فصل چهارم: بخش اول:انتگرال‌گیری عددی
(Numerical Integration)

به دلیل غیرقابل حل بودن انتگرال‌هایی نظیر:

$$\int_0^1 \cos(x^2)dx,\ \int_1^2 \frac{\sin(x)}{x}dx,\ \int_{-3}^{-1} e^{-x^2}dx, \ldots$$

از روش‌های عددی در تقریب انتگرال استفاده می‌کنیم.

ایده‌های انتگرال‌گیری عددی:

- ایده تقریب تابع زیرانتگرال به کمک چندجمله‌ای درونیاب آن
- ایده بکارگیری کوادراتورهای انتگرال‌گیری

I. ایده تقریب تابع زیرانتگرال به کمک چندجمله‌ای درونیاب آن: فرض کنیم با حل انتگرال $\int_a^b f(x)dx$ روبرو هستیم. بسته به این که از درونیاب با چه درجه‌ای در تقریب تابع f استفاده نماییم، فرمول‌های انتگرال‌گیری متعددی بوجود خواهند آمد. در ادامه به دو تا از این فرمول‌ها اشاره می‌کنیم:

الف) فرمول ذوزنقه‌ای (Trapezoid Formula): چنانچه در تقریب $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ از درونیاب درجه یک (درونیاب خطی) به جای تابع زیر انتگرال استفاده شود، داریم:

$$f(x) \simeq P(r) = f_i + r\Delta f_i$$

(در اینجا و برای سادگی در محاسبه، فرض شده است که نقاط متساوی‌الفاصله و درونیاب به‌کار رفته نیز درونیاب بر اساس تفاضلات پیشرو است)

$$x = x_i + rh \Rightarrow \begin{cases} x = x_i \rightarrow x_i = x_i + rh \rightarrow 0 = rh \rightarrow r = 0 \\ x = x_{i+1} \rightarrow x_{i+1} = x_i + rh \rightarrow x_{i+1} - x_i = rh \rightarrow h = rh \rightarrow r = 1 \\ dx = d(x_i + rh) = d(x_i) + d(rh) = 0 + hdr = hdr \end{cases}$$

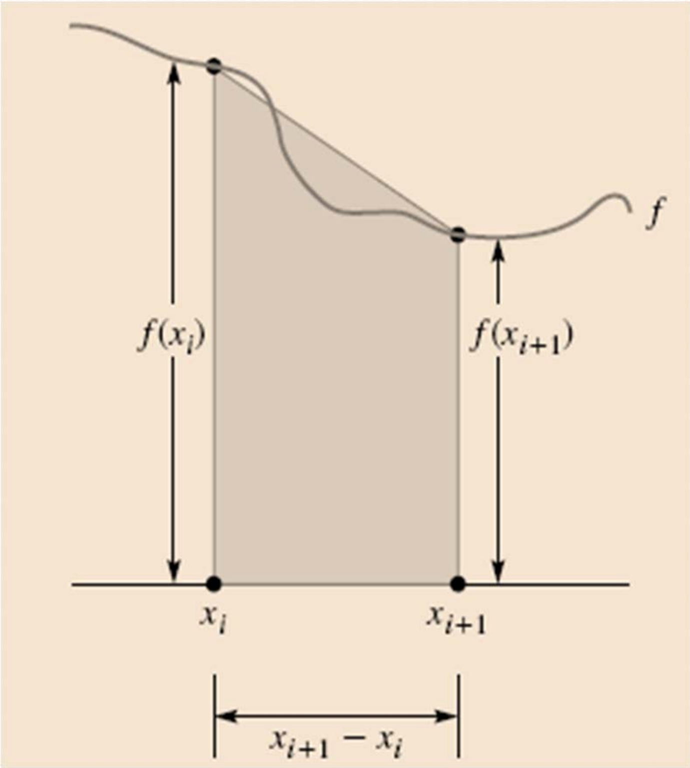
و لذا:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \int_0^1 (f_i + r\Delta f_i)hdr = h\int_0^1 (f_i + r\Delta f_i)dr = h\left(rf_i + \frac{r^2}{2}\Delta f\right)\Bigg|_0^1$$
$$= h(f_i + \frac{1}{2}\Delta f_i) = h(f_i + \frac{1}{2}(f_{i+1} - f_i)) = \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

بنابراین در نهایت فرمول ذوزنقه‌ای به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

فرمول ذوزنقه ساده



تعبیر هندسی فرمول ذوزنقه ساده

تذکر: چنانچه فرمول ذوزنقه ساده به کل بازه $[a,b]$ تعمیم داده شود، نسخه‌ی مرکب (Composite) این فرمول به شکل زیر به دست خواهد آمد:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x)dx$$
$$\simeq \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + \cdots + \frac{h}{2}(f_{n-1} + f_n)$$
$$= \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n)$$

همانگونه که مشخص است، منطق فرمول ذوزنقه‌ای ساده که همان استفاده از دو محاسبه تابع زیر انتگرال در هر زیر بازه‌ی انتگرال‌گیری است، در فرمول ذوزنقه‌ای مرکب هم رعایت شده است.

مثال) مطلوبست تعیین تقریبی از $\int_0^1 e^x dx$ به کمک روش ذوزنقه‌ای به نحویکه فقط از 5 محاسبه تابع زیر انتگرال استفاده شود. جواب تحلیلی را نیز یافته و خطای مطلق تقریب را بیابید.

