

**Całkowanie numeryczne przy użyciu  
kwadratur Newtona-Cotesa  
i  
kwadratur Gaussa**

Plan wykładu:

1. Kwadratury Newtona-Cotesa

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

2. Ekstrapolacja

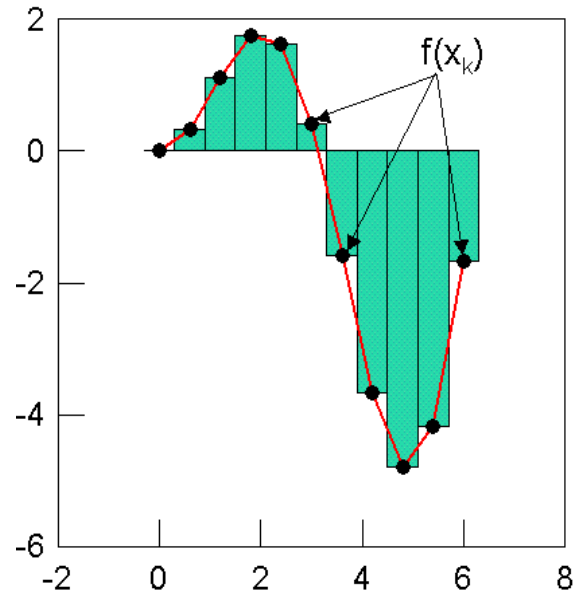
- a) ekstrapolacja Richardsona
- b) metoda Romberga
- c) metody adaptacyjne

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:

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

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

- podstawiamy wielomian interpolacyjny w miejsce funkcji podcałkowej

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

- powyższe wzory definiują tzw. kwadraturę,  $A_k$  są **współczynnikami kwadratur**
- jeśli spełniony jest warunek

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

wówczas zachodzi

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

- 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  $p(x)$**  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:

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

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

- postać funkcji wagowej określa typ kwadratury

- 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  $r$

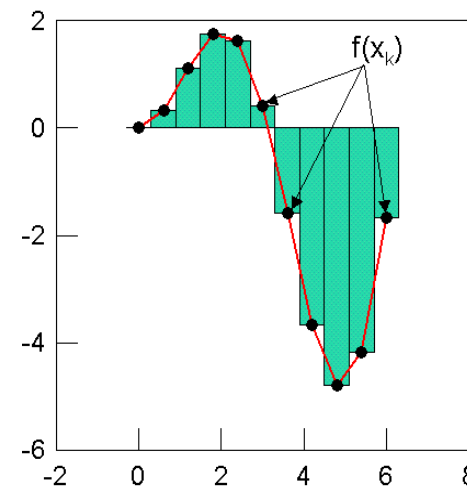
- rząd kwadratury w dużym stopniu decyduje o dokładności całkowania numerycznego (drugi czynnik to liczba użytych węzłów)

## 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  $N$

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

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



- błąd przybliżenia (interpolacji)

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

- szukamy współczynników  $A_k$  kwadratury - musimy wykonać całkowanie wielomianu, ułatwimy sobie zadanie jeśli wprowadzimy nową zmienną  $t$

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

- przyjmujemy oznaczenia

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

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



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

skąd otrzymujemy

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

- współczynniki kwadratury Newtona-Cotesa (wyjaśnienie na kolejnym slajdzie)

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



- wyprowadzenie wzoru określającego współczynniki kwadratury

$$\begin{aligned}
 \Phi_k(t) &= \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}} \frac{t-j}{k-j} \\
 &= \frac{(t-0)(t-1)\dots(t-[k-1]) \cdot (t-[k+1])\dots(t-N)}{(k-0)(k-1)\dots(k-[k-1]) \cdot (k-[k+1])\dots(k-N)} \\
 &= \frac{(t-0)(t-1)\dots(t-[k-1]) \cdot (t-[k+1])\dots(t-N)}{(1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k) \cdot (-1) \cdot (-2) \cdot \dots \cdot (-[N-k])} \\
 &= \frac{(t-0)(t-1)\dots(t-[k-1]) \cdot (t-[k+1])\dots(t-N)}{k!(-1)^{N-k}(N-k)!} \\
 &= \frac{(-1)^{N-k}}{k!(N-k)!} \frac{t(t-1)\dots(t-N)}{(t-k)}
 \end{aligned}$$

