1 Kwadratury

1.1 Sformulowanie zadania

Naszym celem jest przyblizone obliczanie calek. Rozpoczniemy od przedstawienia metod numerycznego wyznaczania calek oznaczonych.

Definicja
Calka oznaczona Riemanna funkcji f na $[a,b]$ nazywamy:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} S_n \tag{1}$$

gdzie:
f - funkcja okreslona i ograniczona na odcinku $[a,b]$;
$S_n = \sum_{i=0}^{n}(x_{i+1}-x_i)f(\hat{x}_i)$, dla dowolnego podzialu odcinka $[a,b]$ ($a = x_0 < x_1 < ... < x_{n+1} = b$) takiego, ze $\max_{0\le i\le n} \mid x_{i+1}-x_i \mid\to 0$ przy $n\to\infty$ i dowolnych punktow posrednich $\hat{x}_i \in [x_i, x_{i+1}]$.

Funkcjonal liniowy, ktorym jest calka, oznaczamy przez I:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx\ . \tag{2}$$

Przyblizone obliczanie calek mozna traktowac jako aproksymacje funkcjonalu I jakimis prostrzymi do obliczania funkcjonalami. W rachunku numerycznym musimy miec mozliwosc obliczania ich wartosci za pomoca skonczonej liczby dzialan arytmetycznych. Funkcjonalem tego typu jest funkcjonaly Q, tzw. kwadratury liniowe, postaci:

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n_0} A_{i,0}f(x_{i,0}) + \sum_{i=0}^{n_1} A_{i,1}f'(x_{i,1}) + ... + \sum_{i=0}^{n_k} A_{i,k}f^{(k)}(x_{i,k}) \tag{3}$$

gdzie:
$A_{i,j}$ - wspolczynniki kwadratury Q,
$x_{i,j}$ - wezly kwadratury Q.

Bedziemy zajmowali sie calkami postaci:

$$I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx\ . \tag{4}$$

gdzie funcja wagowa p jest nieujemna na odcinku $[a,b]$, zeruje sie w nim w skonczonej liczbie punktow i jest calkowalna, tzn. $\int_a^b p(x)dx < \infty$.

Najczesciej stosuje sie kwadratury korzystajace jedynie z wartosci funkcji f:

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\ . \tag{5}$$

Definicja
Reszte kwadratury definiujemy jako:

$$R(f) = I_p(f) - Q(f) \tag{6}$$

Definicja
Mowimy, ze kwadratura Q jest *rzedu n* jesli jest dokladna dla wszystkich wielomianow stopnia mniejszego od n, $Q(w) = I_p(w)$ dla $w \in W_{n-1}$, oraz istnieje wielomian w_n stopnia n, dla ktorego $Q(w_n) \ne I_p(w_n)$.

1.2 Kwadratury interpolacyjne

Jedna z metod otrzymywania kwadratur postaci (5) jest calkowanie wielomianu lub funkcji sklejanej interpolujacej funkcje podcalkowa. Dokladniej poprzez *kwadrautury interpolacyjne* rozumie sie kwadratury otrzymane przez calkowanie wielomianow interpolacyjnych Hermite'a (w szczegolnosci Lagrange'a) funkcji podcalkowej f.

Lemat
Kwadratury interpolacyjne oparte na wezlach o lacznej krotnosci $n+1$ sa rzedu conajmniej $n+1$.

Najprostszym przykladem kwadratury interpolacyjnej jest przedstawiony ponizej wzor trapezow.

1.2.1 Wzor trapezow

Funkcje podcalkowa f przyblizamy wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a opartym na wezlach a i b.

$$f(x) \approx L_1(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} \tag{7}$$

Calkujac wielomian $L_1(x)$ otrzymujemy kwadrature postaci:

$$Q(f) = I(L_1) = \int_a^b \left(f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} \right) dx = \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b) \tag{8}$$

Dla funkcji f dodatniej na $[a, b]$, przyblizanie calki $\int_a^b f(x)dx$ powyzsza kwadratura mozna interpretowac geometrycznie jako przblizenie pola trapezu krzywoliniowego polem trapezu o podstawach $f(a)$ i $f(b)$. Dlatego wzor (8) nosi nazwe wzoru trapezow.

