Całkowanie numeryczne

Wykład 6

- Kwadratury Newtona-Cotesa

- Wzór trapezów i wzór Simpsona

- Kwadratury złożone

Wstęp

Jest znanym faktem, że całki wielu funkcji nie wyrażają się przez funkcje elementarne. Taka sytuacja ma miejsce dla np. dla

$$\int e^{-x^2} dx.$$

Dlatego nie możemy znaleźć dokładnych wartości takich całek jak

$$\int_0^2 e^{-x^2} dx, \quad \int_0^\pi \cos(3\cos\phi) d\phi, \quad \int_0^1 \int_{x^2}^x \tan(xy^2) dx dy.$$

Ogólnie rzecz biorąc, w sytuacji niemożności obliczenia całki

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

zastępujemy funkcję f inną, bliską jej funkcją g, której całkę można łatwo obliczyć. Stosujemy zatem wzór przybliżony

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b g(x)dx.$$

Taką „bliską'' funkcją może być wielomian interpolujący funkcję f (wykład 5), bo jego całkę jest łatwo obliczyć. Podejściem alternatywnym do interpolacji może być zastosowanie wzoru Taylora (wykład 2, str.4), np.

$$\int_0^1 e^{x^2}dx \approx \int_0^1 \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!}x^{2k}dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!}\int_0^1 x^{2k}dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{(2k+1)k!}.$$

Ćwiczenie 1. *Stosując wzór Taylora obliczyć całkę*

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

z dokładnością do 10^{-16}.

Ćwiczenie 2. *Stosując wzór Taylora obliczyć całkę*

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

z dokładnością do 10^{-12}.

Ćwiczenie 3. *Stosując wzór Taylora obliczyć całkę*

$$\int_0^1 e^{x} dx$$

z dokładnością do 10^{-8}.

Kwadratury Newtona-Cotesa

Zastosujmy teraz interpolację wielomianową dla funkcji podcałkowej f. W przedziale całkowania $[a, b]$ wybierzmy $n+1$ węzłów:

$$a = x_0, x_1, \ldots, x_n = b$$

i zastosujmy wzór interpolacyjny Lagrange'a, wtedy

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x), \quad \text{gdzie} \quad l_k(x) = \prod_{i=0, i \neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Stąd dostajemy, że

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b l_k(x)dx.$$

Teraz przyjmując, że

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \quad (0 \leqslant k \leqslant n),$$

możemy zapisać prościej

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

Otrzymaliśmy typowy wzór całkowania numerycznego, nazywany tradycyjnie *kwadratatturą*.

Jeżeli węzły interpolacji są równomiernie rozłożone, tzn.

$$x_k = a + \frac{(b-a)k}{n}$$

dla $0 \leqslant k \leqslant n$, to kwadratura ta nosi nazwę *wzoru Newtona-Cotesa*.

Wzór trapezów

Przyjmując we wzorze Newtona-Cotesa $n = 1$, otrzymujemy:

$$x_0 = a \quad \text{i} \quad x_1 = b,$$

a stąd w konsekwencji

$$l_0(x) = \frac{b-x}{b-a}, \qquad l_1(x) = \frac{x-a}{b-a}.$$

Po scałkowaniu tych wielomianów liniowych dostajemy

$$A_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \frac{1}{2}(b-a), \qquad A_1 = \int_a^b l_1(x)dx = \frac{1}{2}(b-a),$$

co prowadzi do tzw. *wzoru trapezów* postaci

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}(b-a)[f(a) + f(b)].$$

Przez *błąd wzoru całkowania numerycznego* będziemy rozumieć różnicę pomiędzy wartością dokładną całki a jej wartością przybliżoną.

Błąd wzoru trapezów jest równy

$$-\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi),$$

gdzie $\xi \in (a,b)$, o ile druga pochodna funkcji f jest ciągła w przedziale (a,b).

Wzór trapezów jest dokładny tylko dla wielomianów stopnia co najwyżej pierwszego. Dla innych funkcji daje dosyć „grube'' przybliżenie. Niedogodność tą można poprawić dzieląc przedział $[a,b]$ na n podprzedziałów jednakowej długości, tzn. $[x_0, x_1]$, $[x_1, x_2]$, itd., gdzie $x_k = a + kh$ dla $k = 0, 1, \ldots, n$ i $h = \frac{b-a}{n}$, i do każdego z tych podprzedziałów stosując wzór trapezów. Dostajemy wtedy tzw. *złożony wzór trapezów*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}h\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b)\right].$$

Co prościej zapisujemy

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{k=0}^{n}{}'' f(a+kh),$$

pamiętając o tym, że symbol $\sum''$ oznacza, że pierwszy i ostatni składnik tej sumy należy podzielić przez 2.

Jeżeli druga pochodna funkcji f jest ciągła w (a,b), to błąd tego wzoru wynosi

$$-\frac{1}{12n^2}(b-a)^3 f''(\xi),$$

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

Ćwiczenie 4. *Stosując wzór trapezów obliczyć całkę*

$$\int_1^2 e^{-x^2} dx$$

z dokładnością do 10^{-6}.

Ćwiczenie 5. *Stosując wzór trapezów obliczyć całkę*

$$\int_0^\pi e^{-x} \sin(4x) dx$$

z dokładnością do 10^{-7}.

Ćwiczenie 6. *Stosując wzór trapezów obliczyć całkę*

$$\int_0^1 e^{x} dx$$

z dokładnością do 10^{-8}.

Wzór Simpsona

Przyjmując we wzorze Newtona-Cotesa $n = 2$ i stosując interpolację dla węzłów $\{a, \frac{a+b}{2}, b\}$ dostajemy tzw. *wzór Simpsona*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

Wzór jest dokładny dla wszystkich wielomianów stopnia co najwyżej trzeciego. Jeżeli czwarta pochodna funkcji f jest ciągła w przedziale (a, b), to błąd tego wzoru wynosi

$$-\frac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi),$$

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

Dokładność wzoru Simpsona można poprawić stosując go do n jednakowej długości podprzedziałów przedziału $[a, b]$. Przyjmijmy oznaczenia

$$x_k = a + kh$$

dla $k = 0, 1, \ldots, 2n$ i $h = \frac{b-a}{2n}$. Zauważmy, że w każdym podprzedziale znajduje się po trzy węzły interpolacji.

Mamy wtedy

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx,$$

a stąd po uproszczeniach dostajemy tzw. *złożony wzór Simpsona*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{3}h\left[f(x_0) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{2k-1}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{2k}) + f(x_{2n})\right].$$

Jeżeli czwarta pochodna funkcji f jest ciągła w przedziale (a, b), to błąd tego wzoru wynosi

$$-\frac{1}{2880n^4}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi),$$

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

Ćwiczenie 7. *Stosując wzór Simpsona obliczyć całkę*

$$\int_1^2 e^{-x^2} dx$$

z dokładnością do 10^{-6}.

Ćwiczenie 8. *Stosując wzór Simpsona obliczyć całkę*

$$\int_0^\pi e^{-x} \sin(4x) dx$$

z dokładnością do 10^{-7}.

Ćwiczenie 9. *Stosując wzór Simpsona obliczyć całkę*

$$\int_0^1 e^{x} dx$$

z dokładnością do 10^{-8}.