Közelítő és szimbolikus számítások

11. gyakorlat

Numerikus integrálás

Készítette:

Gelle Kitti

Csendes Tibor

Somogyi Viktor

Vinkó Tamás

London András

Deák Gábor

jegyzetei alapján

1. Határozatlan integrál

Határozatlan integrál alatt az

$$\int f(x) = F(x)dx$$

kifejezést értjük, ahol $F'(x) = f(x)$. Ez tehát nem más, mint a deriválás "megfordítása". Itt $F(x)$-et primitív függvénynek nevezzük. Természetesen ha létezik $f(x)$ integrálja, akkor végtelen sok létezik, ugyanis $F(x)+c, c \in \mathbb{R}$ is $f(x)$ integrálja lesz, hiszen a konstans deriváltja mindig nulla.

2. Határozott integrál

A határozott integrál célja az, hogy egy adott $f(x)$ függvénynek adott $[a, b]$ intervallumon szeretnénk a görbe alatti (előjeles) területét kiszámítani. Ezt Riemann integrállal is közelíthetjük, melynek lényege, hogy az $[a, b]$ intervallumon korlátos $f(x)$ függvényen az $[a, b]$ tartományt n részre osztjuk úgy, hogy:

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b.$$

Legyen

$$m_j = \inf\{f(x) \mid x \in [x_{j-1}, x_j]\}, \text{ és}$$

$$M_j = \sup\{f(x) \mid x \in [x_{j-1}, x_j]\}.$$

Ilyenkor a

$$l_p = \sum_{j=1}^{n} m_j(x_j - x_{j-1})$$

képlet definiálja a Riemann-féle alsó közelítő összeget, a

$$u_p = \sum_{j=1}^{n} M_j(x_j - x_{j-1})$$

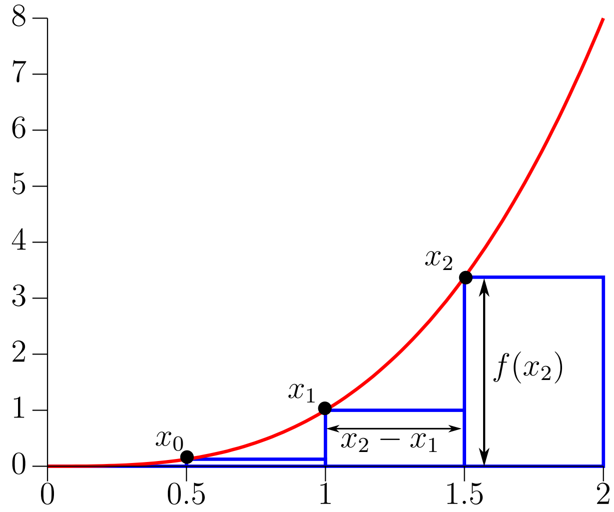
pedig a Riemann-féle felső közelítő összeget. Figyeljük meg, hogy ezek a közelítő összegek függvényt téglalapok segítségével közelíti, ahol a téglalap magassága m_j vagy M_j, a szélessége pedig $(x_j - x_{j-1})$ (és igen, előjelesen).

A Darboux-féle alsó integrál az l_p-k supremuma, azaz

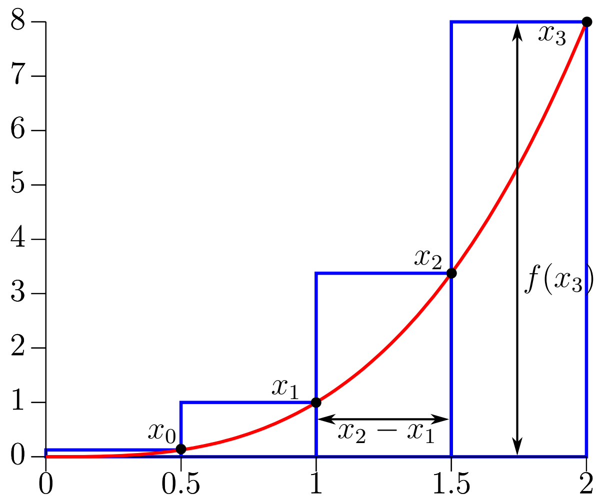
$$\underline{I} = \sup\{l_p \mid p \text{ partíció}\},$$

valamint a Darboux-féle felső integrál a

$$\overline{I} = \inf\{u_p \mid p \text{ partíció}\}.$$



1. Ábra.: A Riemann alsó közelítő összeg ábrázolása.