حل: جواب تحلیلی عبارتست از: $\int_0^1 e^x dx = e^x \Big|_{x=0}^{1} = e^1 - e^0 \simeq 1.7183$. از طرفی چون در مساله ذکر گردیده که تنها از 5 محاسبه تابع زیر انتگرال استفاده شود، لذا باید طول گام h را طوری تنظیم کنیم که در بازه $[0,1]$ فقط 5 نقطه داشته باشیم. این کار با $h = \frac{1}{4} = 0.25$ محقق خواهد شد و داریم:

$$h = 0.25 \Rightarrow \underbrace{0,\ 0.25,\ 0.5,\ 0.75,\ 1}_{\text{Five Points}}$$

بنابراین:

$$\int_0^1 e^x dx = \int_0^{0.25} e^x dx + \int_{0.25}^{0.5} e^x dx + \int_{0.5}^{0.75} e^x dx + \int_{0.75}^{1} e^x dx$$
$$\simeq \frac{0.25}{2}(e^0 + 2e^{0.25} + 2e^{0.5} + 2e^{0.75} + e^1) \simeq 1.7272$$
$$E_A(1.7272) = \left|1.7183 - 1.7272\right| = 0.0089$$

ب) فرمول سیمپسون: (Simpson Formula): چنانچه در تقریب $\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx$ از یک درونیاب درجه 2 جهت تقریب تابع زیر انتگرال استفاده شود، داریم:

$$f(x) \simeq P(r) = f_i + r\Delta f_i + \frac{r(r-1)}{2!}\Delta^2 f_i$$

(توجه شود که همانند روش ذوزنقه‌ای، در اینجا نیز، فرض ساده کننده متساوی‌الفاصله بودن نقاط رعایت شده است)

$$x = x_i + rh \Rightarrow \begin{cases} x = x_i \rightarrow x_i = x_i + rh \rightarrow 0 = rh \rightarrow r = 0 \\ x = x_{i+2} \rightarrow x_{i+2} = x_i + rh \rightarrow x_{i+2} - x_i = rh \rightarrow 2h = rh \rightarrow r = 2 \\ dx = d(x_i + rh) = d(x_i) + d(rh) = 0 + hdr = hdr \end{cases}$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx \simeq \int_0^2 (f_i + r\Delta f_i + \frac{r(r-1)}{2!}\Delta^2 f_i)hdr = \cdots = \frac{h}{3}(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2})$$

فرمول سیمپسون ساده

تذکر: چنانچه فرمول سیمپسون ساده به کل بازه $[a,b]$ تعمیم داده شود، نسخه‌ی مرکب (Composite) این فرمول به شکل زیر به دست خواهد آمد:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_{a=x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n=b} f(x)dx \\ &\simeq \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + \frac{h}{3}(f_2 + 4f_3 + f_4) + \cdots + \frac{h}{3}(f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) \\ &= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)\end{aligned}$$

همانگونه که مشخص است، منطق فرمول سیمپسون ساده که همان استفاده از سه محاسبه تابع زیر انتگرال در هر زیر بازه انتگرال‌گیری است، در فرمول سیمپسون مرکب رعایت شده است.

مثال) مطلوبست تعیین تقریبی از $\int_0^1 e^x dx$ ، اینبار به کمک روش سیمپسون به نحوی که از 5 محاسبه تابع زیر انتگرال بهره گرفته شود. جواب را با جواب تحلیلی مقایسه و خطای مطلق تقریب را بیابید.

حل: جواب تحلیلی عبارتست از: $\int_0^1 e^x dx = e^x \Big|_{x=0}^{1} = e^1 - e^0 \simeq 1.71828$. اکنون داریم:

$$h = 0.25 \Rightarrow \underbrace{0,\ 0.25,\ 0.5,\ 0.75,\ 1}_{\text{Five Points}}$$

و لذا:

$$\int_0^1 e^x dx = \int_0^{0.5} e^x dx + \int_{0.5}^1 e^x dx \simeq \frac{0.25}{3}\left(e^0 + 4e^{0.25} + 2e^{0.5} + 4e^{0.75} + e^1\right) \simeq 1.71825$$

$$E_A(1.71825) = \left|1.71828 - 1.71825\right| = 0.00003 = 3 \times 10^{-5}$$

که در مقایسه با روش ذوزنقه مرکب، روش سیمپسون مرکب نتیجه بهتری را به دست آورده است.

قضیه (خطای برشی روش‌های ذوزنقه و سیمپسون):

$$\begin{cases} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) - \frac{h^3}{12}f''(\theta_i) \\ \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)h^2}{12}f''(c) \end{cases}$$

که در آن θ_i و c به ترتیب نقاطی نامشخص در بازه‌های (x_i, x_{i+1}) و (a,b) می‌باشند. همچنین:

$$\begin{cases} \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2}) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\tau_i) \\ \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)h^4}{180}f^{(4)}(d) \end{cases}$$

که در آن τ_i و d به ترتیب نقاطی نامشخص در بازه‌های (x_i, x_{i+2}) و (a,b) می‌باشند.

تحلیل خطای برشی در روش‌های ذوزنقه و سیمپسون:

الف) همانگونه که مشخص است خطای برشی فرمول ذوزنقه‌ای مرکب $O(h^2)$ است، این در حالی است که در روش سیمپسون این خطا متناسب با $O(h^4)$ است.

ب) خطای برشی روش ذوزنقه‌ای وابسته به f'' است و این یعنی این فرمول (چه در حالت ساده و چه در حالت مرکب) برای محاسبه انتگرال توابع چندجمله‌ای حداکثر از درجه یک دقیق است. این در حالی است که در فرمول سیمپسون مرکب این وابستگی به $f^{(4)}$ است و لذا فرمول سیمپسون (چه در حالت ساده و چه در حالت مرکب) برای محاسبه انتگرال توابع چندجمله‌ای حداکثر از درجه سه دقیق است.

