Adam Wosatko
Piotr Pluciński
Ewa Pabisek

# Matematyka stosowana i metody numeryczne

Konspekt z wykładu

## 10 Całkowanie numeryczne

Wzory całkowania numerycznego pozwalają na obliczenie przybliżonej wartości całki:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a)$$

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

$$\varphi(x) = f_0\,N_0(x) + f_1\,N_1(x) + \cdots + f_n\,N_n(x)$$

otrzymamy tzw. wzór kwadraturowy.

### 10.1 Kwadratura całkowania

Wzorem kwadraturowym (kwadraturą) nazywamy:

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

w którym

$$w_i = \int_a^b N_i(x)\,dx, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n$$

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 położenia 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 - Cotesa

### 10.2.1 Wzór prostokątów

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

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

otrzymujemy

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

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.

$$\begin{gathered} I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b \Big[\, f_0\, L_0^1 + f_1\, L_1^1 \Big]\, dx = \\ \int_a^b \Big[\, f(a)\,\frac{x-b}{a-b} + f(b)\,\frac{x-a}{b-a} \Big] \;\rightarrow\; S(f) = \frac{b-a}{2}\Big[\, f(a) + f(b) \Big] \end{gathered} \tag{2}$$

### 10.2.3 Wzór Simpsona

Zastosowanie kwadratowej interpolacji Lagrange'a prowadzi do wzoru:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b \Big[\, f_0\, L_0^2 + f_1\, L_1^2 + f_2\, L_2^2 \Big]\, dx =$$

$$\int_a^b \Big[ f(a)\frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)} + f(c)\frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} + f(b)\frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} \Big]\, dx$$

gdzie $c = \dfrac{a+b}{2}$.

Ostatecznie kwadratura (wzór) Simpsona przyjmuje postać:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \;\rightarrow\; S(f) = \frac{b-a}{6}\big( f(a) + 4\,f(c) + f(b) \big) \tag{3}$$

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 $I(W_4) \neq S(W_4)$

### 10.2.4 Zestawienie współczynników wagowych dla wzorów Newtona-Cotesa

| $n$ | $w'_0$ | $w'_1$ | $w'_2$ | $w'_3$ | $w'_4$ | $w'_5$ | $m$ | metoda |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | | | | | | 1 | prostokątów |
| 1 | 1 | 1 | | | | | 2 | trapezów |
| 2 | 1 | 4 | 1 | | | | 6 | Simpsona |
| 3 | 1 | 3 | 3 | 1 | | | 8 | |
| 4 | 7 | 32 | 12 | 32 | 7 | | 90 | |
| 5 | 19 | 75 | 50 | 50 | 75 | 19 | 288 | |

Wartości wag $w_i$ występujące we wzorze:

$$I(f) = \int_{x_0=a}^{x_n=b} f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_i) = S(f) \tag{4}$$

obliczane są następująco:

$$w_i = \frac{b-a}{m} w'_i$$

Położenie węzłów można określić na podstawie $x_i = a + \frac{b-a}{n} i$ dla $n > 0$ oraz $x_i \in (a, b)$ dla $n = 0$.

## 10.3 Kwadratury Gaussa

Dokładność kwadratury można zwiększyć rezygnują 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.

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

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

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 $[a, b] \;\rightarrow\; [-1, 1]$

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

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

co daje:

$$\int\limits_a^b f(x)\, dx = \frac{b - a}{2} \int\limits_{-1}^{1} f\Big(\frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2}\xi\Big)\, d\xi$$

oraz wzór kwadraturowy Gaussa:

$$\int\limits_a^b f(x)\, dx \approx \frac{b - a}{2} \sum_{i=0}^{n} w_i\, f\Big(\frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2}\,\xi_i\Big). \tag{5}$$

Przykład:

Obliczyć $S(f) = \int\limits_a^b f(x)$ gdy $f(x) = 4 \cdot x^3 + 5 \cdot x^2 + 1$ dla $a = -1.0$, $b = 1.0$, czyli $b - a = 2$ .

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

Rozwiązanie:

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

$$\int\limits_a^b f(x)dx = \frac{b - a}{2} \int\limits_{-1}^{1} f(\xi)\, d\xi \approx \frac{b - a}{2} \sum_{i=0}^{1} w_i\, f(\xi_i) =$$

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

Wyniki dla przedstawianych wzorów:

| Wartość dokładna | $I(f)$ | | $=$ 5.3333 |
|---|---|---|---|
| Wzór | Postać kwadratury | | Wartość |
| prostokątów: | | | |
| lewych | $S(f) = (b - a)\, f(a)$ | $=$ | 4 |
| środkowych | $S(f) = (b - a)\, f(\frac{a+b}{2})$ | $=$ | 2 |
| prawych | $S(f) = (b - a)\, f(b)$ | $=$ | 20 |
| trapezów | $S(f) = \frac{b-a}{2}\, [f(a) + f(b)]$ | $=$ | 12 |
| Simpsona | $S(f) = \frac{b-a}{6}\, [f(a) + 4\, f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$ | $=$ | 5.3333 |
| Gaussa (2 p.) 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 całowania 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:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{N} \int_{a_j}^{b_j} f(x)\,dx = I_1(f) + I_2(f) + \cdots + I_N(f) \tag{6}$$

Do obliczania każdego składnika $I_i(f)$ sumy (6) można wykorzystać dowolny wzór kwadraturowy.

### 10.4.1 Metoda lewych, środkowych i prawych prostokątów

(a) $\displaystyle \int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{j=1}^{N} f(x_{j-1}) = h\big(f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1}\big)$

(b) $\displaystyle \int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{j=1}^{N} f(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}) = h\big(f_{0|1} + f_{1|2} + f_{2|3} + \cdots + f_{N-1|N}\big)$

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

(c) $\displaystyle \int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{j=1}^{N} f\big(x_j\big) = h\left(f_1 + f_2 + \cdots + f_N\big)\right.$

### 10.4.2 Metoda trapezów

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}h \sum_{j=1}^{N} \Big[f(x_{j-1} + f(x_j)\Big] = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + \frac{1}{2}f_N\right)$$

lub

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left[\frac{1}{2}f_0 + \sum_{j=1}^{N-1} f_j + \frac{1}{2}f_N\right]$$

### 10.4.3 Metoda Simpsona

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6} \cdot \big[\,(\,f_0 + f_N\,) + 4\,(\,f_{0|1} + f_{1|2} + \cdots + f_{N-1|N}\,) + 2\,(f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1}\,)\,\big],$$

przy czym $h = (b-a)/N$.

#### 10.4.4 Metoda Gaussa

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}\,\frac{b-a}{N}\,\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=0}^{n} w_i\,f(X_i),$$

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 w przód (zwykły)

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

#### 11.1.3 Iloraz w tył (wsteczny)

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