فصل ۵

مشتق‌گیری و انتگرال‌گیری عددی

در این فصل قصد داریم روش‌های عددی مشتق‌گیری و انتگرال‌گیری را بررسی کنیم. در مشتق‌گیری عددی می‌خواهیم تقریبی از $f'(x)$ را به دست آوریم به طوری که x یک نقطه داده‌شده و معلوم است. در انتگرال‌گیری عددی سعی بر آن داریم که مقدار عددی $\int_a^b f(x)dx$ را تقریب بزنیم.

۱.۵ مشتق‌گیری عددی

در این بخش یا با یک تابع مواجه هستیم که ترجیح می‌دهیم به طور مستقیم از ضابطه آن مشتق نگیریم و یا ممکن است با جدولی از مقدارهای یک تابع مشتق‌پذیر روبرو باشیم و قصد داشته باشیم مشتق‌گیری را به صورت عددی انجام دهیم؛ به عبارتی می‌خواهیم تقریبی برای $f'(x)$ در نقطه معلوم x به دست آوریم. به همین منظور می‌توان از چندجمله‌ای درون‌یاب، بسط تیلور و روش گاوس استفاده کرد و به کمک فن برون‌یابی ریچاردسون تقریب بهتری به دست آورد.

۱.۱.۵ استفاده از چندجمله‌ای درون‌یاب

چندجمله‌ای درون‌یاب تقریب دقیقی (خوبی) از تابع در نقاط درون‌یابی به دست می‌دهد و امیدواریم مشتق چندجمله‌ای درون‌یاب نیز تقریب خوبی از مشتق تابع در نقاط درون‌یابی باشد. به شکل ۱.۵ توجه کنید.

شکل ۱.۵: بررسی مشتق چندجمله‌ای درون‌یاب

اگر $\{x_0,\dots,x_n\}$، $n+1$ نقطه متمایز در بازه I باشند و $f\in C^{n+1}(I)$، آن‌گاه بنابر قضیه خطای چندجمله‌ای درون‌یاب

$$f(x)=\sum_{k=0}^{n} f_k L_k(x)+\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi(x))$$

که در آن $\xi(x)\in I$. با مشتق‌گیری نتیجه می‌شود

$$f'(x)=\sum_{k=0}^{n} f_k L'_k(x)+\underbrace{\frac{d}{dx}\left(\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right)f^{(n+1)}(\xi(x))+\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\frac{df^{(n+1)}(\xi(x))}{dx}}_{t_n(x)}.$$

از این رابطه می‌توان برای تقریب $f'(x)$ به ازای هر $x\in I$ استفاده کرد ولی مشکل اصلی، تعیین جمله خطای برشی[1] $t_n(x)$ است زیرا از $\xi(x)$ اطلاع کافی در دسترس نیست. اما اگر x یکی از نقاط درون‌یابی مانند x_j باشد، خواهیم داشت

$$f'(x_j)=\sum_{k=0}^{n} f_k L'_k(x_j)+\frac{f^{(n+1)}(\xi(x_j))}{(n+1)!}\prod_{j\neq k=0}^{n}(x_j-x_k).$$

در ادامه به کمک این رابطه، طرح‌های دو، سه و پنج نقطه‌ای معرفی می‌شوند که در مشتق‌گیری عددی پرکاربرد هستند. با توجه به درون‌یابی در نقاط x_{i-1}، x_i و x_{i+1} می‌توان نوشت $L_{i-1}(x)=\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})}$ و بنابراین $L'_{i-1}(x)=\frac{2x-x_i-x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})}$ و به طور مشابه داریم

$$L'_i(x)=\frac{2x-x_{i-1}-x_{i+1}}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})},\qquad L'_{i+1}(x)=\frac{2x-x_{i-1}-x_i}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}.$$

در نتیجه برای $j=i-1,i,i+1$ خواهیم داشت

$$\begin{aligned}f'(x_j)=&\, f(x_{i-1})\tfrac{2x_j-x_i-x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})}+f(x_i)\tfrac{2x_j-x_{i-1}-x_{i+1}}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})}+\\ & f(x_{i+1})\tfrac{2x_j-x_{i-1}-x_i}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}+\tfrac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j)\prod_{j\neq k=i-1}^{i+1}(x_j-x_k)\end{aligned}$$

