2. előadás

Numerikus analízis

Newton-Leibnitz formula

Ha f Riemann-integrálható $[a, b]$-n és itt létezik F primitív függvénye, akkor

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

Ezt a képletet csak akkor lehet alkalmazni, ha megtudjuk határozni az F primitív függvényt, különben kénytelenek vagyunk numerikus integrálást alkalmazni.

A numerikus integrálásnak úgy lehet végrehajtani, hogy az f függvényt egy p interpolációs polinommal közelítjük:

$$f(x) \approx p(x)$$

és ez alapján a határozott integrál értékét általános formában így közelítjük:

$$I = \int_a^b f(x)w(x)dx \approx \int_a^b p(x)w(x)dx,$$

ahol $w \geq 0$ egy tetszőleges súlyfüggvény.

Lagrange interpoláció alkalmazása

Legyenek adottak az $x_1, x_2, \ldots, x_n$ alappontok és ezekben az $y_1, y_2, \ldots, y_n$ függvényértékek. Ha az interpolációs polinomként a Lagrange féle interpolációs polinomot választjuk:

$$p(x) = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot l_j(x),$$

akkor

$$I = \int_a^b f(x)w(x)dx \approx \int_a^b p(x)w(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{j=1}^{n} y_j \cdot l_j(x) \right) w(x)dx$$

$$= \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot \underbrace{\left(\int_a^b l_j(x)w(x)dx \right)}_{H_j} = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot H_j$$

Hibabecslés

A numerikus integrálás hibabecslése $w \equiv 1$ esetén a következő képlet alapján állapítható meg:

$$R_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p(x)dx = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x)dx$$

ahol $\xi \in [a, b]$ és $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$. Innen:

$$|R_n(f)| \leq \frac{M_{n+1}(b-a)^{n+1}}{(n+1)!}$$

ahol

$$M_{n+1} = \max_{x \in [a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$$

Newton-Cotes formulák

Legyen $w \equiv 1$. A Newton-Cotes formulákat úgy kaphatjuk, hogy az f függvényt a Lagrange-féle interpolációs polinommal közelítjük, úgy hogy az alappontok ekvidisztánsak legyenek:

$$x_k = a + k \cdot h, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, n$$

ahol a lépésköz

$$h = (b - a)/n$$

A Newton-Cotes formulákat két változatban alkalmazhatjuk.

Zárt Newton-Cotes formula

A zárt Newton-Cotes formula az alappontokat (az a és b pontokat) is tartalmazza. Ekkor az integrált az

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)} f(a + k \cdot h) = \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)} y_k$$

alakban írhatjuk fel. Az $A_k^{(n)}$ együtthatókat a $B_k^{(n)}$ együtthatók alapján lehet kiszámítani:

$$A_k^{(n)} = (b - a)B_k^{(n)},$$

ahol

$$B_k^{(n)} = \int_a^b l_k(x)dx.$$

Mivel ekvidisztáns beosztásunk van, ezért bevezetve a $t = (x - x_0)/h$ jelölést a Lagrange együtthatókra igaz, hogy

$$l_k(x) = (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \frac{1}{t-k} \cdot \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{n!}$$

Ezekre a $B_k^{(n+1)} = \int_a^b l_k(x)dx$ együtthatókra igaz, hogy nem függnek az $[a, b]$ intervallumtól,

$$B_k^{(n)} = B_{n-k}^{(n)}$$

és

$$\sum_{k=0}^{n} B_k^{(n)} = 1.$$

A következő táblázat tartalmazza a $B_k^{(n)}$ értékeket, amelyek a zárt Newton-Cotes formulákhoz tartoznak ($n \leq 4$).

$$
\begin{aligned}
n = 1: &\quad B_0^{(1)} = 1/2, && B_1^{(1)} = 1/2, \\
n = 2: &\quad B_0^{(2)} = 1/6, && B_1^{(2)} = 4/6, && B_2^{(2)} = 1/6, \\
n = 3: &\quad B_0^{(3)} = 1/8, && B_1^{(3)} = 3/8, && B_2^{(3)} = 3/8, && B_3^{(3)} = 1/8 \\
n = 4: &\quad B_0^{(4)} = 7/90, && B_1^{(4)} = 32/90, && B_2^{(4)} = 12/90, && B_3^{(4)} = 32/90 \\
&\quad B_4^{(4)} = 7/90
\end{aligned}
$$

Nyílt Newton-Cotes formula

A nyílt Newton-Cotes formula az alappontokat (az a és b pontokat) nem tartalmazza. Ekkor az integrált az

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n-1} A_k^{(n)} f(a + k \cdot h) = \sum_{k=1}^{n-1} A_k^{(n)} y_k$$

alakban írhatjuk fel. Az $A_k^{(n)}$ együtthatókat az előzőhöz hasonlóan a $B_k^{(n)}$ együtthatók alapján lehet kiszámítani.

A következő táblázat tartalmazza a $B_k^{(n)}$ értékeket, amelyek a nyílt Newton-Cotes formulákhoz tartoznak ($n \leq 5$).

$$
\begin{aligned}
n = 3: &\quad B_1^{(3)} = 1/2, && B_2^{(3)} = 1/2, \\
n = 4: &\quad B_1^{(4)} = 2/3, && B_2^{(4)} = -1/3, && B_3^{(4)} = 2/3, \\
n = 5: &\quad B_1^{(5)} = 11/24, && B_2^{(5)} = 1/24, && B_3^{(5)} = 1/24, && B_4^{(5)} = 11/24
\end{aligned}
$$

Példa

Határozzuk meg az

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\,dx$$

integrál értékét zárt Newton-Cotes formulával $n = 4$ esetén!