مثال) مطلوبست محاسبه تقریبی از $\int_0^1 (x^3-1)dx$ با روش سیمپسون و $h=\frac{1}{2}$. نتیجه را با جواب تحلیلی مقایسه و بگویید چرا جواب‌ها اینگونه به دست آمده‌اند.

حل: چون $h=\frac{1}{2}$ تعیین شده، لذا منظور استفاده از سیمپسون ساده است و داریم:

$$\int_0^1 \underbrace{(x^3-1)}_{f(x)}dx \simeq \frac{0.5}{3}(f(0)+4f(0.5)+f(1)) = -\frac{3}{4}$$

از طرفی، $\int_0^1 (x^3-1)dx = \left(\frac{x^4}{4}-x\right)\Big|_0^1 = -\frac{3}{4}$. یعنی جواب‌های تحلیلی و عددی بر هم منطبق می‌باشند که البته با توجه به وابستگی جمله خطای روش سیمپسون به $f^{(4)}$، انتظار چنین نتیجه‌ای را داشتیم.

II. <u>ایده به کارگیری کوادراتورهای انتگرال‌گیری:</u> یک کوادراتور انتگرال‌گیری که گاهی اوقات کوادراچر (Quadrature) انتگرال‌گیری نیز نامیده می‌شود، ابزاری به صورت، $\sum_{i=1}^{n} w_i f(\alpha_i) = w_1 f(\alpha_1) + \cdots + w_n f(\alpha_n)$ است که از آن برای محاسبه تقریبی $\int_a^b f(x)dx$ می‌توان بهره برد. یعنی در واقع داریم:

$$\int_a^b f(x)dx = w_1 f(\alpha_1) + \cdots + w_n f(\alpha_n) + E = \sum_{i=1}^{n} w_i f(\alpha_i) + E$$

که در آن منظور از E ، همان خطای برشی کوادراتور است.

آنچه که در رابطه فوق می‌تواند مجهول باشد:

یا فقط ضرایب $\{w_i\}_{i=1}^{n}$ ، معروف به ضرایب کوادراتور است

یا هم ضرایب $\{w_i\}_{i=1}^{n}$ ، و هم نقاط $\{\alpha_i\}_{i=1}^{n}$ معروف به نقاط کوادراتور است

تذکر: بسته به این که کدامیک از 2 مورد ذکر شده را به عنوان مجهولات مساله انتگرال‌گیری محسوب نماییم، دو خانواده از فرمول‌های انتگرال‌گیری به کمک این ایده، شکل خواهد گرفت:

الف) خانواده فرمول‌های نیوتن-کاتس (Newton-Cotes Formula): چنانچه در رابطه انتگرال‌گیری

$$\int_a^b f(x)dx = w_1 f(\alpha_1) + \cdots + w_n f(\alpha_n) + E = \sum_{i=1}^{n} w_i f(\alpha_i) + E$$

فقط ضرایب $\{w_i\}_{i=1}^n$ مجهول و نقاط $\{\alpha_i\}_{i=1}^n$ معلوم و برای سادگی حتی متساوی‌الفاصله و به صورت

$$\cdots, -2h, -h, 0, h, 2h, \cdots$$

فرض شوند، در اینصورت در رابطه فوق فقط n ضریب مجهول $\{w_i\}_{i=1}^n$ را خواهیم داشت که طبیعتا برای پیدا کردنشان به n معادله نیاز است. این n معادله طوری ساخته می‌شوند که رابطه کوادراتوری فوق برای محاسبه انتگرال توابع چندجمله‌ای:

$$\left\{1, x, x^2, \ldots x^{n-1}\right\}$$

دقیق (یعنی با خطای برشی $E = 0$) باشد. به عبارت دیگر برای ساخت این n معادله فرض می‌شود که رابطه کوادراتوری فوق برای محاسبه انتگرال توابع چندجمله‌ای حداکثر از درجه $(n-1)$ دقیق باشد.

مثال) کوادراتور سه نقطه‌ای نیوتن-کاتس مبتنی بر استفاده از نقاط 0، h و $2h$ را یافته و به کمک آن $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ را یکبار با $h=\frac{1}{2}$ و بار دیگر با $h=\frac{1}{4}$ تقریب بزنید.

حل: هدف یافتن ضرایب w_3, w_2, w_1 در رابطه زیر است:

$$\int_0^{2h} f(x)dx = w_1 f(0) + w_2 f(h) + w_3 f(2h) + E$$

چون 3 مجهول داریم لذا به 3 معادله نیاز داریم. این 3 معادله را طوری می‌سازیم که رابطه فوق برای محاسبه انتگرال توابع $f(x)=1$ ، $f(x)=x$ و $f(x)=x^2$ دقیق باشد. لذا در محاسبه انتگرال توابع مذکور $E=0$ قرار می‌دهیم و داریم:

$$f(x)=1 \Rightarrow \int_0^{2h} 1dx = x\Big|_0^{2h} = 2h = (w_1\times 1)+(w_2\times 1)+(w_3\times 1) \Rightarrow w_1+w_2+w_3 = 2h$$

$$f(x)=x \Rightarrow \int_0^{2h} xdx = \frac{x^2}{2}\Big|_0^{2h} = 2h^2 = (w_1\times 0)+(w_2\times h)+(w_3\times 2h) \Rightarrow w_2+2w_3 = 2h$$

$$f(x)=x^2 \Rightarrow \int_0^{2h} x^2dx = \frac{x^3}{3}\Big|_0^{2h} = \frac{8h^3}{3} = (w_1\times 0)+(w_2\times h^2)+(w_3\times 4h^2) \Rightarrow w_2+4w_3 = \frac{8h}{3}$$