که در آن ξ_j وابسته به x_j است. اگر نقاط x_{i-1},x_i,x_{i+1} هم فاصله با اندازه گام h باشند، آن‌گاه با تغییر اندیس داریم

$$\begin{aligned}f'_i&=f'(x_i)=\tfrac{-3f_i+4f_{i+1}-f_{i+2}}{2h}+\tfrac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_1), && x_i<\xi_1<x_{i+2} && \text{(پیشرو سه نقطه‌ای)}\\ f'_i&=f'(x_i)=\tfrac{-f_{i-1}+f_{i+1}}{2h}-\tfrac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_2), && x_{i-1}<\xi_2<x_{i+1} && \text{(مرکزی سه نقطه‌ای)}\\ f'_i&=f'(x_i)=\tfrac{f_{i-2}-4f_{i-1}+3f_i}{2h}+\tfrac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_3), && x_{i-2}<\xi_3<x_i && \text{(پسرو سه نقطه‌ای)}\end{aligned}$$

در مقایسه با طرح‌های سه نقطه‌ای، فرمول‌های دو نقطه‌ای پیشرو و پسروی زیر از دقت کمتری برخوردار هستند

$$f'_i=f'(x_i)=\frac{\Delta f_i}{h}+O(h),\qquad f'_i=f'(x_i)=\frac{\nabla f_i}{h}+O(h).$$

[1] truncation error

در حالتی که نقاط هم‌فاصله باشند می‌توان از درون‌یاب‌های پیشرو (پسرو) نیوتن استفاده کرد. به عنوان مثال چندجمله‌ای درون‌یاب پیشرو نیوتن در نقاط هم‌فاصله $x_i, \dots, x_{i+k}$ عبارت است از

$$p(x) = f_i + \theta\Delta f_i + \frac{\theta(\theta-1)}{2!}\Delta^2 f_i + \cdots + \frac{\theta(\theta-1)\cdots(\theta-k+1)}{k!}\Delta^k f_i, \qquad \theta = \frac{x-x_i}{h}$$

و با توجه به این که $f(x) \simeq p(x)$ قرار می‌دهیم $f'(x) \simeq p'(x)$ و در نتیجه

$$f'(x) \simeq \frac{1}{h}\left(\Delta f_i + (\theta - \frac{1}{2})\Delta^2 f_i + (\frac{\theta^2}{2} - \theta + \frac{1}{3})\Delta^3 f_i + \cdots\right)$$

(باید توجه داشت که $\frac{dp}{dx} = \frac{dp}{d\theta}\frac{d\theta}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dp}{d\theta}$). حال اگر $x = x_i$ ($\theta = 0$)، آن‌گاه

$$f'(x_i) = f'_i \simeq \frac{1}{h}\left(\Delta f_i - \frac{1}{2}\Delta^2 f_i + \frac{1}{3}\Delta^3 f_i - \frac{1}{4}\Delta^4 f_i + \cdots\right)$$

که با انتخاب یک یا دو یا چند جمله از عبارت داخل پرانتز می‌توان رابطه‌های تقریبی متفاوتی مانند زیر به دست آورد

$$f'_i \simeq \frac{\Delta f_i}{h} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \qquad f'_i \simeq \frac{1}{h}(\Delta f_i - \frac{1}{2}\Delta^2 f_i) = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2h}, \qquad \cdots$$

تمرین ۱.۵ *با استفاده از چندجمله‌ای درون‌یاب پسرو نیوتن رابطه‌هایی به صورت پسرو برای مشتق به دست آورید.*

تذکر ۱.۵ *با انتخاب $x = x_i + \frac{h}{2}$ ($\theta = \frac{1}{2}$) رابطه زیر به دست می‌آید*

$$f'(x_i + \frac{h}{2}) = f'_{i+\frac{1}{2}} \simeq \frac{1}{h}(\Delta f_i - \frac{1}{24}\Delta^3 f_i + \cdots)$$

