

# Metody numeryczne

Janusz Miller

Katedra Informatyki Stosowanej  
AGH University of Science and Technology

23.11.2021

## Część VIII

# Kwadratury – numeryczne obliczanie całki oznaczonej

- 1 Kwadratury z węzłami równoodległymi
  - Metody Newtona – Cotesa
  - Oszacowanie błędu
  - Kwadratury złożone
  - Ekstrapolacja Richardsona
  - Metoda Romberga
  - Algorytmy adaptacyjne
- 2 Kwadratury z węzłami nierównoodległymi
  - Kwadratury Gaussa
  - Kwadratury Lobatto i Radaua
  - Algorytmy adaptacyjne
- 3 Podsumowanie

Kwadratury, czyli numeryczne całkowanie, są stosowane do obliczania przybliżonych wartości całek oznaczonych z funkcji, zazwyczaj danych przepisem matematycznym. Obok zastosowań tych metod do samego obliczania całki, kwadratury są podstawą konstrukcji algorytmów rozwiązywania zagadnień – można powiedzieć nadrzędnych – np. numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych.

Wykład ten jest wprowadzeniem do tego zagadnienia i nie obejmuje np. kwadratur Czebyszewa, Eulera-Maclaurina, całek niewłaściwych, podwójnych itd.

# Dane o funkcji podcałkowej - dwie możliwości

Rozróżnijmy dwie okoliczności stosowania numerycznych metod całkowania funkcji.

- 1 Wartości funkcji podcałkowej mogą być wyznaczone dla dowolnego argumentu, np. gdy funkcja podcałkowa jest zadana skończonym przepisem (wzorem),
- 2 Wartość funkcji jest znana tylko dla skończonej liczby wartości argumentu (liczbie punktów), np. gdy pochodzą z pomiaru w dyskretnych punktach.

Koncentrujemy się na pierwszym przypadku.

**Klasa wielomianów**  $P_n$  – wszystkie wielomiany stopnia  $k \leq n$ .

**Kwadratura** – metoda numeryczna polegająca na **przybliżeniu całki** za pomocą odpowiedniej sumy ważonej wartości całkowanej funkcji obliczonych w kilku punktach.

Wartość dokładną całki będziemy zapisywać funkcjonałem

$$I[f] = \int_a^b f(x) dx,$$

a jej przybliżenie numeryczne

$$Q[f] = (b - a) \sum_{k=0}^n \beta_k f(x_k). \quad (1)$$

**Błąd przybliżenia** jest różnicą

$$E[f] = I[f] - Q[f]. \quad (2)$$

Rzędem metody całkowania jest liczba  $p$  taka, że

$$Q[W_p] = I[W_p], \quad \text{dla} \quad W_p \in P_p$$

$$\text{i} \\ \exists W_{p+1} : Q[W_{p+1}] \neq I[W_{p+1}].$$

Inaczej mówiąc, rząd jest równy  $p$ , jeżeli metoda jest dokładna dla klasy wielomianów  $P_p$  i istnieje wielomian stopnia  $p + 1$ , dla którego błąd metody jest różny od zera.

W literaturze można spotkać inną definicję rzędu - różniącą się o 1.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi



Założmy, że wartości funkcji  $f$  można wyznaczyć dla argumentów  $x_k$  takich, że  $x_{k+1} - x_k = h$ ,  
 $k = m, m+1, \dots, M-1$ .

Sformułujmy zadanie w sposób ogólny:

Wyznaczyć przybliżoną wartość całki z funkcji  $f$  na przedziale  $[x_0, x_q]$  na podstawie wartości funkcji w punktach  $x_m, x_{m+1}, \dots, x_M$ .

Zwróćmy uwagę na brak zależności między wartościami parametrów  $q, m, M$ , (poza warunkami  $q > 0, m < M$ ). Taką ogólną kwadraturę można zapisać wzorem

$$\int_{x_0}^{x_q} f(x) dx \approx h \sum_{k=m}^M \beta_k f(x_k).$$

Wzór ten umożliwia przejrzystą klasyfikację – określaną jako Q.q.M.m – kwadratur opartych na węzłach równooddalonych.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

Przykłady najprostszych kwadratur



| QqMm    | Kwadratura        | $\beta_k$                                                                 | $p$ | $E[f]$                            |
|---------|-------------------|---------------------------------------------------------------------------|-----|-----------------------------------|
| Q.1.0.0 | prostok.(w przód) | 1                                                                         | 0   | $+\frac{1}{2}h^2f'(\xi_1)$        |
| Q.1.1.1 | prostok.(wstecz)  | 1                                                                         | 0   | $-\frac{1}{2}h^2f'(\xi_2)$        |
| Q.2.1.1 | prostok.p.środk.  | 1                                                                         | 1   | $+\frac{1}{3}h^3f''(\xi_3)$       |
| Q.1.1.0 | trapezów (NC1)    | $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$                                                | 1   | $-\frac{1}{12}h^3f''(\xi_3)$      |
| Q.2.2.0 | Simpsona (NC2)    | $\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}$                                   | 3   | $-\frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\xi_5)$  |
| Q.1.2.0 | reguła 3/8        | $\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$                      | 3   | $-\frac{3}{80}h^5f^{(4)}(\xi_5)$  |
| Q.4.4.0 | Boole'a (NC4)     | $\frac{7}{90}, \frac{32}{90}, \frac{12}{90}, \frac{32}{90}, \frac{7}{90}$ | 5   | $-\frac{8}{945}h^7f^{(6)}(\xi_7)$ |
| Q.6.6.0 | NC 6              | $\frac{41}{840}, \frac{216}{840}, \frac{27}{840}, \frac{272}{840}$        | 7   | $\sim h^9f^{(8)}(\xi_8)$          |
| Q.8.8.0 | NC 8              | $> 0$                                                                     | 9   | $\sim h^{11}f^{(10)}(\xi_{10})$   |