Megoldás

$n = 4$ esetén az alappontok:
$x_0 = 0, x_1 = 0.25, x_2 = 0.5, x_3 = 0.75, x_4 = 1.$
A függvényértékek:
$y_0 = 1, y_1 = 16/17, y_2 = 4/5, y_3 = 16/25, y_4 = 1/2.$
A hozzátartozó együtthatók, $b - a = 1$ miatt: $A_0^{(4)} = 7/90, A_1^{(4)} = 32/90, A_2^{(4)} = 12/90, A_3^{(4)} = 32/90, A_4^{(4)} = 7/90.$

Így

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\,dx = (7/90)\cdot 1 + (32/90)\cdot(16/17) + (12/90)\cdot(4/5) + (32/90)\cdot(16/25) + (7/90)\cdot(1/2) = 6677/8500 = 0.7855294118.$$

A pontos érték:

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\,dx = \pi/4 = 0.7853981635.$$

Téglalap-formulák

A lépésköz $h = (b - a)/n$.

Első téglalap-formula:

$$I^{(1)} = h \cdot \sum_{j=0}^{n-1} y_j$$

Második téglalap-formula:

$$I^{(2)} = h \cdot \sum_{j=1}^{n} y_j$$

Ha az f függvény monoton, akkor

$$\left| I^{(.)} - \int_a^b f(x)dx \right| \leq \left| I^{(1)} - I^{(2)} \right|$$
$$= h \cdot |y_n - y_0| = h \cdot |f(b) - f(a)|$$

Ebből látszik, hogy a lépésköztől lineárisan függ a hiba, azaz $O(h)$.

Harmadik téglalap-formula:

$$I^{(3)} = h \cdot \sum_{j=1}^{n} y_{j-1/2},$$

ahol

$$y_{j-1/2} = f(x_{j-1/2}), \qquad x_{j-1/2} = (x_{j-1} + x_j)/2, \qquad j = 1, 2, \ldots, n$$

Egyszerű trapéz módszer (n=1)

Ekkor $a = x_0, b = x_1$.

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot h + R, \qquad \int_a^b f(x)dx \approx \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot h.$$

Tétel

Ha f kétszer folytonosan differenciálható és $|f''| \leq M_2$ az $[a, b]$ intervallumon, akkor

$$|R| \leq \frac{M_2 \cdot h^3}{12}.$$

Bizonyítás

A Lagrange interpoláció hibáját felhasználva:

$$f(x) = p(x) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)(x - x_1),$$

ahol $p(x)$ lineáris (egyenes) és $\xi \in [a, b]$. Innen

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b p(x)dx + \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)(x - x_1)dx$$
$$= \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot h + \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)(x - x_1)dx.$$

Bizonyítás

Ebből adódik, hogy

$$R = \int_a^b f(x)dx - \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot h = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)(x - x_1)dx.$$

$$\begin{aligned} |R| &= \left| (1/2) \cdot \int_a^b f''(\xi)(x - x_0)(x - x_1)dx \right| \\ &\leq (1/2) \cdot \int_a^b \left| f''(\xi) \right| |(x - x_0)(x - x_1)| \, dx \\ &\leq (M_2/2) \cdot \int_a^b |(x - x_0)(x - x_1)| \, dx, \end{aligned}$$

Mivel

$$\int_a^b |(x-x_0)(x-x_1)|dx = \int_a^b \left(-x^2+(x_0+x_1)x-x_0x_1\right)dx$$
$$= \left[-x^3/3+(x_0+x_1)x^2/2-(x_0x_1)x\right]_a^b$$
$$= -(b^3-a^3)/3+(a+b)(b^2-a^2)/2-ab(b-a) = h^3/6.$$

Így

$$|R| \le \frac{M_2}{2}\cdot\frac{h^3}{6} = \frac{M_2\cdot h^3}{12}.$$

Összetett trapéz formula

Kihasználva a határozott integrál additív tulajdonságát, az $[a, b]$ intervallumot felbonthatjuk az

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$$

pontokkal n részintervallumra, minden intervallumon kiszámoljuk az egyszerű trapéz formulával az integrált, és ezeket összegezzük. Így jutunk el az összetett trapézformulához:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left[y_i + y_{i+1}\right].$$

Hibabecslés

Ha $f \in C^2[a,b]$ és $|f''| \leq M_2$, akkor

$$\left| \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x_{i+1} - x_i}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \right| \leq \frac{M_2}{12} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)^3 .$$

Ha az alappontok ekvidisztánsak, azaz $x_k = a + k \cdot h$ ($k = 0, \ldots, n$), akkor a képlet alakja egyszerűsödik:

$$\int_a^b f(x)dx \approx T_n(f) := \frac{h}{2}\left[y_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i + y_n\right].$$

A képlet hibája ($nh = b - a$ miatt):

$$\left|\int_a^b f(x)dx - T_n(f)\right| \leq \frac{M_2(b-a)h^2}{12} = \frac{M_2(b-a)^3}{12n^2}.$$

A hiba h^2-tel arányos, vagyis n^2-tel fordítottan arányos. A gyakorlatban csak összetett formulát használunk.