

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

9. előadás

Numerikus integrálás,
Gauss-kvadratura

Numerikus integrálás

Numerikus integrálás

- Newton-Leibniz szabály

$$I(f) \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

- Határozott (Riemann-)integrálok **numerikus módszerekkel** való közelítése

Korábban tanult fogalmak

- **Kvadratúra-formula**

súlyozott összeg $\int_a^b f(x)dx \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$

- **Interpolációs kvadratúra-formula**

megkapható az alappontjaira felírt Lagrange-féle interpolációs polinom kiintegrálásával

- **Newton-Cotes formula**

ekvidisztáns módon választunk alappontokat

Korábban tanult fogalmak

- **Nyitott formula** (a határok nem alappontok)
- **Zárt formula** (a határok is alappontok)

- **Érintő-formula**

$$I(f) \approx (b - a) f\left(\frac{a + b}{2}\right)$$

- **Trapéz-formula**

$$I(f) \approx (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Kvadrátúra-formula rendje

Definíció. A Q_n kvadrátúra-formula rendje az r szám, ha Q_n bármely legfeljebb r -ed fokú $p(x)$ polinomra pontos ($0 = R_n(p) \stackrel{\text{def}}{=} I(p) - Q_n(p)$), de létezik olyan $r+1$ -ed fokú $q(x)$ polinom, amire Q_n már nem pontos, tehát $R_n(q) \neq 0$.

A fenti definíciót átfogalmazhatjuk: A rend r , ha Q_n pontos az $1, x, x^2, \dots, x^r$ hatványfüggvényekre, de nem pontos x^{r+1} -re.

A rend meghatározása

- Az átfogalmazott definíció alapján a rend meghatározásához csak véges sok (legfeljebb $2n$) polinomot kell megvizsgálni.
- Ha az alappontokat és a súlyokat ismeretlennek tekintjük, akkor egy $r+1$ egyenletből álló $2n$ változós nemlineáris egyenletrendszerrel kell megvizsgálni.

A rend meghatározása

$$w_1 + w_2 + \dots + w_n = \int_a^b 1 dx$$

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n = \int_a^b x dx$$

⋮

$$w_1 x_1^r + w_2 x_2^r + \dots + w_n x_n^r = \int_a^b x^r dx$$

Sejtés: $r + 1 \leq 2n$

Felső korlát

Tétel. *A Q_n n alappontos kvadratura-formula rendje legfeljebb $2n-1$ lehet.*

Bizonyítás.

Tekintsük $q(x) = (\omega_n(x))^2$ $2n$ -ed fokú polinomot, ahol $\omega_n(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n)$.

$$0 < \int_a^b (\omega_n(x))^2 dx = I(q) \neq Q_n(q) = \sum_{i=1}^n w_i (\omega_n(x_i))^2 = 0$$

Tehát erre már nem pontos a formula.

Példa

*Határozzuk meg az **a** és **b** alappontokhoz tartozó maximális pontosságú formulát!*

Tekintsük az alábbi egyenletrendszert!

$$w_1 + w_2 = \int_a^b 1 dx = b - a$$

$$w_1 a + w_2 b = \int_a^b x dx = \frac{b^2 - a^2}{2}$$

Ennek egyetlen megoldása a trapézformulához vezet:

$$w_1 = w_2 = \frac{b - a}{2} \quad Q_2(f) = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Gauss-kvadrátúra

Súlyfüggvény

- Tekintsük az alábbi integrált!

$$I(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$$

$\rho(x)$ rögzített, nemnegatív integrálható
ún. **súlyfüggvény**

- A numerikus közelítést továbbra is

$$I(f) \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

alakú kvadratura-formulával végezzük, ami explicit módon a súlyfüggvényt **nem** tartalmazza.

Súlyfüggvény

- Olyan súlyfüggvényekkel foglalkozunk, amelyek teljesítik a következő feltételeket:

a) $\rho(x) \geq 0$ és $\rho(x)$ -nek legfeljebb véges sok zérushelye van $[a,b]$ -ben

b) $\rho(x)$ folytonos $[a,b]$ -ben

Alkalmazások

- Ha sok olyan függvény integrálját kell kiszámítani, amelyek közös tényezőt tartalmaznak (érdeemes a közös tényezőt súlyfüggvénynek venni).
- Valószínűségszámítási feladatok
- Fizikai, kémiai jellegű problémák
- Korábban tulajdonképpen a $\rho(x) \equiv 1$ speciális esettel dolgoztunk.

Az interpolációs kvadratura formulákra általánosítások

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x)\rho(x)dx$$

Súlyok: $w_i \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b L_i(x)\rho(x)dx$

Hasonlóan átalakíthatók az interpolációs kvadratura-formulákra vonatkozó számos alapvető tétel (képlet hibára, rendre, stb.)