$h = x_q - x_0$ ,  $\xi_i \in [x_0, x_q]$ ,  $i = 1, \dots, 9$ .

Ważna podgrupa: Q.q.q.0 — zamknięte kwadratury N-C.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metody Newtona – Cotesa



AGH

www.agh.edu.pl

Kwadratura Newtona-Cotesa jest to kwadratura w postaci  $Q(f) = I(L_n)$ , gdzie  $L_n$  jest wielomianem interpolacyjnym w postaci Lagrange'a opartym na  $n + 1$  równoodległych węzłach  $x_0, x_1, \dots, x_n$ . Jeżeli  $x_0 = a$  i  $x_n = b$ , to mówimy o zamkniętych kwadraturach Newtona-Cotesa

$$x_k = a + k \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (3)$$

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) l_k(x), \quad l_k(x) = \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}. \quad (4)$$

Współczynniki  $\beta_k$  we wzorze (1) są całkami z wielomianów Lagrange'a

$$\beta_k = \int_a^b l_k(x) dx.$$

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

Metody Newtona – Cotesa, c.d.



Wybór kwadratury wysokiego rzędu, z współczynnikami różnych znaków, stwarza niebezpieczeństwo wzmocnienia szumu numerycznego.

Gdy  $n$  wzrasta, to rząd wielkości kwadratury się nie zmienia, ale jej wartość jest obliczana jako ważona średnia o rosnących (co do bezwzględnej wartości) współczynnikach wagowych, a to wiąże się z odejmowaniem dużych (w stosunku do wyniku) liczb.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Oszacowanie błędu



Całkując błąd interpolacji Lagrange'a otrzymujemy oszacowanie każdej kwadratury utworzonej na bazie tej interpolacji

$$f \in C^{n+1} \Rightarrow \exists \xi \in [a, b]: \quad E[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \cdot dx \quad (5)$$

W przypadku węzłów równoodległych całkę z wielomianu można oszacować dokładniej.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Oszacowanie błędu



Twierdzenie o błędzie zamkniętej kwadratury NC:  
Istnieje  $\xi \in [a, b]$  takie, że błąd (2)

$$E_h[f] = \frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt \quad (6)$$

gdym  $n$  jest parzyste i  $f \in C^{n+2}$  i

$$E_h[f] = \frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt \quad (7)$$

gdym  $n$  jest nieparzyste i  $f \in C^{n+1}$ .

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

Nadmiar rzędu



Porównanie rzędów pochodnych funkcji  $f$  w obu wyrażeniach prowadzi do wniosku, że rząd kwadratur wzrasta o 2 gdy  $n$  wzrasta o 1 z wartości nieparzystej do parzystej.

Ten fakt decyduje o popularności kwadratur NC opartych na nieparzystej liczbie węzłów, np. Simpsona, NC8.

# Kwadratury złożone



- Możliwości redukcji błędu kwadratur poprzez zwiększanie rzędu metody są ograniczone.
- Inny sposób zmniejszania błędu – skracanie odległości  $h$  między węzłami poprzez podział przedziału całkowania  $[a, b]$  na  $m$  podprzedziałów wyznaczonych punktami  $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_m = b$

**Kwadratura złożona** jest przybliżeniem całki na przedziale  $[a, b]$  w postaci sumy kwadratur obliczonych w każdym podprzedziale  $[x_{i-1}, x_i]$ ,  $i = 1, \dots, m$ .

# Kwadratury złożone c.d.

Przykład: Złożona kwadratura trapezowa



Dla zmniejszenia kosztu obliczeniowego, przedział  $[a, b]$  jest dzielony na  $m$  odcinków równej długości  $h = (b - a)/m$ . Wtedy tę kwadraturę można zapisać wzorem

$$Q[f] = \frac{h}{2} \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) \right], \quad h = \frac{b-a}{m}, \quad x_j = a + jh. \quad (8)$$

Koszt obliczeniowy został zredukowany o  $m - 1$  obliczeń wartości funkcji, i  $m - 1$  mnożeń.

# Porównanie błędu złożonych kwadratur NC



Jako przykład funkcji podcałkowej posłużą funkcja (rys. 1) z parametrami  $a = 0.001$ ,  $b = 0.004$ .