و از آن‌جا خواهیم داشت

$$f'_{i+\frac{1}{2}} \simeq \frac{\Delta f_i}{h}, \qquad f'_{i+\frac{1}{2}} \simeq \frac{1}{h}(\Delta f_i - \frac{1}{24}\Delta^3 f_i), \quad \cdots.$$

تمرین ۲.۵ *با استفاده از بسط تیلور $f(x_i+h)$ و $f(x_i+\frac{h}{2})$ نشان دهید $\frac{\Delta f_i}{h}$ برای تقریب $f'_{i+\frac{1}{2}}$ دقیق‌تر است تا برای تقریب f'_i، به عبارت دیگر داریم*

$$f'_i = \frac{\Delta f_i}{h} + O(h), \qquad f'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta f_i}{h} + O(h^2).$$

۲.۱.۵ استفاده از بسط تیلور

برای به دست آوردن رابطه‌های تقریبی مشتق می‌توان از بسط تیلور توابع

$$\dots, f(x-2h), f(x-h), f(x+h), f(x+2h), \dots$$

استفاده کرده و یک ترکیب خطی از آن‌ها به گونه‌ای ساخت که خطا از مرتبه $O(h^p)$ باشد.

مثال ۱.۵ *به کمک رابطه‌های*

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^۲}{۲!}f''(x) + \frac{h^۳}{۳!}f'''(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^۲}{۲!}f''(x) - \frac{h^۳}{۳!}f'''(x) + \cdots$$

طرح‌های $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + O(h)$، $f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + O(h)$ *و* $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{۲h} + O(h^۲)$ *به دست می‌آیند. هم‌چنین به کمک بسط تیلور*

$$f(x \pm ۲h) = f(x) \pm ۲hf'(x) + \frac{(۲h)^۲}{۲!}f''(x) \pm \frac{(۲h)^۳}{۳!}f'''(x) + \cdots$$

و ساختن ترکیب خطی $f(x-۲h) - ۸f(x-h) + ۸f(x+h) - f(x+۲h)$ *به رابطه*

$$f'(x) = \frac{۱}{۱۲h}(f(x-۲h) - ۸f(x-h) + ۸f(x+h) - f(x+۲h)) + \frac{h^۴}{۳۰}f^{(۵)}(\xi)$$

خواهیم رسید که یک رابطه پنج نقطه‌ای با خطای برشی $O(h^۴)$ *است و در آن* $x-۲h \leq \xi \leq x+۲h$. △

تمرین ۳.۵ *به کمک روش بسط تیلور، رابطه پنج نقطه‌ای پیشرو یعنی*

$$f'(x) = \frac{۱}{۱۲h}(-۲۵f(x) + ۴۸f(x+h) - ۳۶f(x+۲h) + ۱۶f(x+۳h) - ۳f(x+۴h)) + \frac{h^۴}{۵}f^{(۵)}(\xi)$$

را استخراج کنید که در آن $x \leq \xi \leq x+۴h$. *سپس با تبدیل* h *به* $-h$، *شکل پسروی آن را نیز به دست آورید.*

۳.۱.۵ روش گاوس

تعریف ۱.۵ *مرتبه دقت یک عبارت تقریبی* n *است اگر آن رابطه برای چندجمله‌ای‌های از درجه حداکثر* n *دقیق باشد. اگر ضریب* h^p *در یک رابطه با خطای* $O(h^p)$، $f^{(p+۱)}(\xi)$ *باشد آن‌گاه به وضوح مرتبه دقت آن روش* p *است.*

با بررسی رابطه‌های تقریبی مشتق، می‌توان همه آن‌ها را به صورت کلی زیر معرفی کرد

$$f'(x_i) = \sum_{k=n_۱}^{n_۲} w_k f(x_k) + E$$

که در آن $n_۱, n_۲ \in \mathbb{Z}$. برای ساختن یک عبارت n نقطه‌ای برای تقریب مشتق، ابتدا اگر بخواهیم به صورت پیشرو عمل کنیم، قرار می‌دهیم $n_۱ = i$ و $n_۲ = i+n-۱$ و اگر بخواهیم به صورت پسرو عمل نماییم، قرار می‌دهیم $n_۱ = i-n+۱$ و $n_۲ = i$ و اگر بخواهیم به صورت مرکزی عمل کنیم، قرار می‌دهیم $n_۱ = i - \frac{n-۱}{۲}$ و $n_۲ = i + \frac{n-۱}{۲}$. سپس ضرایب w_kها را به گونه‌ای به دست می‌آوریم که مرتبه دقت رابطه $n-۱$ باشد.