Gauss-kvadratura

- Határozzuk meg, hogy melyek a „legjobb” kvadratura-formulák, amelyeknek **maximális** a rendjük.

Definíció. *Adott $[a,b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó maximális rendű kvadratura-formulákat Gauss-féle kvadratura-formuláknak nevezzük.*

Mikor lehet a rend maximális?

Tétel. Az $[a,b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó n alappontos Q_n interpolációs kvadrátúra-formula rendje akkor és csak akkor $2n-1$, ha bármely legfeljebb $n-1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra

$$\int_a^b p(x)\omega_n(x)\rho(x)dx = 0.$$

Bizonyítás

Szükségesség

A $p(x)\omega_n(x)$ polinom fokszáma legfeljebb $2n-1$,
így pontos rá a formula:

$$\int_a^b p(x)\omega_n(x)\rho(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i p(x_i)\omega_n(x_i) = 0.$$

Bizonyítás

Elegendőség

Legyen $g(x)$ egy tetszőleges legfeljebb $2n-1$ -ed fokú polinom.

Végezzünk el egy euklideszi osztást $g(x)$ -en $\omega_n(x)$ -szel:

$$g(x) = q(x)\omega_n(x) + r(x)$$

ahol

$$\partial q, \partial r \leq n - 1.$$

Bizonyítás

Az előbbi osztást felhasználva:

$$\int_a^b g(x)\rho(x)dx =$$

$$\int_a^b q(x)\omega_n(x)\rho(x)dx + \int_a^b r(x)\rho(x)dx =$$

$$0 + Q_n(r) =$$

$$Q_n(g).$$

Ortogonalitás

Definíció. Az $f(x), g(x) \in C[a, b]$ függvényeknek az $[a, b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó belső szorzatát az

$$[f, g] \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)dx$$

integrállal értelmezzük. Az $f(x)$ és a $g(x)$ függvények ortogonálisak, ha

$$[f, g] = 0.$$

A $C_2[a, b]$ euklideszi tér

- Megmutatható, hogy az előbbi definícióban szereplő formula valóban belső szorzatot definiál.

- A kapott euklideszi teret, így jelöljük:

$$C_2[a, b].$$

- Az egyszerűség kedvéért nem tüntetjük fel külön a súlyfüggvényt, és a belső szorzat felírásánál elhagyjuk az argumentumot: $[f, g]$ -t írunk $[f(x), g(x)]$ helyett.

Az előző tétel átfogalmazása

Tétel. *Az $[a,b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó tetszőleges n alappontos Q_n interpolációs kvadratura-formula rendje akkor és csak akkor $2n-1$, ha az alappontjaira felírt $\omega_n(x)$ n -ed fokú polinom ortogonális bármely legfeljebb $n-1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra.*

Megjegyzés. Fontos szerepe van a polinomokból álló $P_2[a,b] \subset C_2[a,b]$ altérnek.

Ortogonalis polinomrendszer

Definíció. Rögzített $[a,b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó ortogonalis polinomrendszeren polinomok olyan

$$p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots$$

sorozatát értjük, ahol

a) $\partial p_n(x) = n$

b) $[p_i, p_n] = \int_a^b p_i(x) p_n(x) \rho(x) dx = 0, \text{ ha } i \neq n.$

Ortogonalis polinomrendszer

Ortogonalis polinomrendszert tekintve

- $\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots\}$ a $P_2[a, b]$ tér bázisa, vagyis minden $n-1$ -ed fokú $q(x) \in P_2[a, b]$

polinom egyértelműen felírható így:

$$q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i(x).$$

- $p_n(x)$ ortogonalis minden legfeljebb $n-1$ -ed fokú $q(x)$ polinomra.

Ortogonalis polinomrendszer létezése

$$p_{-1}(x) \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1$$

$$p_{n+1}(x) = (x - \beta_{n+1})p_n(x) - \gamma_{n+1}^2 p_{n-1}(x)$$

rekurzió ortogonalis polinomrendszert
határoz meg, ahol

$$\beta_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[xp_n, p_n]}{[p_n, p_n]}, \quad \gamma_1^2 = 0, \quad \gamma_{n+1}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[p_n, p_n]}{[p_{n-1}, p_{n-1}]},$$

tetszőleges $[a, b]$ intervallumot és $\rho(x)$ súly-
függvényt véve.

Ortogonalis polinomrendszer unicitásáról

- Ha $\{p_n(x)\}$ és $\{q_n(x)\}$ azonos intervallumhoz és súlyfüggvényhez tartozó ortogonalis polinomrendszerek, akkor megadható olyan $\{\alpha_n\}$ számsorozat, hogy

$$q_n(x) = \alpha_n p_n(x),$$

minden n természetes számra.