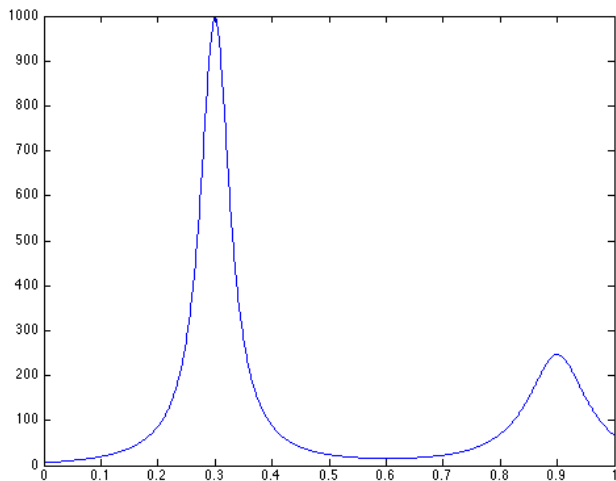
$$\int_0^1 \left( \frac{1}{(x - 0.3)^2 + a} + \frac{1}{(x - 0.9)^2 + b} - 6 \right) dx. \quad (9)$$

Wiedząc, że

$$\int_0^1 \frac{dx}{(x - x_0)^2 + a} = \frac{1}{\sqrt{a}} \left( \arctg \frac{1 - x_0}{\sqrt{a}} + \arctg \frac{x_0}{\sqrt{a}} \right),$$

wartość dokładną całki można obliczyć analitycznie.

# Porównanie błędu złożonych kwadratur NC



Rysunek: Wykres funkcji podcałkowej

# Porównanie błędu złożonych kwadratur NC

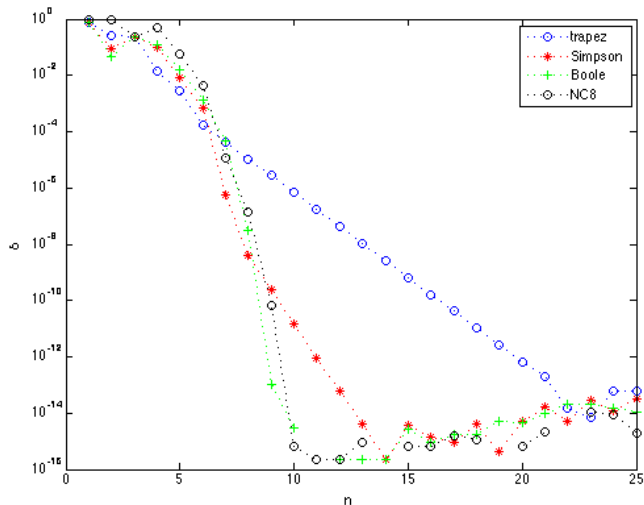


Na całym przedziale całkowania rozmieszczono  $2^n + 1$  równoodległych węzłów.

W kolejnych próbach  $n$  wzrasta o 1, a więc między każde dwa sąsiednie węzły dodawany jest nowy węzeł – zagęszczenie węzłów zwiększa się dwukrotnie.

# Porównanie błędu złożonych kwadratur NC

wykres bezwzględnych wartości (ze względu na skalę logarytmiczną) błędu względnego



# Porównanie błędu złożonych kwadratur NC

Wykresy wskazują na dwa zjawiska:



- Jeżeli odległość  $h$  między sąsiednimi węzłami jest stosunkowo duża, to wszystkie badane kwadratury są obciążone podobnym błędem. Oznacza to, że eliminowanie początkowych wyrazów szeregu Taylora nie pomniejsza znacząco błędu, bo nie jest on skupiony w elemencie z najniższą potęgą  $h$ .
- Począwszy od liczby kroków rzędu  $2^{10} \approx 1000$ , czyli dla długości kroku  $h < 0.001$  błąd kwadratur wyższych rzędów (Boole'a i NC8) jest zdominowany szumem numerycznym, a skracanie kroku jest bezcelowe. Kwadratura trapezowa osiąga tę granicę w  $h \approx 10^{-7}$ .
- Kwadratury wyższych rzędów zmniejszają błąd w stosunkowo wąskim przedziale długości kroku  $h$  – i zmniejszanie to jest tu „radikalne” (skrócenie kroku 10x powoduje redukcję błędu o 10 rzędów wielkości).

# Ekstrapolacja Richardsona



AGH

Ekstrapolacja Richardsona jest powszechnie przytaczaną w literaturze metodą przyspieszania zbieżności ciągu

przybliżeń, np. w [https:](https://en.wikipedia.org/wiki/Richardson_extrapolation)

[//en.wikipedia.org/wiki/Richardson\\_extrapolation](https://en.wikipedia.org/wiki/Richardson_extrapolation)

Przyjmijmy oznaczenia:

$A^*$  - wartość dokładna pewnego wyrażenia, (nieznana),

$A(h)$  - wartość przybliżenia tego wyrażenia, zależna od parametru  $h$ .

Zakładamy, że wartość dokładną  $A^*$  można wyrazić szeregiem potęgowym

$$A^* = A(h) + a_0 h^{k_0} + a_1 h^{k_1} + a_2 h^{k_2} + \dots \quad (10)$$

gdzie współczynniki  $a_i$  nie zależą od parametru  $h$  i stałe  $k_i$  tworzą ciąg rosnący.