مثال ۲.۵ *طرح پنج نقطه‌ای پسرو برای تقریب مشتق مرتبه اول را با روش گاوس می‌سازیم. ابتدا قرار می‌دهیم*

$$f'(x_i) = w_{i-۴}f_{i-۴} + w_{i-۳}f_{i-۳} + w_{i-۲}f_{i-۲} + w_{i-۱}f_{i-۱} + w_i f_i + E$$

و سپس به ازای $f(x) = ۱, x, x^۲, x^۳, x^۴$ *قرار می‌دهیم* $E = ۰$ *و دستگاه معادله‌های زیر را می‌سازیم*

$$\begin{cases} ۰ = w_{i-۴} + w_{i-۳} + w_{i-۲} + w_{i-۱} + w_i \\ ۱ = w_{i-۴}x_{i-۴} + w_{i-۳}x_{i-۳} + w_{i-۲}x_{i-۲} + w_{i-۱}x_{i-۱} + w_ix_i \\ ۲x_i = w_{i-۴}x_{i-۴}^۲ + w_{i-۳}x_{i-۳}^۲ + w_{i-۲}x_{i-۲}^۲ + w_{i-۱}x_{i-۱}^۲ + w_ix_i^۲ \\ ۳x_i^۲ = w_{i-۴}x_{i-۴}^۳ + w_{i-۳}x_{i-۳}^۳ + w_{i-۲}x_{i-۲}^۳ + w_{i-۱}x_{i-۱}^۳ + w_ix_i^۳ \\ ۴x_i^۳ = w_{i-۴}x_{i-۴}^۴ + w_{i-۳}x_{i-۳}^۴ + w_{i-۲}x_{i-۲}^۴ + w_{i-۱}x_{i-۱}^۴ + w_ix_i^۴ \end{cases}$$

و از حل آن خواهیم داشت

$$w_{i-۴} = \frac{۱}{۴h},\ w_{i-۳} = \frac{-۴}{۳h},\ w_{i-۲} = \frac{۳}{h},\ w_{i-۱} = \frac{-۴}{h},\ w_i = \frac{۲۵}{۱۲h}.$$

با انتخاب $f(x) = x^5$ *می‌توان جمله خطا را به دست آورد.* $\triangle$

۴.۱.۵ فن برون‌یابی ریچاردسون

فن برون‌یابی ریچاردسون کاربرد وسیعی در بسیاری از مباحث آنالیز عددی مانند مشتق‌گیری و انتگرال‌گیری عددی دارد و در ادامه به معرفی آن می‌پردازیم. فرض کنید به ازای عدد مخالف صفر h (به عنوان مثال h اندازه گام است) رابطه $N(h)$ تقریبی برای کمیت M باشد و خطای مرتکب‌شده به صورت زیر قابل ارائه باشد

$$M = N(h) + K_۱h + K_۲h^۲ + K_۳h^۳ + \cdots \qquad (۱.۵)$$

که در آن $K_۱, K_۲, \ldots$ کمیت‌های ثابتی هستند. رابطه (۱.۵) به ازای هر h برقرار است و با تبدیل h به $\frac{h}{۲}$ در آن داریم

$$M = N(\frac{h}{۲}) + K_۱\frac{h}{۲} + K_۲\frac{h^۲}{۴} + K_۳\frac{h^۳}{۸} + \cdots \qquad (۲.۵)$$