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

## Własności kwadratur NC

- gdy  $N$  jest nieparzyste wówczas kwadratura jest rzędu  $(N+1)$  (dokładna dla wielomianów stopnia  $N$ ), dla parzystego  $N$  rząd kwadratury wynosi  $(N+2)$
- 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  $f$

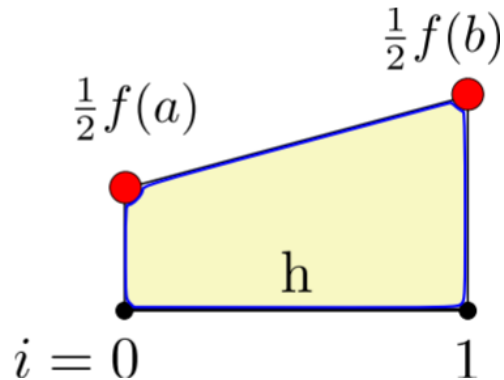
- dla dużych  $N$  oszacowanie błędu jest trudne ze względu na pochodne wysokich rzędów lub ze względu na numeryczne kasowanie się współczynników  $A_k$
- współczynniki  $A_k$  zależą od  $N$ . W szczególności (wzór na  $A_k$ ) zachodzi

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

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**

**Wzór trapezów (N=1)**



$$h = b - a$$

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

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

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

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

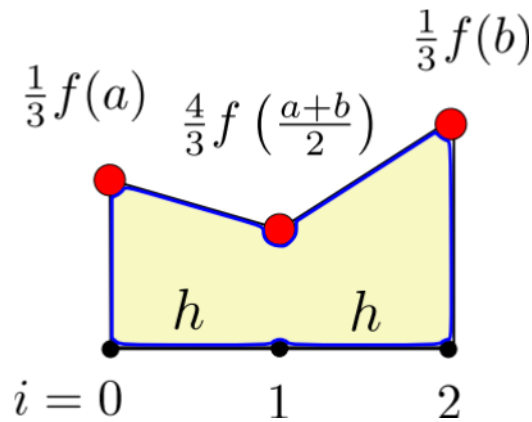
- ze wzoru na błąd interpolacji wynika, że kwadratura jest N+1=2 rzędu, a dokładnie przybliża wielomian N=1 stopnia
- błąd wyznaczenia przybliżonej wartości całki wynosi

$$E(f) = \frac{1}{2!} \int_a^b (x-a)(x-b) f^{(2)}(\xi) dx$$

$$= -\frac{1}{12} h^3 f^{(2)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

- zależność jak  $h^3$
- na 2 pochodną nie mamy wpływu

**Wzór parabol / Simpsona (N=2)**



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

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

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

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

- ponieważ N jest parzyste więc kwadratura jest dokładna dla wielomianów stopnia N+1 i jest rzędu N+2, dlaczego?  
zgodnie z wzorem na błąd wzoru interpolacyjnego dostajemy

$$E(f) \sim \int_a^b (x - a) \left(x - \frac{a + b}{2}\right) (x - b) dx = 0$$

z powodu nieparzystości funkcji podcałkowej - ale nie ma powodu aby błąd zniknął dla dowolnej funkcji

- dodajmy więc dodatkowy węzeł w  $x=(a+b)/2$ , który nie zmienia warunku interpolacji, wówczas stopień wielomianu czynnika rośnie o 1:

$$E(f) = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{4!} \int_a^b (x - a) \left(x - \frac{a + b}{2}\right)^2 (x - b) dx = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

(funkcja podcałkowa teraz jest parzysta)