2. Ábra.: A Riemann felső közelítő összeg ábrázolása.

Az f függvény akkor Riemann integrálható, ha $\underline{I} = \overline{I}$, és ilyenkor

$$\int_a^b f(x)dx = \underline{I}.$$

Egy adott intervallumon értelmezett függvény határozott integrálja egy szám, amely a függvény görbéje és az x-tengely által adott intervallumon közrezárt területet adja meg előjelesen. Gyakran használt kiszámítási módja a Newton-Leibniz formula, amely szerint a határozott integrál felírható:

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

3. Numerikus integrálás

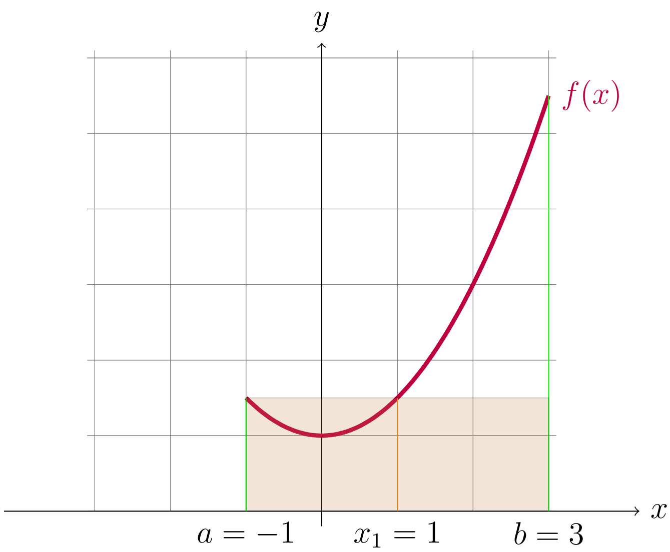
Numerikus integrálás során a feladat a fenti formula közelítése, tehát egy f függvény határozott integrálját akarjuk közelíteni az $[a, b]$ intervallumon. Abból indulunk ki, hogy az f függvény határozatlan integrálját (ha van neki egyáltalán) nem ismerjük, viszont adott x-re az $f(x)$ függvényértéket ki tudjuk (legalább közelítően) számolni.

3.1 Kvadratúra-formulák

Egy *kvadratúra-formula* az f függvény határozott integráljára az $[a, b]$ intervallumon a következőképpen néz ki:

- Kiszámítunk $x_1, \ldots, x_n$ ún. *alappontokat* (az adott formulától függ, hogy ezek konkrétan hol helyezkednek el az intervallumon belül, és n értéke is a formulától függ), melyekre $a \leq x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leq b$.
- Meghatározunk minden x_i alapponthoz egy w_i *súlyt* (ez megint csak az adott formulától függ, hogy hogyan).
- A kvadratúra-formula értéke $Q_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$, azaz az alappontokon felvett függvényértékek w_i szerint súlyozott összege.

Például kvadratúra-formulára egy lehetőség, hogy csak egy alappontot veszünk, az $x_1 = \frac{a+b}{2}$ felezőpontot és a hozzá rendelt w_1 súly az intervallum mérete, $b - a$ lesz. Azaz, $(b - a)f(\frac{a+b}{2})$ egy kvadratúra-formula. Grafikusan ábrázolva:



A képen látható függvényre ez a kvadratúra-formula a színes téglalap területét adja, hiszen ez egyenlő $(b - a)$ (ez a téglalap alapjának a hossza) szorozva $f(\frac{a+b}{2})$-vel (ez pedig a téglalap magassága).