اگر رابطه (۱.۵) را از دو برابر رابطه (۲.۵) کم کنیم، می‌توان نوشت

$$M = (۲N(\frac{h}{۲}) - N(h)) + (\frac{۱}{۲} - ۱)K_۲h^۲ + (\frac{۱}{۴} - ۱)K_۳h^۳ + (\frac{۱}{۸} - ۱)K_۴h^۴ + \cdots$$

یعنی به‌کمک تقریب کم دقت $M = N(h) + O(h)$ به تقریب دقیق‌تر $M = (۲N(\frac{h}{۲}) - N(h)) + O(h^۲)$ دست یافتیم. حال با فرض $N_۱(h) = N(h)$ و $N_۲(h) = (۲N_۱(\frac{h}{۲}) - N_۱(h))$ می‌توان نوشت

$$M = N_۲(h) - \frac{K_۲}{۲}h^۲ - \frac{۳K_۳}{۴}h^۳ - \frac{۷K_۴}{۸}h^۴ - \cdots. \qquad (۳.۵)$$

با تبدیل h به $\frac{h}{۲}$ در رابطه (۳.۵) رابطه زیر به دست می‌آید

$$M = N_۲(\frac{h}{۲}) - \frac{K_۲}{۸}h^۲ - \frac{۳K_۳}{۳۲}h^۳ - \frac{۷K_۴}{۱۲۸}h^۴ - \cdots. \qquad (۴.۵)$$

اگر رابطه (۳.۵) را از چهار برابر رابطه (۴.۵) کم کنیم، خواهیم داشت

$$M = \frac{4N_2(\frac{h}{2}) - N_2(h)}{3} + (\frac{1}{4} - \frac{1}{8})K_3h^3 + (\frac{7}{24} - \frac{7}{96})K_4h^4 + \cdots$$

و با فرض $N_3(h) = \frac{4N_2(\frac{h}{2})-N_2(h)}{3}$، از تقریب کم دقت $M = N_2(h) + O(h^2)$ تقریب دقیق‌تر $M = N_3(h) + O(h^3)$ به دست آمده و با یک روند استقرایی خواهیم داشت $M = N_j(h)+O(h^j)$ که در آن $N_j(h) = \frac{2^{j-1}N_{j-1}(\frac{h}{2})-N_{j-1}(h)}{2^{j-1}-1}$.

مثال ۳.۵ *با استفاده از بسط تیلور، رابطه سه نقطه‌ای مرکزی برای تقریب مشتق به صورت زیر به دست می‌آید*

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(x_i) - \frac{h^4}{120}f^{(5)}(x_i) - \cdots .$$

با فرض $M = f'(x_i)$ *و* $N(h) = N_1(h) = \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2h} = \frac{f(x_i+h)-f(x_i-h)}{2h}$*، از تکرار فن برون‌یابی ریچاردسون به ازای* $j = 2, 3, \ldots$ *خواهیم داشت* $f'(x_i) = N_j(h) + O(h^{2j})$ *که در آن* $N_j(h) = \frac{4^{j-1}N_{j-1}(\frac{h}{2})-N_{j-1}(h)}{4^{j-1}-1}$*. با انتخاب* $f(x) = xe^x$*،* $x_i = 2.0$ *و* $h = 0.2$ *جدول ۱.۵ به دست می‌آید. از مقایسه* $N_3(0.2)$ *با مقدار دقیق* $f'(2.0) = 3.0e^{2.0} = 22.167168$ *نتیجه می‌گیریم تمام ارقام با معنای* $N_3(0.2)$ *درست هستند.* △

N_1	N_2	N_3
$N_1(0.2) = 22.414160$		
$N_1(0.1) = 22.228786$	$N_2(0.2) = 22.166995$	
$N_1(0.05) = 22.182564$	$N_2(0.1) = 22.167157$	$N_3(0.2) = 22.167168$

جدول ۱.۵: جدول برون‌یابی ریچاردسون برای مشتق‌گیری عددی

تذکر ۲.۵ *با استفاده از طرح‌های مشتق‌گیری عددی، می‌توان رابطه‌هایی برای تقریب مشتق‌های مراتب بالاتر یک تابع نیز به دست آورد. به عنوان مثال با دوبار مشتق‌گیری از چندجمله‌ای درون‌یاب پیشرو نیوتن خواهیم داشت*

$$f''(x) \simeq \frac{1}{h^2}(\Delta^2 f_i + (\theta - 1)\Delta^3 f_i + \cdots)$$