# Ekstrapolacja Richardsona c.d.



Ekstrapolacja ma na celu przekształcenie szeregu (10) w szereg analogiczny, ale nie zawierający wyrazu z  $h^{k_0}$ .

Błąd przybliżenia zapisujemy wydzielając główną część błędu – wyraz z  $a_0$ :

$$A^* = A(h) + a_0 h^{k_0} + O(h^{k_1}). \quad (11)$$

Stosując krok 2 razy mniejszy od  $h$  otrzymujemy drugie przybliżenie wartości  $A^*$ :

$$A^* = A\left(\frac{h}{2}\right) + a_0 \left(\frac{h}{2}\right)^{k_0} + O(h^{k_1}). \quad (12)$$

Z układu równań (11) i (12) rugujemy składnik z współczynnikiem  $a_0$  i otrzymujemy nowy szereg – zawierający tylko wyższe niż  $k_0$  potęgi  $h$

$$A^* = \frac{2^{k_0} A\left(\frac{h}{2}\right) - A(h)}{2^{k_0} - 1} + O(h^{k_1}).$$

# Ekstrapolacja Richardsona c.d.



W wersji *repeated extrapolation*, przedstawiony powyżej schemat jest powtarzany, co prowadzi do usunięcia wyrazu z  $h^{k_1}$ , a w następnych powtórzeniach – kolejnych wyrazów szeregu.

Pozwala to na – teoretycznie nieograniczone – podnoszenie rzędu zbieżności szeregu przybliżającego wartość dokładną  $A^*$ .

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Jest to metoda wyznaczania wstępnego przybliżenia całki złożonymi kwadraturami trapezowymi, a następnie, po zastosowaniu ekstrapolacji Richardsona, kolejnymi przybliżeniami o coraz wyższym rzędzie dokładności.

Jeden z kilku możliwych schematów przewiduje przyjęcie a priori rzędu docelowego przybliżenia.

Przyjmijmy ogólnie, że będzie to nieparzysta liczba  $2n + 1$ , choć najczęściej jest ona równa 7.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



- Przedział całkowania  $[a, b]$  o długości  $h$  jest dzielony na  $m = 2^n$  podprzedziałów  $[x_0 = a, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{m-1}, x_m = b]$ .
- W punktach  $x_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, m$  obliczane są wartości funkcji  $f(x_i)$ .
- W pierwszym etapie obliczane są kwadratury trapezowe, każda na przedziale  $[a, b]$ .
- Pierwsza jest obliczona w wersji podstawowej na przedziale o długości  $h_0 = h$ , a kolejne w wersji złożonej, z podziałem na podprzedziały o długościach  $h_1 = h/2, h_2 = h/4, \dots, h_n = h/2^n$ .
- Kwadratury te oznaczmy symbolami odpowiednio  $T_0(h), T_0(h/2), \dots, T_0(h/2^n)$ .

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



- Dla ograniczenia kosztu obliczeniowego stosuje się algorytm, który korzysta z faktu, że około połowa składników sumy (8) tworzącej kwadraturę  $T_0(h/2^i)$  została obliczona w trakcie wyznaczania wartości  $T_0(h/2^{i-1})$ .

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Wartość dokładną całki możemy więc aproksymować przybliżeniami  $T_0(\cdot)$  tego samego (pierwszego) rzędu, ale z parametrem  $h/2^i$ .

Pierwszy warunek zastosowania kilkukrotnej ekstrapolacji Richardsona dla podwyższenia rzędu przybliżeń jest zatem spełniony – wyrażeniem  $A$  w szeregu (10) jest kwadratura  $T_0$ .

Warunkiem, aby każdy etap ekstrapolacji Richardsona podwyższał rząd dokładności przybliżenia co najmniej o 1, jest istnienie szeregu, w którym kolejne wyrazy są funkcjami potęgowymi zmiennej  $h_i$  (czyli współczynniki  $a_0, a_1, \dots$  nie zależą od  $h_i$ ).

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Znalezienie rozwinięcia w szereg błędu kwadratury trapezowej nie jest trudne. Po rozwinięciu funkcji podcałkowej w otoczeniu punktu centralnego podprzedziału całkowania  $x_c = (x_a + x_b)/2$  i wykorzystania go trzykrotnie, raz całkując go wyraz po wyrazie dla reprezentacji całki oraz drugi i trzeci raz – dla reprezentacji kwadratury trapezowej – wyrażając nim wartości funkcji  $f(x_a)$  i  $f(x_b)$ , otrzymujemy

$$\int_{x_a}^{x_b} f(x) dx = h \frac{f(x_a) + f(x_b)}{2} - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(x_c) - \frac{h^5}{480} f^{(4)}(x_c) - \frac{h^7}{53760} f^{(6)}(x_c) + \dots$$

Czy ten szereg spełnia warunki stawiane w ekstrapolacji Richardsona?