1.2.2 Funkcja sklejana

Funkcje podcalkowa f mozna tex przyblizyc funkcja sklejana interpolujaca S_1, stopnia pierwszego, z wezlami $a = x_0 < x_1, ... < x_N = b$. W kazdym z przedzialow $[x_i, x_{i+1}], i = 0, 1, ..., N-1$, funkcja S_1 jest okreslona wzorem

$$S_1(x) = f(x_i) + \frac{f(x_{i+1} - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) \tag{9}$$

Calkujac S_1 dostajemy kwadrature postaci

$$Q(f) = I(S_1) = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} S_1(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{2} f(x_i) + \frac{x_{i+1} - x_i}{2} f(x_{i+1}) \right) \tag{10}$$

Dla funkcji f dodatniej na $[a, b]$, przyblizanie calki $\int_a^b f(x)dx$ powyzsza kwadratura mozna interpretowac geometrycznie jako przblizenie pola trapezu krzywoliniowego suma pol trapezow o wysokosciach $x_{i+1} - x_i$ i podstawach $f(x_i)$ i $f(x_{i+1})$.

UWAGA
Kwadratura korzystajaca z funkcji sklejanych nie jest kwadratura interpolacyjna dla $N > 1$! Nie jest dla niej prawdziwy Lemat 1.

1.3 Kwadratury Newtona-Cotesa

Kwadraturami Newtona-Cotesa przyblizajacymi $\int_a^b f(x)$ sa nazywane kwadratury

$$Q(f) = I(L_n) \tag{11}$$

gdzie L_n jest wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a funkcji f opartym na rownoodleglych wezlach

$$x_0 = a, \quad x_1 = a + x, \ldots, x_n = a + nh = b \tag{12}$$

Stosujac podstawienie $x = a + th$ mozemy zapisac wielomian L_n w postaci

$$L_n(x) = L_n(a + th) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{t-j}{i-j} \tag{13}$$

gdzie

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n, \quad h = \frac{b-a}{n} \tag{14}$$

Calkujac prawa strone (13) otrzymujemy kwadrature

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \tag{15}$$

ze wspolczynnikami A_i okreslonymi wzorem

$$A_i = h \int_0^n \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{t-j}{i-j} dt \tag{16}$$

latwo sprawdzic, ze $A_i = A_{n-i}$.

1.3.1 n=1

Dla $n = 1$ wezlami kwadratury sa krance przedzialu calkowania, tj. $x_0 = a$, $x_1 = b$. Obliczamy wspolczynniki

$$\begin{aligned} A_0 &= (b-a)\int_0^1 \frac{t-1}{0-1} dt = \frac{b-a}{2} \\ A_1 &= (b-a)\int_0^1 \frac{t-0}{1-0} dt = \frac{b-a}{2} \end{aligned} \tag{17}$$

Kwadratura ta jest zatem rowna wzorowi trapezow (8)

$$Q(f) = I(L_1) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) \tag{18}$$

1.3.2 n=2

Dla $n = 2$ wezlami kwadratury sa $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$. Obliczamy wspolczynniki

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{b-a}{2}\int_0^2 \frac{(t-1)(t-2)}{(0-1)(0-2)} dt = \frac{b-a}{6} \\ A_1 &= \frac{b-a}{2}\int_0^2 \frac{(t-0)(t-2)}{(1-0)(1-2)} dt = \frac{4(b-a)}{6} \\ A_2 &= A_0 \end{aligned} \tag{19}$$

Otrzymana kwadratura

$$Q(f) = I(L_2) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right) \tag{20}$$

jest nazywana wzorem parabol lub *wzorem Simpsona*.