و با انتخاب $x = x_i$ *(*$\theta = 0$*) رابطه‌های زیر نتیجه می‌شود*

$$f''(x_i) = f_i'' \simeq \frac{\Delta^2 f_i}{h^2} = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{h^2}, \qquad f_i'' \simeq \frac{1}{h^2}(\Delta^2 f_i - \Delta^3 f_i), \qquad \cdots .$$

تمرین ۴.۵ *از تابع* $y = f(x)$ *در بازه* $[0, 1]$*، داده‌های جدول زیر در دسترس است.*

x	۰	۰/۲۵	۰/۳۷۵	۰/۵	۰/۶۲۵	۰/۷۵	۱
$f(x)$	۰	۰/۱۳۵۰۶	۰/۱۶۰۶۱	۰/۱۶۸۸۷	۰/۱۶۵۵۲	۰/۱۵۴۹۰	۰/۱۲۳۸۵

مقدار تقریبی $f'(0)$*،* $f'(0.5)$ *و* $f'(1)$ *و مقدار تقریبی* $f''(0)$*،* $f''(0.5)$ *و* $f''(1)$ *را با چند روش حساب کنید. در صورت امکان، به کمک فن برونیابی ریچاردسون جواب‌های دقیق‌تری برای مقادیر قبلی به دست آورید.*

تذکر ۳.۵ *در حالت کلی رابطه‌های مشتق دارای خطایی از مرتبه $O(h^m)$ هستند که بستگی به تعداد نقاط درون‌یابی دارد. در ظاهر یا باید m بزرگ باشد که منجر به افزایش محاسبات (فراخوانی بیشتر تابع) و رشد خطای گردکردن می‌شود و یا باید h کوچک باشد که این نیز ممکن است مشکل‌ساز باشد، به عنوان نمونه در محاسبه $\frac{f_{i+1}-f_i}{h}$ اگر h کوچک باشد f_i و f_{i+1} به هم نزدیک خواهند بود و ممکن است تفاضل دو عدد هم‌علامت نزدیک به هم اتفاق افتد و در نتیجه باعث از بین رفتن ارقام بامعنا خواهد شد که به تولید خطا منجر می‌شود و این خطا به عدد کوچکی (h) تقسیم می‌شود که خطای تولیدشده را بزرگ خواهد کرد. از طرف دیگر اگر p تقریب خوبی برای f باشد دلیلی ندارد p' نیز تقریب خوبی برای f' باشد. به همین دلیل سعی می‌شود مشتق‌گیری عددی با احتیاط انجام شود.*

۲.۵ انتگرال‌گیری عددی

محاسبه $\int_a^b f(x)dx$ زمانی که تابع اولیه f در دسترس نیست یا محاسبه تابع اولیه به سادگی امکان‌پذیر نیست و یا وقتی که از f فقط داده‌های جدولی در دسترس است از مسائل اساسی انتگرال‌گیری است. به عنوان مثال می‌توان به انتگرال‌های $\int_0^b e^{-x^2}dx$، $\int_{-a}^a \sqrt[n]{1+x^n}dx$ و $\int_0^1 \frac{1}{1+x^n}dx$ اشاره کرد. برای حل این مسئله، در این بخش قصد داریم انتگرال‌گیری را به صورت عددی (تقریبی) انجام دهیم. یکی از ایده‌های اصلی انتگرال‌گیری عددی همان ایده یافتن مساحت ناحیه محصور به منحنی $y=f(x)$، محور xها و خطوط $x=a$ و $x=b$ است. یعنی ابتدا افرازی منظم به صورت $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ برای بازه $[a,b]$ در نظر می‌گیریم که در آن $x_{i+1}-x_i=h$ و $h=\frac{b-a}{n}$، سپس چندجمله‌ای درون‌یاب f در نقاط $x_i,\ldots,x_{i+m}$ یعنی p_m را ساخته و $\int_{x_i}^{x_{i+m}} p_m(x)dx$ را محاسبه نموده و با جمع کردن این انتگرال‌ها، تقریبی برای $\int_a^b f(x)dx$ به دست می‌آوریم. به شکل ۲.۵ توجه کنید.