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



AGH

Ideę sposobu uzyskania szeregu odpowiedniego dla ekstrapolacji Richardsona można sprowadzić do zastąpienia ciągu wyrazów z pochodnymi w punktach centralnych podprzedziałów dwoma ciągami wyrazów pochodnych obliczanych na końcach podprzedziału, w którym obliczana jest całka. Przy sumowaniu całek licznych na podprzedziałach wyrazy tych ciągów powinny się zredukować z wyjątkiem pochodnych obliczanych w punktach  $a$  i  $b$ . Realizacja tej idei wymaga zastosowania wzoru Eulera-Maclaurina z wielomianami Bernoulliego.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Ostatecznie otrzymujemy szereg

$$\int_a^b f(x) dx = h_n \left( \frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{m-2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \right) + \sum_{k=1}^{\infty} A_{2k} h_n^{2k} [f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)].$$

Wartości współczynników  $A_{2k}$  i ich związek z liczbami Bernoulliego nie mają znaczenia przy korzystaniu z szeregu w ekstrapolacji Richardsona. Istotne jest tylko to, że ich wartość nie zależy od liczby podprzedziałów  $m$ , a pochodne kolejnych rzędów są obliczane w tych samych punktach (końcach przedziału) niezależnie od liczby podprzedziałów.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Zmieniając jedynie oznaczenia, możemy ten szereg zapisać w postaci

$$\int_a^b f(x) dx = T_0(h_n) + a_0 h_n^2 + a_1 h_n^4 + a_2 h_n^6 + \dots$$

a więc takiej, jaka jest wymagana w ekstrapolacji Richardsona.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Warto zwrócić uwagę na wykładniki potęg  $h_n$  w kolejnych wyrazach szeregu.

Mają one wartości tylko parzyste, co sprawia, że wyrugowanie w jednym etapie ekstrapolacji jednego wyrazu szeregu zwiększa rząd przybliżenia o 2.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



W pierwszym etapie ekstrapolacji z przybliżeń  $T_0(h)$  i  $T_0(h/2)$  otrzymujemy nowe przybliżenie, oznaczmy je

$$T_1(h) = \frac{4T_0(h/2) - T_0(h)}{3},$$

dla którego szereg reprezentujący błąd nie zawiera wyrazu z potęgą  $h^2$ . Analogicznie, z  $T_0(h/2)$  i  $T_0(h/4)$  otrzymujemy przybliżenia  $T_1(h/2)$  itd.

# Kwadratury z węzłami równoodległymi, c.d.

## Metoda Romberga



Drugi etap ekstrapolacji przebiega podobnie – otrzymujemy przybliżenia  $T_2(h)$ ,  $T_2(h/2)$ , ... których błąd jest szeregiem bez wyrazu z potęgą o wykładniku 4. W trzecim etapie ekstrapolacji otrzymujemy przybliżenie rzędu 7 określane często jako kwadratura Romberga. Ogólny wzór na kwadraturę obliczaną na etapie  $i$  ma postać

$$T_i(h_j) = \frac{4^{j-1} T_i(h_{j-1}) - T_{i-1}(h_{j-1})}{4^{j-1} - 1}.$$

Choć liczba etapów jest teoretycznie nieograniczona, to w praktyce najczęściej ogranicza się ją do 3.

# Porównanie błędu zamkniętych kwadratur NC i Romberga

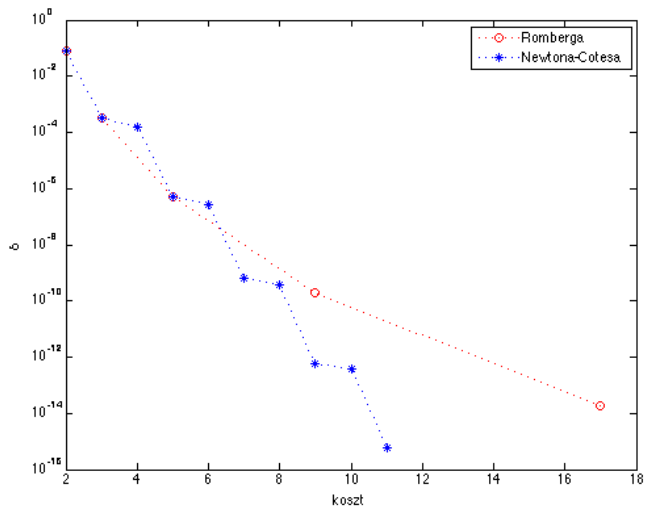


Obliczamy numeryczne przybliżenia całki z funkcji wykładniczej  $f(x) = \exp(x)$  w przedziale  $[1, 2]$ .

Na przedziale tym są równomiernie rozłożone węzły  $x_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ .

W każdej próbie jest obliczona jedna kwadratura obejmująca cały przedział całkowania, tzn. nie stosujemy kwadratur złożonych.

# Porównanie błędu zamkniętych kwadratur NC i Romberga



# Algorytmy adaptacyjne

## O algorytmach adaptacyjnych – ogólnie



AGH

Dotychczas rozważaliśmy algorytmy rozwiązywania problemu numerycznego, w których wybór metody i ustalenie jej parametrów (np. rzędu lub kroku) poprzedzały numeryczne rozwiązywanie problemu. Dokładność rozwiązania jest zdeterminowana początkowym wyborem metody i parametrów.

