówczas $(N+1)^M = (1+1)^{10} = 1048576$

Przy dużej liczbie wymiarów ($M > 4$) lepiej jest posługiwać się znacznie wydajniejszą metodą Monte Carlo.