Ennek a módszernek a neve *téglalap-szabály*, és ez a legegyszerűbb kvadratúra-formula, de számos másik is létezik.

3.2 Interpolációs kvadratúra-formulák

Észrevehetjük, hogy a téglalap-szabály alkalmazásakor veszünk egy x_1 alappontot a megadott intervallumban (ebben a szabályban az alappont az intervallum felezőpontja lesz), majd arra illesztünk egy polinomot (egy alappont esetében az illesztett polinom nulladfokú, vagyis konstans), és ennek a polinomnak a (könnyen számítható) határozott integrálját vesszük.

A módszer azért gyors, mert a polinom integrálását előre elvégezzük, és a szükséges szorzókat fogják tárolni a *súlyok*, amikkel az alappontokat súlyozzuk be. Pl. a téglalap-szabálynál az $[a, b]$ intervallumon az $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $y_1 = f(x_1)$ pontra illesztett nulladfokú (konstans) polinom képlete $y = f(x_1)$, ennek határozott integrálja az $[a, b]$ intervallumon $f(x_1)(b - a)$, így kaptuk meg a $w_1 = (b - a)$ súlyt.

Általában ha egy kvadratúra-formula megkapható a következő alakban:

- Meghatározzuk a módszertől függően az $x_1, \ldots, x_n$ alappontokat,
- A kvadratúra-formula értéke az $(x_i, f(x_i))$ pontokra illesztett Lagrange-interpolációs polinom $[a, b]$-n vett integrálja legyen,

akkor ezt *interpolációs kvadratúra-formulának* nevezzük. Tehát a téglalap-szabály például egy interpolációs kvadratúra-formula.

Ha emlékszünk, akkor az $(x_i, f(x_i))$ pontokra illesztett Lagrange-interpolációs polinom előáll a következő alakban:

$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i) L_i(x),$$

ahol $L_i(x)$ az (adott x-ekhez tartozó) i-edik Lagrange-alappolinom. Ennek integrálja pedig

$$\int_a^b \sum_{i=1}^{n} f(x_i) L_i(x) dx = \sum_{i=1}^{n} \Big(f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx \Big),$$

tehát egy interpolációs kvadratúra-formula mindig kvadratúra-formula, a $w_i = \int_a^b L_i(x)dx$ súlyok megválasztásával.

3.3 Newton-Cotes formulák

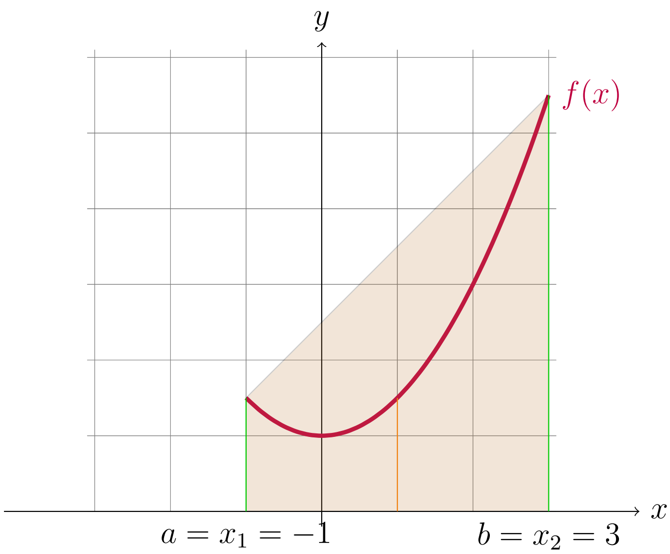
Még ha interpolációs kvadratúra-formulákat is szeretnénk használni, akkor is fennáll a kérdés, hogy hogyan válasszuk meg az alappontokat? (Ha az alappontok megvannak, akkor a súlyok meghatározása egyértelmű, mert az $L_i(x)$ alappolinomokat megadják az alappontok, és a súlyok ezeknek a határozott integráljából állnak elő.)