Twierdzenie
Kwadratury Newtona-Cotesa oparte na $n+1$ wezlach sa rzedu
$n+2$ dla n parzystych
$n+1$ dla n nieparzystych

1.3.3 Zlozone kwadratury Newtona-Cotesa

Okazuje sie, ze kwadratury Newtona-Cotesa wyzszych rzedow sa malo przydatne w praktycznych obliczeniach. Na ogol bardziej celowym jest podzielenie przedzialu calkowania $[a,b]$ na N rownych podprzedzialow $[x_i, x_{i+1}]$ dlugosci $h = \frac{b-a}{N}$ punktami $x_i = a + ih$ dla $i = 0, 1, \ldots, N$ i stosowanie na kazdym z nich kwadratury Newtona-Cotesa niskiego rzedu. Konstruowane w ten sposob kwadratury, okreslone na calym przedziale $[a,b]$, sa nazywane *zlozonymi kwadraturami Newtona-Cotesa.*

Jako pierwszy przyklad w kazdym z przedzialow $[x_i, x_{i+1}]$ zastosujmy kwadrature Newtona-Cotesa rzedu dwa, tzn. wzor trapezow. Otrzymujemy:

$$T_N(f) = \frac{h}{2}(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b)) \tag{21}$$

Jako drugi przyklad wyprowadzmy wzor na zlozona kwadrature Simpsona

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{6}(f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})) \tag{22}$$

Stad

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6}(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + 4\sum_{i=1}^{N-1} f(a+(2i-1)\frac{h}{2}) + f(b)) \tag{23}$$

2 Problem zbieznosci ciagu kwadratur

Rozpatrzmy ciag kwadratur $Q_n (n = 0, 1, \ldots)$

$$Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) \tag{24}$$

przyblizajacych calke $I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx$. Interesowac nas bedzie warunki zbieznosci ustalonego ciagu kwadratur do calek funkcji ciaglych na $[a,b]$.
Zakladamy zatem, ze dane sa nieskonczene macierze trojkatne wezlow $x_i^{(j)}$ i wspolczynnikow $A_i^{(j)}$

$$\begin{array}{ll}
x_0^{(0)} & A_0^{(0)} \\
x_0^{(1)},\ x_1^{(1)} & A_0^{(1)},\ A_1^{(1)} \\
x_0^{(2)},\ x_1^{(2)},\ x_2^{(2)} & A_0^{(2)},\ A_1^{(2)};\ A_2^{(2)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots
\end{array}$$

definiujace ciag (24).
Podstawowym twierdzeniem dajacym odpowiedz na postawione powyzej pytanie jest

Twierdzenie
Ciag kwadratur (24) jest zbiezny dla dowolnych funkcji f ciaglych na odcinku $[a,b]$

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) = \int_a^b p(x)f(x)dx \tag{25}$$

wtedy i tyko wtedy, gdy

- ciag (24) jest zbiezny dla dowolnego wielomianu oraz
- istnieje taka stala K, ze dla $n = 0, 1, \ldots$ zachodzi nierownosc

$$\sum_{i=0}^{n} |A_i^{(n)}| \leq K \tag{26}$$

Warunki twierdzenia sa spelnione przez zlozone kwadratury Newtona-Cotesa oraz kwadratury Gaussa.