W przeciwieństwie do tego sposobu, stosując algorytmy adaptacyjne, a priori wybieramy metodę i zadajemy granice dopuszczalnego błędu. Natomiast parametry metody są dobierane automatycznie w trakcie rozwiązywania problemu tak, aby błąd rozwiązania mieścił się w założonym zakresie, a koszt obliczeniowy był możliwie najmniejszy. W algorytmach adaptacyjnych pojawia się więc konieczność oceny błędu rozwiązania.

# Algorytmy adaptacyjne

## Ocena błędu



Jak sprawdzić, czy dokładność kwadratury, osiągnięta przy aktualnej wartości kroku i rzędu, odpowiada założonej tolerancji.

### Algorytm wykorzystujący ekstrapolację Richardsona:

Z układu równań (11) i (12) rugujemy wartość dokładną  $A^*$  i otrzymujemy przepis na główną część błędu przybliżenia  $A(h/2)$

$$\frac{a_0 h^{k_0}}{2^{k_0}} \approx \frac{A\left(\frac{h}{2}\right) - A(h)}{2^{k_0} - 1}. \quad (13)$$

Jest to przybliżona wartość błędu bezwzględnego. Warunek spełnienia wymaganej dokładności można zapisać w postaci

$$\frac{\left| Q\left[f; \frac{h}{2}\right] - Q[f; h] \right|}{2^{k_0} - 1} < \max \left( \text{RelTol} \cdot \left| Q\left[f; \frac{h}{2}\right] \right|, \text{AbsTol} \right).$$

# Algorytmy adaptacyjne

## Ocena błędu



Kryterium nie posługuje się wartościami błędów ani górnym ograniczeniem błędu (do tego konieczne byłoby oszacowanie z góry pochodnej odpowiedniego rzędu funkcji podcałkowej), lecz tylko przybliżonymi wartościami głównej części błędów. Powstaje więc niebezpieczeństwo, że kryterium to będzie spełnione, mimo że faktyczny błąd będzie przekraczał zadaną wielkość, nie ma więc gwarancji osiągnięcia zadanej dokładności.

Dlatego stosuje się „dodatkowe zabezpieczenia”.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Przypomnienie kilku informacji o wielomianach ortogonalnych



Ciąg wielomianów  $P_n^*$ :  $P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)$  jest **ortogonalny** z ciągłą funkcją wagową  $w(x) \geq 0$  na przedziale  $[a, b]$ , jeżeli

$$\int_a^b w(x) P_k(x) P_j(x) dx \begin{cases} \neq 0 & \text{dla } k = j, \\ = 0 & \text{dla } k \neq j. \end{cases}$$

Wielomiany ortogonalne mają tylko pierwiastki rzeczywiste, jednokrotne, leżące w przedziale  $(a, b)$ .

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Kwadratury z funkcją wagową.



Rozważamy przybliżenie całki funkcji  $f$  z funkcją wagową  $w$  w kwadraturę o współczynnikach  $\beta_k$  i węzłach  $x_k$ :

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n \beta_k f(x_k). \quad (15)$$

Współczynniki  $\beta$  kwadratury są obliczane przez scałkowanie wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a

$$\beta_k = \int_a^b w(x) \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx$$

i zależą tylko od funkcji wagowej i od rozkładu węzłów, a nie zależą od funkcji  $f(x)$ .

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Kwadratury Gaussa



Ideę poszukiwania maksymalnego rzędu kwadratury można w skrócie interpretować następująco:

Szukamy takich współczynników wagowych  $\beta_k$  i takiego rozkładu węzłów  $x_k$ , dla których równość (przybliżona) (15) jest spełniona dokładnie, gdy funkcją  $f$  jest dowolny wielomian jak najwyższego stopnia. Wartość całki (wyrażenia lewej strony (15)) jest punktem w przestrzeni współczynników wielomianów. Wartość kwadratury (prawej strony (15)) jest punktem w przestrzeni  $(2n+2)$ -wymiarowej ( $n+1$  współczynników  $\beta_k$  i  $n+1$  węzłów). Szukamy jednoznacznego odwzorowania przestrzeni całki z wielomianów w przestrzeń kwadratur. Zatem wymiar przestrzeni całki nie może być większy od  $2n+2$ , czyli stopień wielomianu nie może być większy od  $2n+1$ .

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Kwadratury Gaussa



**Kwadraturą o maksymalnym rzędzie  $(2n + 1)$  jest kwadratura interpolacyjna, której **węzłami są pierwiastki wielomianu ortogonalnego na przedziale  $[a, b]$ .****

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Kwadratury Gaussa c.d.



Przykładowe zestawienia przedziału całkowania, funkcji wagowej i rodzaju wielomianu ortogonalnego.

| $[a, b]$            | $w(x)$                   | symbol   | nazwa kwadratury             |
|---------------------|--------------------------|----------|------------------------------|
| $[-1, 1]$           | 1                        | $P_n(x)$ | Gaussa–Legendre’a            |
| $(-1, 1)$           | $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ | $T_n(x)$ | Gaussa–Czebyszewa I          |
| $[-1, 1]$           | $\sqrt{1-x^2}$           | $U_n(x)$ | Gaussa–Czebyszewa II rodzaju |
| $[0, \infty]$       | $e^{-x}$                 | $L_n(x)$ | Gaussa–Laguerre’a            |
| $[-\infty, \infty]$ | $e^{-x^2}$               | $H_n(x)$ | Gaussa–Hermite’a             |

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Kwadratury Gaussa c.d.