A legegyszerűbb módszer az, ha az $[a, b]$ intervallumot *ekvidisztánsan*, vagyis egyforma méretű intervallumokra felosztjuk, és ezeknek az intervallumoknak a végpontjait választjuk alappontoknak, ezekre írjuk fel az interpolációs kvadratúra-formulát. Az ilyen alakban előálló interpolációs kvadratúra-formulákat *Newton-Cotes formuláknak* nevezzük. Ezen belül megkülönböztetünk *nyitott* és *zárt* Newton-Cotes formulákat: ha az a és a b értékek is alappontok, akkor a formula zárt, ha pedig nem, akkor nyitott formuláról beszélünk.

Például a téglalap módszernél két egyforma intervallumra osztottuk az $[a, b]$ intervallumot, és a kapott három végpont közül az a-t és a b-t nem használtuk, csak a középsőt; így a téglalap módszer másképp mondva az 1 alappontú nyitott Newton-Cotes formula.

Nyilván egy n alappontú nyitott Newton-Cotes formulánál $n + 1$ egyenlő részre kell osszuk az intervallumot, egy n alappontú zárt Newton-Cotes formulánál pedig $n - 1$ egyenlő részre.

A legegyszerűbb zárt Newton-Cotes formulának tehát két alappontja van, a és b. Két alappontra elsőfokú (lineáris) polinomot tudunk illeszteni, ahogy az ábra mutatja:



Mivel a kapott sokszög az ábrán egy trapéz, ezért a két alappontú zárt Newton-Cotes módszert hívják *trapéz-szabály*nak is. Képlete $x_1 = a$, $x_2 = b$ és $w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2}$, azaz $\big(f(a) + f(b)\big)\frac{b-a}{2}$, melynek levezetése: az x_1, x_2 alappontokra illesztett Lagrange alappolinomok $L_1(x) = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}$ és $L_2(x) = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}$, azaz az $x_1 = a$, $x_2 = b$ esetben $L_1(x) = \frac{x-b}{a-b}$ és $L_2(x) = \frac{x-a}{b-a}$, nekik a határozatlan integráljuk pedig $F_1(x) = \int \frac{x-b}{a-b}\,\mathrm{d}x = \frac{x^2-2bx}{2(a-b)}$, és így az L_1 Lagrange-alappolinom határozott integrálja az $[a, b]$ intervallumon

$$F_1(b) - F_1(a) = \frac{b^2 - 2b^2 - a^2 + 2ab}{2(a-b)} = \frac{-(a^2 + b^2 - 2ab)}{2(a-b)} = \frac{-(a-b)^2}{2(a-b)} = \frac{b-a}{2},$$

ez az első alapponthoz tartozó súly, a másodikhoz tartozó pedig hasonló módon az $F_2(x) =$

$\int \frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x = \frac{x^2-2ax}{2(b-a)}$ határozott integrálja az $[a,b]$ intervallumon,

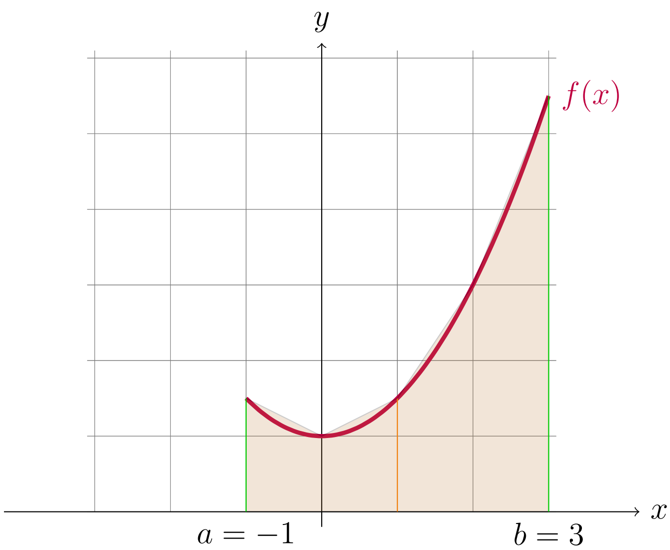
$$F_2(b) - F_2(a) = \frac{b^2 - 2ab - a^2 + 2a^2}{2(b-a)} = \frac{(b-a)^2}{2(b-a)} = \frac{b-a}{2},$$