و لذا:

$$\begin{cases} w_1 + w_2 + w_3 = 2h \\ \qquad w_2 + 2w_3 = 2h \\ \qquad w_2 + 4w_3 = \dfrac{8h}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} w_1 = \dfrac{h}{3} \\ w_2 = \dfrac{4h}{3} \\ w_3 = \dfrac{h}{3} \end{cases}$$

و در نهایت کوادراتور سه نقطه‌ای نیوتن-کاتس به صورت زیر استخراج می‌گردد:

$$\int_0^{2h} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}\Big(f(0) + 4f(h) + f(2h)\Big)$$

و این همان منطق فرمول سیمپسون خواهد بود!

اکنون برای حل تقریبی $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ به کمک فرمول استخراج شده داریم:

$$h = \frac{1}{2} \Rightarrow \int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.5}{3}\Big(e^0 + 4e^{-0.5^2} + e^{-1}\Big) \simeq 0.7472$$

$$h = \frac{1}{4} \Rightarrow \int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.25}{3}\Big(e^0 + 4e^{-0.25^2} + 2e^{-0.5^2} + 4e^{-0.75^2} + e^{-1}\Big) \simeq 0.7469$$

تذکر: بسته به این که فرمول‌های نیوتن-کاتس از نقاط ابتدایی یا انتهایی بازه انتگرال‌گیری استفاده بکنند یا استفاده نکنند، آن‌ها را به 2 دسته زیر تقسیم می‌کنند:

- فرمول‌های نیوتن-کاتس بسته (Closed): که از نقاط ابتدایی و انتهایی استفاده می‌کنند
- فرمول‌های نیوتن-کاتس باز (Open): که از نقطه ابتدایی یا انتهایی یا هر دو استفاده نمی‌کنند

انگیزه پیدایش فرمول‌های نیوتن-کاتس باز

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\,dx, \quad \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}, \quad \cdots$$

مثال) کوادراتور تک نقطه‌ای نیوتن-کاتس باز مبتنی بر استفاده از نقطه میانی بازه انتگرال‌گیری را برای محاسبه تقریبی $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ استخراج کرده و سپس فرمول به دست آمده را به کل بازه $[a,b]$ تعمیم دهید.

حل: هدف یافتن ضریب w_1 در رابطه زیر است: (نقاط برای سادگی متساوی‌الفاصله فرض می‌شوند)

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = w_1 f(x_i + \frac{h}{2}) + E$$

چون یک مجهول w_1 داریم، لذا به یک معادله نیازمندیم و لذا خواهیم داشت:

$$f(x) = 1 \Rightarrow \int_{x_i}^{x_{i+1}} 1dx = h = w_1 \times 1 \Rightarrow w_1 = h$$

بنابراین در نهایت داریم:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq hf(x_i + \frac{h}{2})$$

گاهی اوقات به فرمول به دست آمده فوق، **فرمول نقطه میانی** نیز اطلاق می‌گردد که در واقع نوعی فرمول نیوتن-کاتس باز می‌باشد. با تعمیم فرمول فوق به کل بازه $[a,b]$ داریم:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x)dx \\ &\simeq hf(x_0 + \frac{h}{2}) + hf(x_1 + \frac{h}{2}) + \cdots + hf(x_{n-1} + \frac{h}{2}) \\ &= h\left(f(x_0 + \frac{h}{2}) + f(x_1 + \frac{h}{2}) + \cdots + f(x_{n-1} + \frac{h}{2})\right)\end{aligned}$$

تمرین) برای محاسبه $\int_{-h}^{h} f(x)dx$ یک فرمول نیوتن-کاتس سه نقطه‌ای باز بر مبنای به کارگیری نقاط $-\frac{h}{2}$ ، 0 و $\frac{h}{2}$ استخراج کرده و سپس به کمک آن تقریبی از $\int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ را با $h=1$ بیابید.

ب) خانواده فرمول‌های گاوسی (Gaussian Formula): به دلایلی که راجع به آن توضیح خواهیم داد، در مورد خانواده فرمول‌های گاوسی فرض می‌شود که بازه $[a,b]$ بازه $[-1,+1]$ باشد. لذا رابطه انتگرال‌گیری با کوادراتور به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx = w_1 f(\alpha_1) + \cdots + w_n f(\alpha_n) + E = \sum_{i=1}^{n} w_i f(\alpha_i) + E$$

این بار در رابطه فوق، هم ضرایب $\{w_i\}_{i=1}^{n}$ و هم نقاط $\{\alpha_i\}_{i=1}^{n}$ مجهول فرض می‌شوند. لذا $2n$ مجهول خواهیم داشت که برای پیدا کردنشان به $2n$ معادله نیاز است. مشابه با همان روندی که در فرمول‌های نیوتن-کاتس داشتیم، در اینجا نیز فرض می‌کنیم که رابطه کوادراتوری فوق برای محاسبه توابع چندجمله‌ای

$$\{1, x, x^2, \cdots x^{2n-1}\}$$

دقیق (یعنی با خطای برشی $E=0$) باشد. واضح است که یک کوادراتور n -نقطه‌ای گاوسی نسبت به یک کوادراتور n -نقطه‌ای نیوتن-کاتس از دقت بالاتری برخوردار خواهد بود!