Patrząc z perspektywy obliczeń z ograniczoną dokładnością maszynową należy zwrócić uwagę na dwie prawidłowości:

- Współczynniki kwadratur Gaussa<sup>1</sup> są dodatnie:  
 $\beta_k > 0, \quad k = 0, 1, \dots, n$ . - Zagrożenie znacznej utraty cyfr znaczących przy odejmowaniu nie jest duże (odejmowania nie można całkowicie wykluczyć, bo funkcja podcałkowa może w przedziale całkowania zmienić znak).
- Wartości pierwiastków wielomianów ortogonalnych  $x_k$  oraz współczynniki kwadratury  $\beta_k$  są liczbami niewymiernymi, więc w obliczeniach musi pojawić się błąd zaokrąglania.

<sup>1</sup>Dla kwadratur N-C tylko dla  $n \leq 7$  oraz  $n=9$

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Kwadratury typu Gaussa z częścią węzłów poza pierwiastkami wielomianu ortogonalnego



Jeżeli zażądamy ustawienia  $m$  węzłów  $u_k$  w punktach innych niż w pierwiastkach wielomianu ortogonalnego, to przybliżenie całki typu gaussowskiego opartej na  $m + n$  węzłach zapisuje się za pomocą dwóch sum

$$\int_{-1}^1 w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^m a_k f(u_k) + \sum_{k=0}^n w_k f(x_k), \quad (16)$$

gdzie stałe  $a_k$ ,  $w_k$  i  $x_k$  są dobrane tak, aby przybliżona równość (16) była spełniona dokładnie dla wielomianów możliwie najwyższej  $(m + 2n + 1)$  klasy.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Kwadratury typu Gaussa z częścią węzłów poza pierwiastkami wielomianu ortogonalnego



Trzy popularne przypadki to:

- ①  $m = 1$  – wymuszenie położenia jednego węzła w  $u_1 = -1$  – kwadratura Radau-I,
- ②  $m = 1$  – wymuszenie położenia jednego węzła w  $u_1 = 1$  – kwadratura Radau-II,
- ③  $m = 2$  – dwa węzły umieszczone w  $u_1 = -1$  i  $u_2 = 1$  – kwadratura Lobatto-III.

Rząd (w stosunku do rzędu metod Gaussa) mniejszy o 1 w przypadku kwadratur Radaua, a o 2 w kwadraturach Lobatto.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Algorytmy adaptacyjne: Schemat Gaussa – Kronroda



Schemat Kronroda jest propozycją poprawy relacji rzędu do kosztu w kwadraturach typu gaussowskiego.

Szkic schematu Kronrodawygląda następująco:

- 1 Startujemy z węzłami  $u_0, u_1, \dots, u_n$  dobranymi wg metody Gaussa.
- 2 Otrzymujemy przybliżenie rzędu rzędu  $2n+1$ .
- 3 Dodajemy węzły  $x_0, x_1, \dots, x_{n+1}$
- 4 Otrzymujemy<sup>2</sup> metodę rzędu  $3n + 4$ .

---

<sup>2</sup>Suma z węzłami  $u_i$  musi być obliczona powtórnie, bo wagi są inne niż w kwadraturze Gaussa.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

Algorytmy adaptacyjne, c.d.



Przykładami algorytmów stosujących kwadratury typu gaussowskiego jest – obecnie uznawany za najbardziej efektywny – algorytm opublikowany przez Laurie (1997) oraz kwadratura Gaussa-Lobatto implementowana w procedurze MATLABa `integral`  
<https://www.ams.org/journals/mcom/1997-66-219/S0025-5718-97-00861-2/S0025-5718-97-00861-2.pdf>.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Porównanie algorytmów adaptacyjnych



AGH

Ilustracja ewolucji algorytmów całkowania numerycznego na przykładzie środowiska obliczeniowego MATLAB. Porównano 4 relacje między kosztem a błędem 4 adaptacyjnych, rekurencyjnych procedur (w nawiasie podano zastosowaną kwadraturę):

- 1 quad (Simpsona),
- 2 quad8 (NC8),
- 3 quadl (Lobatto),
- 4 quadgk (Gaussa-Kronroda).