- współczynniki najczęściej stosowanych kwadratur NC

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
<b>2</b>	<b><math>(1/3)h</math></b>	<b>1</b>	<b>4</b>	<b>1</b>					<b><math>h^5 (1/90) f^{(4)}(\xi)</math></b>	<b>parabol</b>
3	$(3/8)h$	1	3	3	1				$h^5 (3/80) f^{(4)}(\xi)$	3/8
<b>4</b>	<b><math>(4/90)h</math></b>	<b>7</b>	<b>32</b>	<b>12</b>	<b>32</b>	<b>7</b>			<b><math>h^7 (8/945) f^{(6)}(\xi)</math></b>	<b>Milne'a</b>
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 (pochodne wyższych rzędów mogą silnie oscylować dając duży błąd)
- natomiast błąd kwadratur niższych rzędów jest proporcjonalny do długości przedziału całkowania w odpowiedniej potęgze, zatem niski rząd kwadratury może nie zapewniać wymaganej dokładności
- problemu tego można uniknąć, dzieląc przedział całkowania na  $m$  podprzedziałów, w których przeprowadza się całkowanie kwadraturami niższych rzędów a wyniki całkowania sumuje się

**Wzór złożony trapezów**

- przedział całkowania dzieli się na  $m$  poprzedziałów

$$h = \frac{b - a}{m} \quad f_k = f(a + k \cdot h)$$

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

- zakładamy, że funkcja jest dwukrotnie różniczkowalna

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

wówczas błąd złożonego wzoru trapezów ma postać

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

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

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

- błąd **złożonego wzoru trapezów** przyjmuje postać

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

- błąd zależy od 3 potęgi długości przedziału (na to nie mamy wpływu), ale zwiększając  $m$  można istotnie ograniczyć jego wartość

wniosek:

- aby uczynić wynik dokładniejszym należy zwiększyć liczbę węzłów całkowania



## 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

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

- zakładamy istnienie 4 pochodnej funkcji podcałkowej

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

wówczas błąd wzoru złożonego parabol ma postać

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

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

- 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

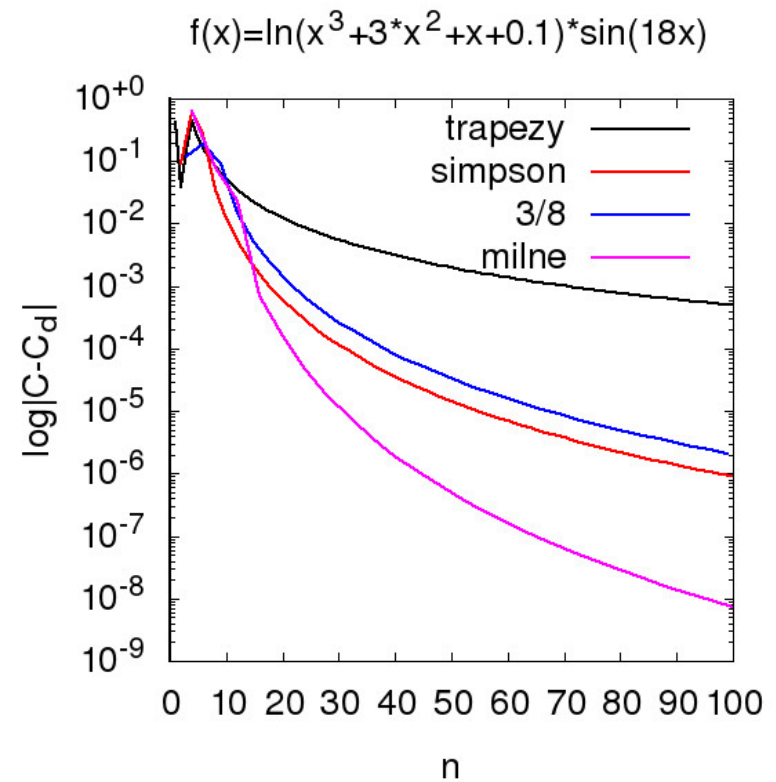
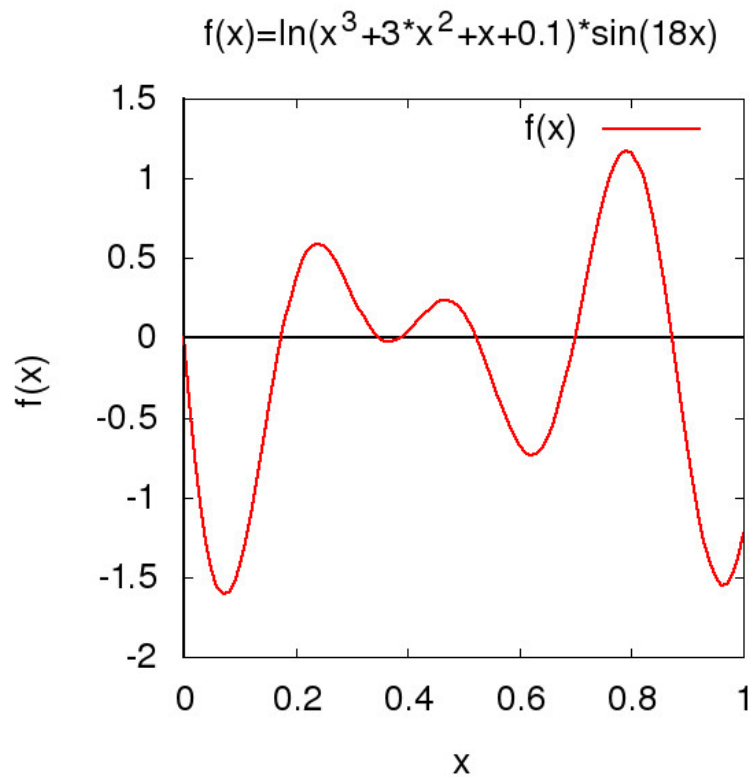
$$E(f) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{(4)}(\xi)$$