تذکر: لازم به ذکر است که در پیدا کردن فرمول‌های گاوسی بازه انتگرال‌گیری را بازه $[-1,+1]$ اختیار می‌کنیم.
طبیعی است که می‌توان بعد از پیدا شدن فرمول گاوسی روی بازه $[-1,+1]$، به کمک تغییر متغیر زیر، از آن در محاسبه هر انتگرالی نظیر $\int_a^b f(x)dx$ استفاده نمود:

$$\begin{cases} x = \frac{1}{2}\big((b-a)t + (b+a)\big) \\ dx = \frac{1}{2}(b-a)dt \end{cases} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^{+1} f\left(\frac{(b-a)t+(b+a)}{2}\right)\frac{1}{2}(b-a)dt$$

و در ادامه از کوادراتور گاوسی مربوطه در تقریب انتگرال سمت راست استفاده نمود.

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

مثال) کوادراتور گاوسی تک نقطه‌ای را بیابید.

حل: هدف پیدا کردن w و α در رابطه زیر است:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx = wf(\alpha) + E$$

چون 2 مجهول داریم، پس به 2 معادله نیز نیاز است و داریم:

$$f(x) = 1 \Rightarrow \int_{-1}^{+1} 1dx = x\Big|_{x=-1}^{+1} = 2 = w \times 1 \rightarrow w = 2$$

$$f(x) = x \Rightarrow \int_{-1}^{+1} xdx = \frac{x^2}{2}\Big|_{x=-1}^{+1} = 0 = w \times \alpha \rightarrow 2\alpha = 0 \rightarrow \alpha = 0$$

بنابراین فرمول تک نقطه‌ای گاوسی عبارتست از:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \simeq 2f(0)$$

فرمول نقطه میانی

مثال) فرمول دو نقطه‌ای گاوسی را یافته و به کمک آن تقریبی از $\int_1^2 \frac{\sin(x)}{x}dx$ را بیابید.

حل: در واقع هدف پیدا کردن $w_1, w_2, \alpha_1, \alpha_2$ در رابطه زیر است:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx = w_1 f(\alpha_1) + w_2 f(\alpha_2) + E$$

لذا به 4 معادله نیاز داریم:

$$f(x) = 1 \Rightarrow \int_{-1}^{+1} 1dx = 2 = (w_1 \times 1) + (w_2 \times 1) \to w_1 + w_2 = 2$$
$$f(x) = x \Rightarrow \int_{-1}^{+1} xdx = 0 = (w_1 \times \alpha_1) + (w_2 \times \alpha_2) \to w_1\alpha_1 + w_2\alpha_2 = 0$$
$$f(x) = x^2 \Rightarrow \int_{-1}^{+1} x^2dx = \frac{2}{3} = (w_1 \times \alpha_1^2) + (w_2 \times \alpha_2^2) \to w_1\alpha_1^2 + w_2\alpha_2^2 = \frac{2}{3}$$
$$f(x) = x^3 \Rightarrow \int_{-1}^{+1} x^3dx = 0 = (w_1 \times \alpha_1^3) + (w_2 \times \alpha_2^3) \to w_1\alpha_1^3 + w_2\alpha_2^3 = 0$$

همانگونه که مشخص است، برخلاف فرمول‌های نیوتن-کاتس، این بار دستگاه حاصل یک دستگاه از معادلات <u>غیرخطی</u> و به صورت زیر است:

$$\begin{cases} w_1 + w_2 = 2 \\ w_1\alpha_1 + w_2\alpha_2 = 0 \\ w_1\alpha_1^2 + w_2\alpha_2^2 = \dfrac{2}{3} \\ w_1\alpha_1^3 + w_2\alpha_2^3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} w_1 = w_2 = 1 \\ \alpha_1 = -\alpha_2 = \dfrac{\sqrt{3}}{3} \end{cases}$$

پس فرمول گاوس دونقطه‌ای به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \simeq f(\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(-\frac{\sqrt{3}}{3})$$

اکنون برای حل انتگرال $\int_1^2 \frac{\sin(x)}{x}dx$ به کمک فرمول دو نقطه‌ای گاوسی و با تغییر متغیر
$$\begin{cases} x = \frac{1}{2}(t+3) \\ dx = \frac{1}{2}dt \end{cases}$$

داریم:

$$\int_1^2 \frac{\sin(x)}{x}dx = \int_{-1}^{+1} \frac{\sin(\frac{t+3}{2})}{\frac{t+3}{2}} \frac{1}{2}dt = \int_{-1}^{+1} \frac{\sin(\frac{t+3}{2})}{t+3}dt \simeq \frac{\sin\left(\frac{\frac{\sqrt{3}}{3}+3}{2}\right)}{\frac{\sqrt{3}}{3}+3} + \frac{\sin\left(\frac{-\frac{\sqrt{3}}{3}+3}{2}\right)}{-\frac{\sqrt{3}}{3}+3} \simeq 0.6593$$

تمرین) بدون استفاده مستقیم از فرمول گاوس دو نقطه‌ای، می‌توانید حدس بزنید که چنانچه $\int_{-1}^{+1}(x^3+2x-1)dx$ را به کمک این فرمول تقریب بزنیم، چه خواهد شد؟ به همین سوال، هنگامی که از روش سیمپسون ساده استفاده نماییم، جواب دهید. بین این 2 فرمول کدامیک را برای حل انتگرال فوق ترجیح می‌دهید؟ چرا؟