شکل ۲.۵: یک ایده انتگرال‌گیری عددی

۱.۲.۵ قاعده ذوزنقه

چندجمله‌ای درون‌یاب درجه اول $(m=1)$ تابع f در نقاط x_i و x_{i+1} عبارت است از $p_1(x)=f_i+\theta\Delta f_i$ که در آن $\theta=\frac{x-x_i}{h}$. سپس با انتگرال‌گیری خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_1(x)dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f_i+\theta\Delta f_i)dx \\ &= \int_0^1 (f_i+\theta\Delta f_i)hd\theta = h\left(\theta f_i+\frac{\theta^2}{2}\Delta f_i\right)\Big|_0^1.\end{aligned}$$

در نتیجه قاعده ذوزنقه ساده[۲] به صورت

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

ساخته می‌شود. هم‌چنین می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \\ &\simeq \sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) = \frac{h}{2}(f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n)\end{aligned}$$

و از آن‌جا قاعده ذوزنقه مرکب[۳] به صورت

$$\int_a^b f(x)dx \simeq T(h) = \frac{h}{2}(f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n)$$

به دست می‌آید. به شکل ۳.۵ توجه کنید.

شکل ۳.۵: تعبیر هندسی قاعده ذوزنقه ساده و مرکب

قضیه ۱.۵ **(خطای قاعده ذوزنقه)** *اگر $f \in C^2[x_i, x_{i+1}]$ آن‌گاه*

$$E_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx - \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) = \frac{-h^3}{12}f''(\xi_i), \qquad \xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$$

و اگر $f \in C^2[a,b]$ آن‌گاه

$$E_T(h) = \int_a^b f(x)dx - T(h) = \frac{-nh^3}{12}f''(\xi) = \frac{-(b-a)h^2}{12}f''(\xi), \qquad \xi \in [a,b].$$

برهان. اگر p_1 چندجمله‌ای درون‌یاب f در نقاط x_i و x_{i+1} باشد آن‌گاه

$$f(x) - p_1(x) = \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{2!}f''(\xi_x), \qquad \xi_x \in [x_i, x_{i+1}].$$

---

[۲] simple Trapezoidal rule

[۳] composite Trapezoidal rule

با انتگرال‌گیری بر $[x_i, x_{i+1}]$ خواهیم داشت

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx - \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_1(x)dx = \frac{1}{2}\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1})f''(\xi_x)dx.$$

به ازای هر x در $[x_i, x_{i+1}]$ داریم $x - x_{i+1} \leq 0$ و $x - x_i \geq 0$، بنابراین $(x-x_i)(x-x_{i+1}) \leq 0$ و چون f'' بر $[x_i, x_{i+1}]$ پیوسته است، پس بنابر تعمیم قضیه مقدار میانگین برای انتگرال‌ها، نقطه ξ_i بین x_i و x_{i+1} وجود دارد که

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1})f''(\xi_x)dx = f''(\xi_i)\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1})dx.$$

از طرفی $\theta = \frac{x-x_i}{h}$ و بنابراین

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1})dx = \int_0^1 h\theta h(\theta-1)hd\theta = h^3\int_0^1 \theta(\theta-1)d\theta = h^3\left(\frac{\theta^3}{3} - \frac{\theta^2}{2}\right)_0^1 = \frac{-h^3}{6}$$

در نتیجه $E_i = \frac{-h^3}{12}f''(\xi_i)$. حال می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} E_T(h) &= \int_a^b f(x)dx - T(h) = \left(\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx - \frac{h}{2}(f_0+f_1)\right) + \\ &\left(\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx - \frac{h}{2}(f_1+f_2)\right) + \cdots + \left(\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx - \frac{h}{2}(f_{n-1}+f_n)\right) \end{aligned}$$