Należy zaznaczyć, że pierwsze dwie procedury są już wycofane z biblioteki, a w tym eksperymencie służą jako punkty odniesienia dla współczesnych metod.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

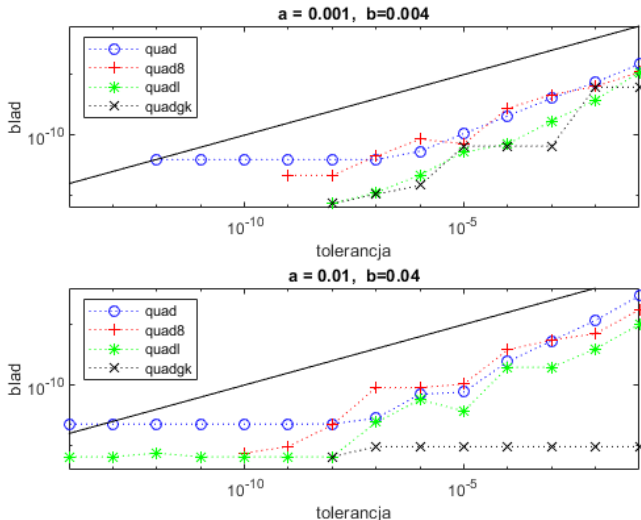
## Porównanie algorytmów adaptacyjnych



Obliczana jest ta sama całka (9), ale z dwoma zestawami parametrów. Algorytmom adaptacyjnym nie narzucamy długości kroku, lecz wymaganą dokładność. W pierwszej części doświadczenia zobaczymy, jaki jest w praktyce „margines dokładności” otrzymywanych wyników. Na pierwszym rysunku przedstawiono wykres zależności błędu od zadanej tolerancji (względnej i bezwzględnej na tym samym poziomie). Górny wykres przedstawia wyniki całkowania funkcji o wartościach maksimów lokalnych dziesięciokrotnie większych, niż funkcji całkowanej na wykresie dolnym.

# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Porównanie algorytmów adaptacyjnych



# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Porównanie algorytmów adaptacyjnych

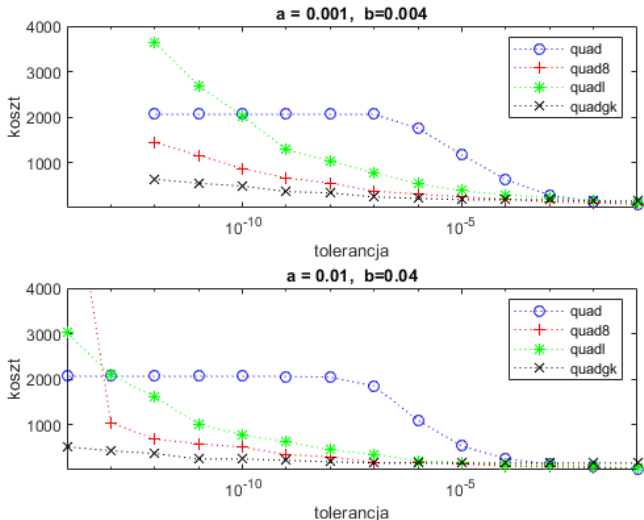


W obu przypadkach odległości między dopuszczalnym błędem, a błędem faktycznym, sięgają kilku (ok. 3) rzędów wielkości. Jedynym wyjątkiem jest ustabilizowanie się błędu procedury quad na jednym poziomie. Jest to spowodowane (sygnałizowanym przez procedurę) osiągnięciem granicy dopuszczalnej głębokości rekursji (10. poziomu).

Na dolnym wykresie widać pewną odmienność przebiegu błędu algorytmu Gaussa-Kronroda. Nawet przy dużym dopuszczalnym błędzie, wynik obliczeń redukuje błąd do poziomu błędu maszynowego. Jest to okupione wyższym kosztem obliczeniowym, co pokazuje eksperyment następny.

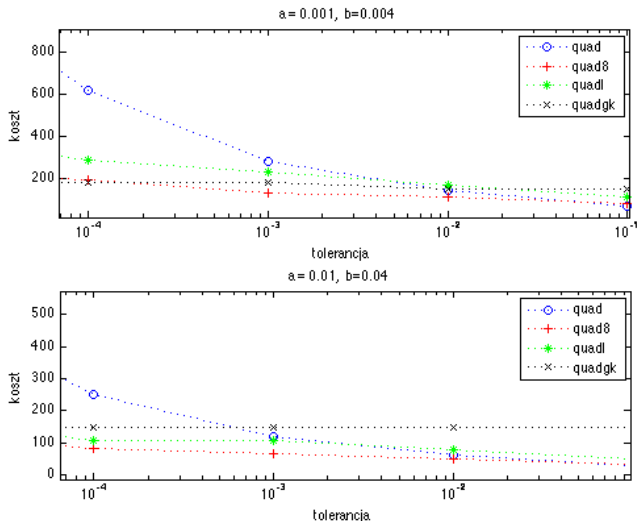
# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Porównanie algorytmów adaptacyjnych



# Kwadratury z węzłami nierównoodległymi

## Porównanie algorytmów adaptacyjnych



# Podsumowanie o kwadraturach



- Całkowanie „prostych” funkcji nie wymaga stosowania kwadratur wysokiego rzędu.
- Kwadratury z węzłami nierównoodległymi trudniej zastosować w sytuacji, gdy wartości funkcji nie są obliczane ze znanego przepisu, lecz pochodzą z pomiarów.
- Praktyczne znaczenie problemu obliczania całek oznaczonych pojawia się w zagadnieniach „nadrzędnych” – przede wszystkim w numerycznym rozwiązywaniu równań różniczkowych.