تمرین) مجهولات a ، b و m را چنان بیابید که رابطه انتگرال‌گیری زیر دارای بیشترین دقت باشد:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \simeq \frac{1}{2}f(a) + mf(b)$$

تمرین) مجهولات a ، b و x_1 را طوری بیابید که رابطه انتگرال‌گیری زیر دارای بیشترین دقت باشد:

$$\int_0^1 f(x)dx \simeq af(x_1) + bx_1f'(x_1) + 0.5x_1^2f''(x_1)$$

فصل چهارم: بخش دوم:مشتق‌گیری عددی
(Numerical Differentiation)

از مشتق‌گیری به صورت عددی معمولا زمانی استفاده می‌شود که از تابع $y=f(x)$ تنها مقادیری گسسته همانند جدول

x	x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
f	f_0	f_1	f_2	$\dots$	f_n

در دسترس باشد و بخواهیم تقریبی از $f_i' = f'(x_i)$ ، $f_i'' = f''(x_i)$ و ... را به دست آوریم. یکی دیگر از کاربردهای مشتق‌گیری عددی، در گسسته‌کردن معادلات دیفرانسیلی در روشی معروف به نام روش تفاضلات متناهی (Finite Difference Method) می‌باشد. لازم به ذکر است که مشتق‌گیری عددی یا تقریبی را می‌توان هم به کمک ایده استفاده از تابع درونیاب چندجمله‌ای به جای تابع f و سپس مشتق‌گیری از تابع درونیاب انجام داد که نشان داده می‌شود که این ایده مشکل پایداری محاسباتی دارد!

و هم می‌توان آن را به کمک ایده به کارگیری بسط تیلور تابع انجام داد. ما قصد داریم در این بخش از ایده دوم استفاده کرده و فرمول‌هایی عددی جهت تقریب $f_i' = f'(x_i)$ ، $f_i'' = f''(x_i)$ و ... ارائه نماییم.

یادآوری از بسط تیلور یک تابع

تعریف ۱ سری تیلور یک تابع

اگر f تابعی حقیقی باشد که در نقطه $x = \alpha$ بی‌نهایت بار مشتق‌پذیر باشد، آن‌گاه بسط تیلور تابع f حول نقطه $x = \alpha$ عبارت است از

(۱)
$$f(\alpha) + \frac{(x-\alpha)}{1!}f'(\alpha) + \frac{(x-\alpha)^2}{2!}f''(\alpha) + \cdots + \frac{(x-\alpha)^n}{n!}f^{(n)}(\alpha) + \cdots$$

قضیه ۴ قضیه تیلور با باقی‌مانده لاگرانژ [؟]

فرض کنید $f \in \mathcal{C}^n[a,b]$ و $f^{(n+1)}$ برروی $[a,b]$ موجود باشد. اگر $\alpha \in (a,b)$، آن‌گاه به ازای هر $x \in (a,b)$ داریم

$$f(x) = \mathcal{T}_{\alpha,n}(x) + \mathcal{R}_n(x)$$

به طوری که $\mathcal{T}_{\alpha,n}$ همان بسط تیلور مرتبه n حول $x = \alpha$ است و $\mathcal{R}_n(x)$ به صورت زیر مشخص می‌شود

$$\mathcal{R}_n(x) := \frac{(x-\alpha)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\eta) \qquad (۳)$$

به طوری که η نقطه‌ای مابین x و α می‌باشد.

در قضیه فوق، $\mathcal{R}_n(x)$ به جمله باقی‌مانده لاگرانژ (Lagrange reminder term) یا خطای برشی (Truncation error) موسوم می‌باشد.

الف) فرمول تفاضلی پیشرو جهت تقریب $f_i' = f'(x_i)$: فرض کنیم تابع $y = f(x)$ روی بازه دلخواهی همچون I دارای مشتق دوم پیوسته و x_i و x_{i+1} نقاطی دلخواه از این بازه باشند (برای سهولت فرض می‌کنیم که نقاط x_i و x_{i+1} نقاطی متساوی‌الفاصله باشند). لذا داریم:

$$\begin{aligned} f_{i+1} = f(x_{i+1}) = f(x_i + h) &= f(x_i) + \frac{(x_i + h - x_i)^1}{1!} f'(x_i) + \frac{(x_i + h - x_i)^2}{2!} f''(\tau_i) \\ &= f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!} f''(\tau_i) \end{aligned}$$

که در آن، τ_i نقطه‌ای بین نقاط x_i و x_{i+1} بوده و البته جای دقیق آن نیز مشخص نمی‌باشد. اکنون با توجه به فرمول فوق داریم:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!} f''(\tau_i) \Rightarrow f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{h}{2} f''(\tau_i)$$

یا به صورت تقریبی:

$$f_i' \simeq \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

فرمول تفاضلی پیشرو جهت تقریب $f_i' = f'(x_i)$

مشاهده می‌شود که خطای برشی فرمول پیشرو که همان $-\frac{h}{2}f''(\tau_i)$ است، هم تابعی بر حسب h است (یعنی $O(h)$ است) و هم به f'' بستگی دارد. این وابستگی به f'' بدین معنا است که فرمول تفاضل پیشرو برای محاسبه مشتق توابع چندجمله‌ای حداکثر از درجه یک دقیق (بدون خطا) عمل می‌نماید.