- zależy od 4 pochodnej, która może przyjmować duże wartości (nie mamy wpływu)
- szerokość przedziału całkowania w 5 potęgę (nie mamy wpływu)
- błąd maleje jak  $1/m^4$  (zwiększając  $m$  obniżamy błąd)

**przykład** całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur NC

$$f(x) = \ln(x^3 + 3x^2 + x + 0.1) \cdot \sin(18x)$$

$$x \in [0, 1]$$



**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 przegrupujemy wyrazy by obliczyć pierwszą pochodną

$$f^{(1)}(x) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h} - \left[ \frac{1}{3!} h^2 f^{(3)}(x) + \frac{1}{5!} h^4 f^{(5)}(x) + \frac{1}{7!} h^6 f^{(7)}(x) + O(h^9) \right]$$

Powyższa formuła w postaci ogólnej

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

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

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

i obliczmy różnicę

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

Zatem  $L_2$  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  $L_2$

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

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

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

Podstawiając do  $L_3$

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

otrzymujemy

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

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

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 pkt. 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

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

Czyli wyznaczamy kolejno: 1 kolumnę, 2 kolumnę, ....., M-tą kolumnę (liczbę)

$D_{M,M}$  - to najlepsze (teoretycznie) przybliżenie wartości pochodnej (lub całki)



**Metoda Romberga**

Korzystamy z wzoru trapezów

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

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

Jeśli  $x \in [0, 1]$

to dla kolejnych wartości  $n$  dostajemy poniższy ciąg przybliżeń wartości całki

$$S_0 = \frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(1)$$

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

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

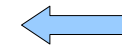
$$S_6 = \frac{1}{16}f(0) + \frac{1}{8} \left\{ f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{1}{2}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right) \right\} + \frac{1}{16}f(1)$$

Zauważmy, że do obliczenia  $T_{2n}$  można wykorzystać już obliczone  $T_n$

$$S_2 = \frac{1}{2}S_0 + \frac{1}{2} \left\{ f\left(\frac{1}{2}\right) \right\}$$

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

$$S_6 = \frac{1}{2}S_4 + \frac{1}{8} \left\{ f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right) \right\}$$



Uwaga:  
w każdym kroku  
sumujemy tylko po  
nowych węzłach

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

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

z krokiem całkowania

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

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

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

Do obliczenia całki wykorzystujemy rekurencyjną formułę z wzorem trapezów

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

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

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

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**.