3 Przyspieszanie szybkosci zbieznosci ciagu kwadratur

Zalozmy, ze dla dowolnego n kwadratury Q_n spelniaja rownanie

$$I_p(f) = Q_n(f) + \frac{c_1}{n^{\alpha_1}} + \ldots + \frac{c_m}{n^{\alpha_m}} + O(\frac{1}{n^{\alpha_{m+1}}}), \tag{27}$$

gdzie wykladniki α_i tworza ciag rosnacy

$$0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3 < \ldots \tag{28}$$

i sa znane, natomiast stale c_i zalezne od funkcji f, ale niezalezne od n , sa niewiadome. Idea *ekstrapolacji Richardsona* polega na wyznaczeniu takiej kombinacji liniowej kwadratur Q_n i Q_s, ktorej reszta nie zawiera skladnika $\frac{c_1}{n^{\alpha_1}}$. Podstawiajac we wzorze (27) $n = ns$, przy ustalonym $s > 1$, dostajemy zaleznosc

$$I_p(f) = Q_{sn}(f) + \frac{c_1}{s^{\alpha_1} n^{\alpha_1}} + \ldots + \frac{c_m}{s^{\alpha_m} n^{\alpha_m}} + O(\frac{1}{n^{\alpha_{m+1}}}) \tag{29}$$

Nastepnie mnozac ja stronami przez s^{α_1}, odejmujac rownosc (27) i przekształcajac otrzymujemy

$$I_p(f) = \frac{s^{\alpha_1} Q_{sn}(f) - Q_n(f)}{s^{\alpha_1} - 1} + \frac{c'_2}{n^{\alpha_2}} + \frac{c'_3}{n^{\alpha_3}} + \ldots + \frac{c'_m}{n^{\alpha_m}} + O(\frac{1}{n^{\alpha_{m+1}}}) \tag{30}$$

gdzie

$$c'_i = \frac{s^{\alpha_1 - \alpha_i} - 1}{s^{\alpha_1} - 1} c_i \tag{31}$$

Definiujac

$$Q_n^1(f) = \frac{s^{\alpha_1} Q_{sn}(f) - Q_n(f)}{s^{\alpha_1} - 1} \tag{32}$$

okreslamy nowy ciag kwadratur, ktorego reszty sa rzedu $\frac{1}{n^{\alpha_2}}$, a nie $\frac{1}{n^{\alpha_1}}$ jak w przypadku poczatkowego ciagu $\{Q_n\}$. Postepowanie to mazna kontynuowac biorac jako $Q_n^2(f)$ odpowiednia kombinacje liniowa $Q_n^1(f)$ i $Q_{sn}^2(f)$, ktorej reszta nie zawiera skladnika $\frac{c'_2}{n^{\alpha_2}}$, itd. az do $Q_n^m(f)$.

W przypadku kwadratury trapezow wzor (27) przyjmuje postac

$$\int_a^b f(x)dx = T_n(f) + \frac{c_1}{n^2} + \ldots + \frac{c_m}{n^{2m}} + O(\frac{1}{n^{2m+2}}) \tag{33}$$

Stosujac do ciagu $T_n(f)$ ekstrapolacje Richardsona z $s = 2$ otrzymujemy ciag kwadratur

$$T_n^1(f) = \frac{4T_{2n}(f) - T_n(f)}{4 - 1} \tag{34}$$

Ekstrapolujac $k-$krotnie dostajemy

$$T_n^k = \frac{4^k T_{2n}^{k-1} - T_n^{k-1}}{4^k - 1}\ , \qquad T_n^0 = T_n \tag{35}$$

$$
\begin{array}{ccccc}
T_1^0 & & & & \\
T_2^0 & T_1^1 & & & \\
T_4^0 & T_2^1 & T_1^2 & & \\
T_8^0 & T_4^1 & T_2^2 & T_1^3 & \\
T_{16}^0 & T_8^1 & T_4^2 & T_2^3 & T_1^4 \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{array}
\tag{36}
$$

Kwadratury T_n^k nazywane sa *kwadraturami Romberga* a przedstawiony tu szczegolny przypadek ekstrapolacji Richardsona - *metoda Romberga*.

Latwo sprawdzic, ze kwadratury T_n^1 tworzace druga kolumne macierzy (36) sa zlozonymi wzorami Simpsona. Natomiast elementy dalszych kolumn nie sa identyczne z odpowiednimi zlozonymi kwadraturami Newtona-Cotesa.