مثال) مشتق تابع $f(x) = 3x - 5$ را در نقطه $x_0 = 2$ با یک فرمول تفاضل پیشرو تقریب زده و سپس جواب تحلیلی را نیز بیابید. چرا جواب‌ها اینگونه به دست آمده‌اند؟

$$f'(2) \simeq \frac{f(2+h) - f(2)}{h} = \frac{[3(2+h) - 5] - [3 \times 2 - 5]}{h} = 3$$

و می‌دانیم که جواب تحلیلی نیز برابر با $f'(2) = 3\Big|_{x_0=2} = 3$ است که مشاهده می‌گردد هر دو جواب عددی و تحلیلی درست مانند هم هستند!!دلیل، به سادگی با توجه به وابستگی جمله خطای برشی فرمول پیشرو به f'' قابل توجیه می‌باشد.

تذکر: با توجه به جمله خطای برشی فرمول پیشرو یعنی $-\frac{h}{2}f''(\tau_i)$ ، اینگونه به نظر می‌رسد که برای دستیابی به دقت‌های بالاتر در محاسبه f_i' ، باید مقدار h را کوچک نمود. در ادامه و با ذکر یک مثال نشان می‌دهیم که لزوما با کوچکتر شدن h ، دقت روش پیشرو افزایش نمی‌یابد!!

مثال) به‌کمک فرمول تفاضل پیشرو و به ازای $h = 10^{-1},\ 10^{-2},\ 10^{-3},\ 10^{-4}$ ، تقریبی از مشتق تابع $f(x) = e^{x}$ را در نقطه $x_0 = 1$ و در حساب ممیز شناور نرمال در یک ماشین با تعداد مانتیس $m = 5$ یافته و جواب‌های به دست آمده را با جواب تحلیلی مقایسه نمایید.

حل: جواب تحلیلی عبارتست از: $f'(1) = e^{x}\Big|_{x_0=1} = e^{1} \simeq 2.7183 = 0.27183\times 10^{1}$. اکنون داریم:

h	$f'(1) \simeq \dfrac{e^{1+h} - e^{1}}{h}$
10^{-1}	$\dfrac{3.0042 - 2.7183}{0.1} = 2.8590 = 0.28590\times 10^{1}$
10^{-2}	$\dfrac{2.7456 - 2.7183}{0.01} = 2.7300 = 0.27300\times 10^{1}$
10^{-3}	$\dfrac{2.7210 - 2.7183}{0.001} = 2.7000 = 0.27000\times 10^{1}$
10^{-4}	$\dfrac{2.7186 - 2.7183}{0.0001} = 3.0000 = 0.30000\times 10^{1}$!!!

مشاهده می‌گردد که برخلاف آنچه که انتظارش را داشتیم، جواب به ازای $h = 10^{-4}$ به جای بهتر شدن، بدتر می‌گردد!!

با بررسی فرمول تفاضلی پیشرو که به صورت $f_i' \simeq \dfrac{f_{i+1}-f_i}{h}$ است، دلیل چنین رخدادی مشخص می‌گردد. واضح است که با کوچکتر شدن h از جایی به بعد، مقدار f_i و f_{i+1} در صورت کسر فوق به هم بسیار نزدیک شده و چون بین آن‌ها تفریق وجود دارد، وقوع خطای کنسلیشن حتمی است و لذا این خطا که جزو منبع خطای انتشار به حساب می‌آید، مانع از افزایش دقت فرمول پیشرو خواهد شد! لذا در فرمول‌های پیش رو، نباید طول گام h را برای رسیدن به دقت بالاتر، بیش از اندازه کوچک نماییم.

راه حل رفع مشکل: برای رفع مشکل، توصیه می‌شود که فرمول یا فرمول‌های جدیدی بیابیم که در آن‌ها مرتبه خطای برشی بهبود بیابد. این بدان معناست که فرمولی پیدا نماییم که در آن مرتبه خطای برشی به جای $O(h)$، $O(h^2)$, $O(h^3)$ و ... باشد که در آن‌ها دیگر مجبور به کوچک کردن بیش از اندازه h نباشیم.

ب) فرمول تفاضلی پسرو جهت تقریب $f'_i = f'(x_i)$: فرض‌کنیم تابع $y = f(x)$ روی بازه دلخواه I دارای مشتق دوم پیوسته و x_{i-1} و x_i نقاطی دلخواه از این بازه باشند. لذا داریم:

$$\begin{aligned} f_{i-1} = f(x_{i-1}) = f(x_i - h) &= f(x_i) + \frac{(x_i - h - x_i)^1}{1!} f'(x_i) + \frac{(x_i - h - x_i)^2}{2!} f''(\theta_i) \\ &= f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2!} f''(\theta_i) \end{aligned}$$

که در آن، θ_i نقطه‌ای بین x_i و x_{i-1} بوده و البته جای دقیق آن نیز مشخص نمی‌باشد. اکنون با توجه به فرمول فوق داریم:

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2!} f''(\theta_i) \Rightarrow f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \frac{h}{2} f''(\theta_i)$$

یا به صورت تقریبی:

$$f'_i \simeq \frac{f_i - f_{i-1}}{h}$$

مشاهده می‌شود که خطای برشی فرمول پیشرو که همان $\frac{h}{2} f''(\theta_i)$ است، هم تابعی بر حسب h است (یعنی $O(h)$ است) و هم به f'' بستگی دارد و لذا به لحاظ دقت برتری نسبت به فرمول پیشرو ندارد!