$R_{0,0}$				
$R_{1,0}$	$R_{1,1}$			
$R_{2,0}$	$R_{2,1}$	$R_{2,2}$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$R_{M,0}$	$R_{M,1}$	$R_{M,2}$	$\dots$	$R_{M,M}$

**Metody adaptacyjne**

Liczmy numerycznie całkę np. wzorem parabol

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

błąd

$$S(a, b) = \frac{b-a}{3} \left\{ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right\}$$

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  $\varepsilon$ , odpowiednio niski poziom błędu wartości całki osiągniemy zwiększając liczbę węzłów całkowania.

## Przykład

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

$$f(x) = \ln(x^3 + 3x^2 + x + 0.1) \cdot \sin(18x)$$

$$x \in [0, 1]$$

## Wyniki dla metody Romberga

N	$D_{i,0}$	$D_{i,i}$
2	-0.6117694	-0.6117694
3	-0.2257981	-0.0971410
5	0.2498394	0.4420869
9	-0.1032663	-0.2741157
17	-0.1668214	-0.1842338
33	-0.1816364	-0.1864996
65	-0.1852783	-0.1864869
129	-0.1861850	-0.1864869
257	-0.1864114	-0.1864869
513	-0.1864680	-0.1864869
1025	-0.1864822	-0.1864869
2049	-0.1864857	-0.1864869
4097	-0.1864866	-0.1864869
8193	-0.1864868	-0.1864869
16385	-0.1864869	-0.1864869
32769	-0.1864869	-0.1864869

zbieżność

„mała” zmiana  
wyniku

**Kwadratury Gaussa**

Nadal rozpatrujemy kwadratury typu:

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

współczynniki kwadratury z wagą  $p(x)$

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

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:

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

**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? (dwa razy większy niż dla kw. NC)**

Musimy ustalić położenia  $N+1$  węzłów oraz współczynniki kombinacji liniowej  $N+1$  wielomianów ortogonalnych. Daje to  $2n+2$  parametrów swobodnych co określa rząd metody (bo możemy dobrać lepszy wielomian interpolacyjny).

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

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

$$\alpha_k = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_k}$$

$$\gamma_k = \int_a^b p(x)\varphi_k^2(x)dx$$

$\beta_k$  - współczynnik stojący w wielomianie  $\varphi_k$  przy zmiennej w najwyższej potędze

Podstawmy za  $y$  zero wielomianu  $n$ -tego stopnia

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

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

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

wielomian węzłowy

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

Wybieramy oczywiście przypadek taki że:

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

oraz korzystamy z faktu  $\varphi_0(x) = 1$

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

ponieważ wszystkie wielkości w równaniu mamy zdefiniowane możemy wyznaczyć  $A_j$

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

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

Uwaga:  
w mianowniku jest wyraz  $(2n)!$   
który bardzo szybko rośnie  
zmniejszając  $E$

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:

$$[a, b] = [-1, 1] \quad p(x) = 1$$

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

W tym przedziale ciąg wielomianów ortogonalnych tworzą wielomiany Legendre'a

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

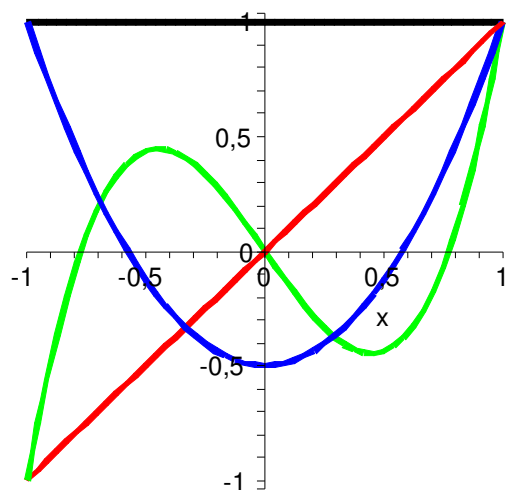
Relacja rekurencyjna

$$(n + 1)P_{n+1} = (2n + 1)xP_n - nP_{n-1}$$

z dwoma pierwszymi elementami ciągu

$$P_0 = 1 \quad P_1 = x$$

4 pierwsze wielomiany Legendre'a



- P(0;x)
- P(1,x)
- P(2,x)
- P(3,x)

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

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

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

Współczynniki  $A_k$ :

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

Błąd kwadratury:

$$E(f) = \frac{2^{2N+3}((N+1)!)^4}{(2N+3)((2N+2)!)^3} f^{(2N+3)}(\xi), \quad \xi \in (0, 1)$$

Węzły  $x_k$  stanowią pierwiastki wielomianu  $P_{N+1}(x)$ .  
(jak je znaleźć? => metody poszukiwania zer wielomianów)

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

Aby zastosować wzory z przedziału  $[-1,1]$  w przedziale  $[a,b]$  należy dokonać transformacji liniowej zmiennej niezależnej:

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

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

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

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

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.

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

węzły rozłożone w przedziale  $[-1,1]$

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

**Uwaga:** podczas sumowania pomijamy wagę - ta jest uwzględniona we wsp.  $A_k$

## Kwadratury dla przedziału jedno- i obustronnie nieskończonego

### Kwadratura Gaussa-Laguerre'a

przedział  
 $[a, b] = [0, \infty)$

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

$$C = \int_0^{\infty} f(x) e^{-x} dx$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Laguerre'a:

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

Relacja rekurencyjna dla **stowarzyszonych wielomianów Laguerre'a**  
 Funkcja wagowa ma postać:

$$p(x) = x^\alpha e^{-x} \quad (\text{np. } \alpha = 0)$$

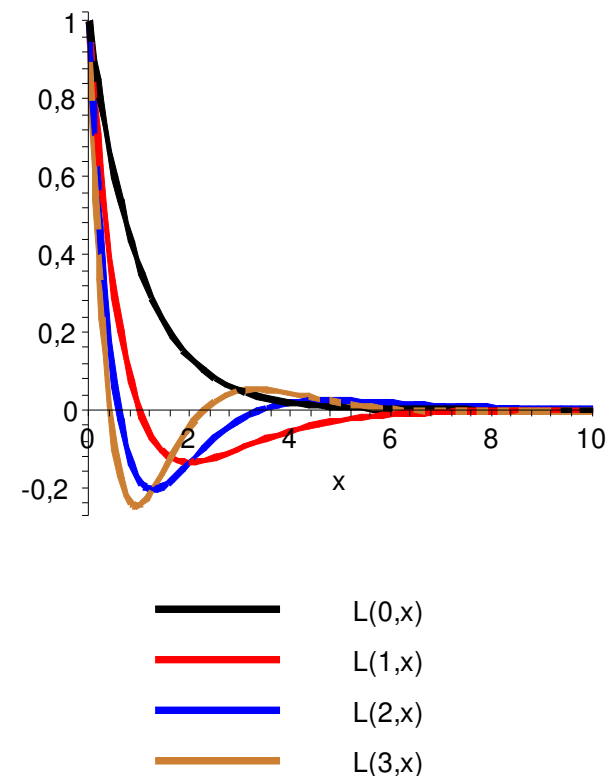
$$(n+1)L_{n+1}^\alpha = (2n+1-x)L_n^\alpha - nL_{n-1}^\alpha$$

$$L_0(x) = 1$$

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

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

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



Współczynniki kwadratury określa wzór

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

kwadratura ma znaną postać

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

węzły  $x_k$  są zerami wielomianu  $L_{N+1}(x)$

Uwaga: podczas sumowania pomijamy wagę - ta jest uwzględniona we wsp.  $A_k$

błąd kwadratury Gaussa-Laguerre'a

$$E(f) = \frac{((N + 1)!)^2}{(2N + 2)!} f^{(2N+2)}(\eta) \quad \eta \in (0, \infty)$$