így a második alappont w_2 súlya is $\frac{b-a}{2}$ lesz, így jön ki a trapéz-szabály képlete, még egyszer: $x_1 = a$, $x_2 = b$ és $w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2}$.

Az utolsó ,,nevesített" Newton-Cotes formula a három alappontú zárt módszer, mely tehát egy másodfokú polinom határozott integráljával közelít, a három alappont pedig $x_1 = a$, $x_2 = \frac{a+b}{2}$ és $x_3 = b$. A súlyok (melyek a fentihez hasonló módon kijönnek) pedig $w_1 = w_3 = \frac{b-a}{6}$ és $w_2 = \frac{2(b-a)}{3}$. Ezt a kvadratúra-formulát *Simpson-szabálynak* nevezzük.

3.4 Összetett kvadratúra-szabályok

A polinommal történő interpoláció pontossága az alappontok számának növelésével nem javul szükségszerűen (attól az esettől eltekintve pl, mikor maga az $f(x)$ integrálandó függvény maga is egy polinom), háromnál több alappont esetében már általában túl ,,vad" a polinom. A módszerek pontosságát javítani úgy szokták, hogy az $[a,b]$ intervallumot felosztják (mondjuk) n egyforma részre, és a részekre külön-külön egy kvadratúra-formulát (pl. trapéz- vagy Simpson-szabályt) alkalmaznak. Az ilyen alakban előálló kvadratúra-formulákat összetett kvadratúra-szabályoknak is nevezik. A következő ábra például az intervallumot 4 részre felosztó, majd a részeken egyenként trapéz-módszert alkalmazó összetett kvadratúra-szabályt illusztrálja:



Ennek a kvadratúra-szabálynak az alappontjai, ha n részre osztjuk az eredeti intervallumot (tehát $n+1$ alappontunk lesz), $x_0, \ldots, x_n$, ahol $x_i = a + i\frac{b-a}{n}$ és a súlyok $w_1 = w_n = \frac{b-a}{2n}$ és $w_2 = \ldots = w_{n-1} = \frac{b-a}{n}$. (Ez kijön úgy, hogy egy-egy trapézban a súlyok $\frac{b-a}{2n}$, a kis intervallumok hosszának a fele, és a két szélső pont kivételével minden alappontot kétszer kell számolni, mert két trapézban játszanak szerepet.) Nevezik *összetett trapéz szabály*nak, vagy *trapéz módszer*nek is.

Ha az al-intervallumokon egyenként Simpson-szabályt alkalmazunk, az úgy előálló kvadratúra-formulát *összetett Simpson-szabálynak*, vagy *Simpson-módszer*nek nevezik: ha n intervallumra bontjuk az eredeti $[a, b]$ intervallumot, úgy (mivel minden intervallumon Simpson-szabályt alkalmazva még ezeknek a felezőpontja is bejön) lesz $2n+1$ alappontunk, $x_0, x_1, \ldots, x_{2n}$, ekvidisztánsan elosztva, vagyis $x_i = a + i\frac{b-a}{2n}$, a súlyok pedig, ha h jelöli a $\frac{b-a}{n}$ intervallum-hosszt, akkor $w_1 = w_{2n} = \frac{h}{6}$, $w_i = \frac{h}{3}$, ha $1 < i < 2n$ páros és $w_i = \frac{2h}{3}$, ha $1 < i < 2n$ páratlan.