ج) فرمول تفاضل مرکزی جهت تقریب $f_i' = f'(x_i)$: این بار فرض کنیم که تابع $y = f(x)$ روی بازه دلخواه I دارای مشتق سوم پیوسته و نقاط x_{i-1} و x_{i+1} نقاطی از بازه مذکور باشند. لذا:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!}f_i'' + \frac{h^3}{3!}f'''(\tau_i)$$
$$f_{i-1} = f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2!}f_i'' - \frac{h^3}{3!}f'''(\theta_i)$$
$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i' + \frac{h^3}{3!}\left(f'''(\tau_i) + f'''(\theta_i)\right) \qquad (*)$$

که در آن τ_i و θ_i نقاطی بین x_{i-1} و x_{i+1} هستند. اکنون با توجه به این که f''' طبق فرض پیوسته است، لذا طبق قضیه‌ای در ریاضی عمومی، مقادیر ماکزیمم و مینیمم خود را روی بازه بسته $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ اختیار می‌کند و لذا داریم:

$$\min\ f''' = m \le f'''(\tau_i) \le M = \max\ f'''$$
$$\min\ f''' = m \le f'''(\theta_i) \le M = \max\ f'''$$
$$m \le \frac{f'''(\tau_i) + f'''(\theta_i)}{2} \le M$$

و در اینجا با کمک گرفتن از قضیه مقدار میانی از ریاضی عمومی، می‌توان به سادگی نشان داد که وجود خواهد داشت یک $\eta_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$ به نحوی که:

$$f'''(\eta_i) = \frac{f'''(\tau_i)+f'''(\theta_i)}{2} \Rightarrow f'''(\tau_i) + f'''(\theta_i) = 2f'''(\eta_i)$$

و با جایگذاری در رابطه (*) داریم:

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i' + \frac{h^3}{3!} \times 2f'''(\eta_i) \Rightarrow f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\eta_i)$$

یا به صورت تقریبی:

$$f_i' \simeq \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$

مشاهده می‌گردد که فرمول تفاضل مرکزی دارای خطایی برشی به اندازه $O(h^2)$ است و همچنین، در جمله خطای این فرمول f''' به چشم می‌خورد. لذا این فرمول عددی برای محاسبه مشتق توابع چندجمله‌ای حداکثر از درجه 2 دقیق خواهد بود. بنابراین فرمول مرکزی نسبت به دو فرمول قبلی، دقت بالاتری در محاسبه f_i' خواهد داشت.

سوال مهم) چرا در نوشتن بسط تیلور مربوط به f_{i+1} و f_{i-1} خطا را روی جمله حاوی f''' قرار دادیم و نه روی f'' ؟

برای پاسخ به این سوال بیاییم و جملات خطای بسط‌های فوق را روی جمله حاوی f'' قرار دهیم:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!} f''(\tau_i)$$
$$f_{i-1} = f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2!} f''(\theta_i)$$
$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i' + \frac{h^2}{2!}(f''(\tau_i) - f''(\theta_i))$$

چنانچه می‌دانیم τ_i و θ_i نقاطی بین x_{i-1} و x_{i+1} هستند. اکنون سوال اینجاست که چنانچه $\tau_i = \theta_i$ گردد، در رابطه بالا چه اتفاقی می‌افتد؟!

واضح است که در چنین حالتی خطای برشی برابر صفر خواهد گردید و این صفر شدن مستقل از تابع f خواهد بود. یعنی به عبارت دیگر، ما به فرمولی دست پیدا کرده‌ایم که به ازای هر تابع دلخواه f خطای برشی آن صفر است، یعنی یک فرمول همیشه دقیق!! و می‌دانیم که چنین چیزی ممکن نمی‌باشد.

به همین دلیل و برای رخ ندادن چنین اتفاقی، ما در فرمول تفاضل مرکزی و در نوشتن بسط تیلور توابع f_{i+1} و f_{i-1} خطا را روی جمله حاوی f''' قرار دادیم تا از وقوع چنین رخدادی جلوگیری نماییم. در حقیقت یکی از سختیهای پیدا کردن فرمول‌های عددی برای مشتق‌گیری نیز در اینجاست که بسط‌های تیلور تا چه جمله‌ای نوشته شوند تا از بروز چنین مشکلی جلوگیری گردد!

تمرین) یک فرمول تفاضل پیشرو 3 نقطه‌ای جهت تقریب f_i' در بازه $[x_i, x_{i+2}]$ ارائه داده و خطای برشی آن را بیابید. سپس فرمول فوق را با فرمول تفاضل مرکزی مقایسه کرده و با استدلال بگویید که کدامیک را ترجیح می‌دهید.

تمرین) برای پیدا کردن تقریبی از $f'(1.3)$ در جدول زیر، ابتدا فرمولی از مرتبه دقت $O(h^2)$ استخراج کرده و سپس به کمک آن $f'(1.3)$ را تقریب بزنید.

x	1.3	1.5	1.7
f	1.1911	1.3104	1.4244

تذکر: تمامی مطالبی که راجع به استخراج فرمول‌هایی عددی جهت تقریب f_i' گفته شد، به طور مشابه برای استخراج فرمول‌هایی جهت تقریب f_i'' ، f_i''' و ... قابل تعمیم خواهد بود.

تمرین) یک فرمول تفاضل مرکزی جهت تقریب $f_i'' = f''(x_i)$ در بازه $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ استخراج کرده و سپس به کمک آن $f''(1)$ را در $f(x) = x^3 - 2x + 1$ تقریب بزنید. سپس جواب تحلیلی را نیز برای $f''(1)$ پیدا کرده و بگویید چرا جواب‌های عددی و تحلیلی اینگونه به دست آمده‌اند.