**Kwadratura Gaussa-Hermite'a**

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

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

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-x^2} dx$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią  
**wielomiany Hermite'a**

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

dla których obowiązuje relacja rekurencyjna

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$$

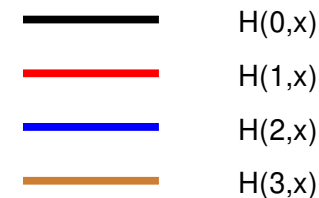
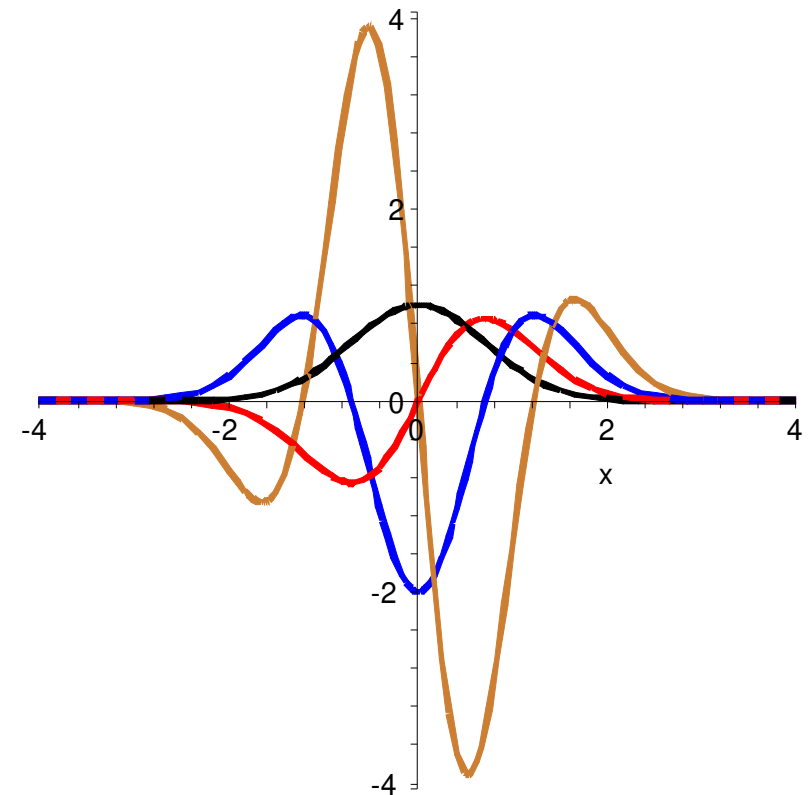
4 pierwsze wielomiany Hermite'a

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

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

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



Całkowanie przeprowadzamy korzystając z kwadratury

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

$x_k$  są zerami wielomianu  $H_{N+1}$

o współczynnikach

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

Błąd kwadratury

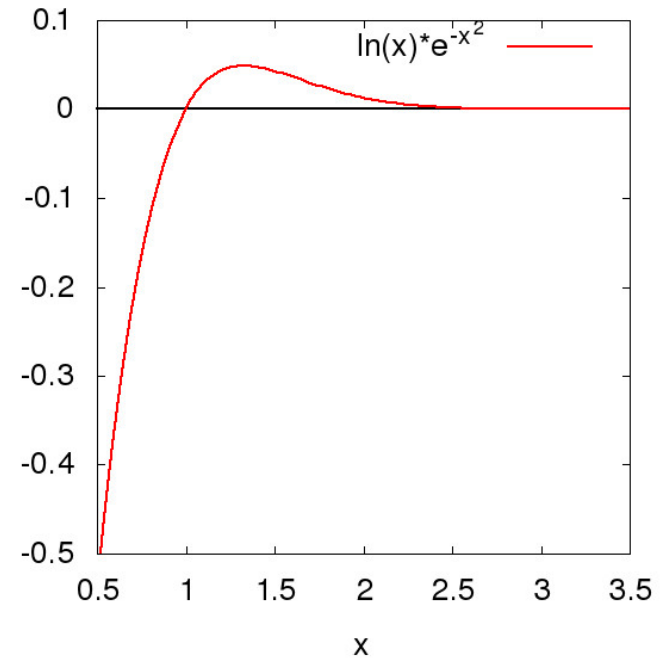
$$E(f) = \frac{(N+1)!\sqrt{\pi}}{2^{N+1}(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\eta) \quad \eta \in (-\infty, \infty)$$