Ortogonalis polinomok gyökeinek eloszlásáról

- A $\{p_n(x)\}$ ortogonalis polinomrendszer $p_n(x)$ elemének $x_i^{(n)}$ gyökeire igaz, hogy $(1 \leq i \leq n)$
 - a) a gyökök valósak, egyszeresek és az (a,b) intervallumban vannak.
 - b) $p_{n-1}(x)$ gyökei szétválasztják $p_n(x)$ gyökeit,
$$a < x_1^{(n)} < x_1^{(n-1)} < x_2^{(n)} < x_2^{(n-1)} < \dots < x_{n-1}^{(n-1)} < x_n^{(n)} < b$$
 - c) a gyökök mindenütt sűrűn vannak (a,b) -ben, (végtelen sok gyök van minden részintervallumban).

Gauss-kvadraturák

- Maximális rendű kvadratura-formulát kapunk, ha a $p_n(x)$ polinom zérushelyeihez tartozó interpolációs kvadratura-formulát vesszük.
- A Gauss-kvadraturák tulajdonságait a következő tételben foglaljuk össze.

Gauss-kvadrátúrák

- Tetszőleges $[a,b]$ intervallum és $\rho(x)$ súlyfüggvény esetén a Q_n Gauss-kvadrátúra
 - a) egyértelműen létezik és rendje $2n-1$
 - b) alappontjai a $p_n(x)$ polinom x_1, \dots, x_n gyökei, súlyait az alábbi integrálok

adják:

$$w_i \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b \frac{p_n(x)}{(x-x_i)p'_n(x_i)} \rho(x) dx$$

- c) a súlyok pozitívak.

A Gauss-kvadratura súlyai

- A Gauss-kvadratura súlyait úgy is megkaphatjuk, hogy az alappontokat behelyettesítjük az ortogonális polinomokba és megoldjuk az alábbi lineáris egyenletrendszer $0 \leq i \leq n-1$:

$$\sum_{j=1}^n w_j p_i(x_j) = \begin{cases} [p_0, p_0], & \text{ha } i = 0 \\ 0, & \text{ha } 1 \leq i \leq n-1 \end{cases}$$

Megjegyzés

- Kidolgozhatók a Gauss-formulákon alapuló kvadrátúraszabályok is, de használatuk nehézkes, mert a súlyok értéke általában függ az integrálási intervallumtól.
- Használni lehet a $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó **Legendre-Gauss fomulákat**.

Példa

Vezessük le a $[0, 1]$ intervallumhoz és a $\rho(x) = \sqrt{x}$ súlyfüggvényhez tartozó Gauss-kvadrátúra formulát 1 alappont esetén.

$$p_{-1}(x) \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1 \quad p_{n+1}(x) = (x - \beta_{n+1})p_n(x) - \gamma_{n+1}^2 p_{n-1}(x)$$

$$\beta_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[xp_n, p_n]}{[p_n, p_n]}, \quad \gamma_1^2 = 0, \quad \gamma_{n+1}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[p_n, p_n]}{[p_{n-1}, p_{n-1}]},$$

$$p_1(x) = (x - \beta_1)p_0(x) - \gamma_1^2 p_{-1}(x) = x - \beta_1$$

Példa

$$\beta_1 = \frac{[x,1]}{[1,1]} = \frac{\int_0^1 x\sqrt{x}dx}{\int_0^1 \sqrt{x}dx} = \frac{3}{5} \quad p_1(x) = x - \frac{3}{5}$$

$$w_1 = \int_a^b \frac{p_1(x)}{(x-x_1)p_1'(x_1)} \rho(x) dx = \int_0^1 \sqrt{x} dx = \frac{2}{3}$$

$$Q_1(f) = \frac{2}{3} f\left(\frac{3}{5}\right)$$

Példa

$$\int_0^1 x^3 (\sin \pi x)^2 dx$$

Az integrál pontos értéke:

$$\frac{\pi^2 - 3}{8\pi^2} \approx 0.08700455614$$

A $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó 5 alappontos Gauss-kvadratúrával való közelítés eredménye:

0.08790654574

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Vezesse le a $[0, 1]$ intervallumhoz és a $\rho(x) = \sqrt{x}$ súlyfüggvényhez tartozó Gauss-féle kvadrátúra formulát 3 alappont esetén.

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy

$$\int_{-1}^1 |\omega_n(x)| dx$$

pontosan akkor lesz⁻¹ minimális, ha az

$$U_0(x) = 1, U_1(x) = 2x, \dots,$$

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x)$$

rekurzióval definiált n -edik másodfajú Csebisev-polinom zérushelyeit vesszük alappontoknak.

Gyakorló feladat

- Közelítse a $[0, 1]$ intervallumhoz és az azonosan 1 súlyfüggvényhez tartozó 5 alappontos Gauss-kvadraturával az alábbi integrált.

$$\int_0^1 x^3 (\sin \pi x)^2 dx$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.