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)

**Przykład**

$$\begin{aligned}
 C &= \int_a^b f(x) p(x) dx \\
 &= \int_0^\infty \ln(x) e^{-x^2} dx \\
 &\approx -0.8700577
 \end{aligned}$$



**kwadratura Gaussa-Hermite'a**

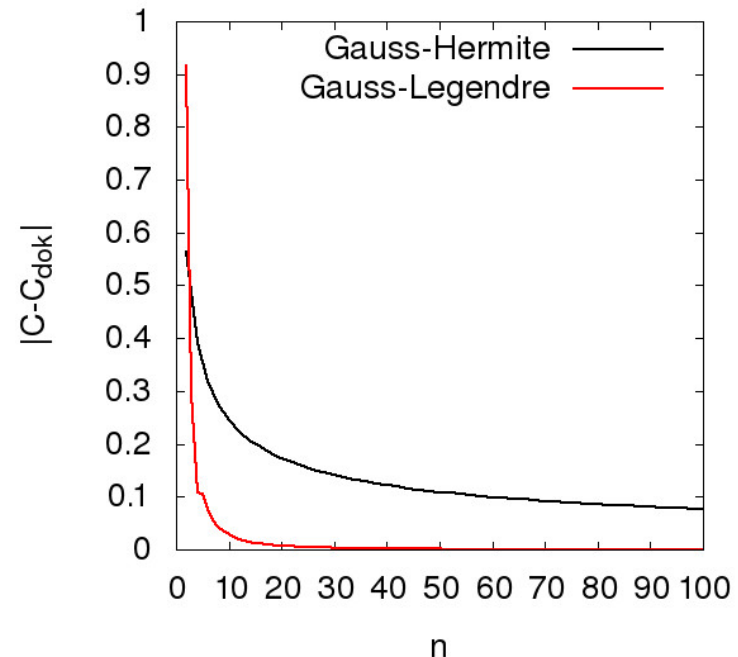
$$C = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \ln|x| e^{-x^2} dx$$

$$f(x) = \frac{1}{2} \ln|x| \quad p(x) = e^{-x^2}$$

**kwadratura Gaussa-Legendre'a**

$$C = \int_0^5 \ln(x) e^{-x^2} dx$$

$$f(x) = \ln(x) e^{-x^2} \quad p(x) = 1$$



## Całkowanie funkcji wielu zmiennych

Przy całkowaniu funkcji wielu zmiennych pojawiają się problemy:

- konstrukcja wielomianów interpolacyjnych jest możliwa tylko dla odpowiednio położonych węzłów i regularnych obszarów całkowania
- czas obliczeń rośnie bardzo szybko wraz z liczbą zmiennych, w praktyce liczba zmiennych nie przekracza 4

Zakładamy, że obszar całkowania można opisać układem nierówności:

$$\Omega \subset R^M$$

$$a_1 \leq x_1 \leq b_1$$

$$a_2(x_1) \leq x_2 \leq b_2(x_1)$$

.....

$$a_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1}) \leq x_M \leq b_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1})$$

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:

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

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:

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

Co to oznacza?

Dla  $N=10$  i  $M=10$  otrzymalibyśmy liczbę węzłów:  $(N+1)^M > 25.9 \cdot 10^9$

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