بنابراین

$$E_T(h) = \sum_{i=0}^{n-1} E_i = \frac{-h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i), \qquad \xi_i \in [x_i, x_{i+1}].$$

چون f'' بر بازه بسته و کران‌دار $[a,b]$ پیوسته است پس اعداد m و M چنان وجود دارند که $m = \min_{x\in[a,b]} f''(x)$ و $M = \max_{x\in[a,b]} f''(x)$. بنابراین به ازای هر $i = 0, 1, \ldots, n-1$ داریم $m \leq f''(\xi_i) \leq M$ و در نتیجه $nm \leq \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \leq nM$ و از آنجا $m \leq \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \leq M$. حال بنابر قضیه مقدار میانی، نقطه ξ بین a و b چنان وجود دارد که $f''(\xi) = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)$. در نتیجه $E_T(h) = \frac{-nh^3}{12}f''(\xi) = \frac{-(b-a)h^2}{12}f''(\xi)$. □

تذکر ۴.۵ *در عمل اگر به ازای هر x در بازه $[a,b]$ داشته باشیم $|f''(x)| \leq M_2$، آن‌گاه خواهیم داشت*

$$|E_T(h)| \leq \frac{(b-a)M_2}{12}h^2$$

و این یعنی خطا از مرتبه $O(h^2)$ است. هم‌چنین با توجه به ظاهر شدن f'' در عبارت خطای قاعده ذوزنقه، می‌توان نتیجه گرفت که این روش برای چندجمله‌ای‌های حداکثر از درجه یک دقیق است.

مثال ۴.۵ *به کمک قاعده ذوزنقه، تقریبی از $\int_0^1 x\sin x dx$ به دست آورید که خطای آن حداکثر 10^{-2} باشد.*

چون $a = 0$، $b = 1$ و $f(x) = x\sin x$ داریم $f'(x) = \sin x + x\cos x$ و $f''(x) = 2\cos x - x\sin x$ و در نتیجه

$$|f''(x)| = |2\cos x - x\sin x| \leq 2|\cos x| + |x||\sin x| \leq 2 + 1 = 3 = M_2$$

حال باید داشته باشیم $\frac{(b-a)M_2}{12}h^2 \le 10^{-2}$ *و یا* $\frac{(1-0)\times 3}{12}h^2 \le 10^{-2}$ *یعنی* $h^2 \le 0{,}04$ *و از آن‌جا* $h \le 0{,}2$*. با انتخاب* $h = 0{,}2$ *داریم* $n = \frac{b-a}{h} = \frac{1}{0{,}2} = 5$ *و به ازای* $x_0 = 0$ *و* $x_i = x_0 + ih = \frac{i}{5}$ *خواهیم داشت*

$$\begin{aligned} T(0{,}2) &= \tfrac{0{,}2}{2}(f_0 + 2\sum_{i=1}^{4} f_i + f_5) \\ &= \tfrac{0{,}2}{2}(0 + 2(0{,}2\sin(0{,}2) + 0{,}4\sin(0{,}4) + 0{,}6\sin(0{,}6) + 0{,}8\sin(0{,}8)) + \sin(1)) \end{aligned}$$

و یا $T(0{,}2) = 0{,}3058$*. از طرفی* $\int_0^1 x\sin x dx = (-x\cos x)_0^1 + \int_0^1 \cos x dx = -\cos 1 + \sin 1 = 0{,}3012$ *و بنابراین* $\left|\int_0^1 x\sin x dx - T(0{,}2)\right| = |0{,}3012 - 0{,}3058| = 0{,}0046 < 10^{-2}$*. با استفاده از قاعده ذوزنقه ساده، یعنی با انتخاب* $n = 1$ *یا* $h = b - a = 1$ *داریم* $T(1) = \frac{1}{2}(f_0 + f_1) = \frac{1}{2}(\sin 0 + \sin 1) = 0{,}4207$*.* △

تمرین ۵.۵ *در قاعده ذوزنقه، بازه* $[0,2]$ *را به چند قسمت تقسیم کنیم تا مقدار تقریبی* $\int_0^2 e^{-x^2}dx$ *با خطایی کمتر از* 10^{-4} *به دست آید.*

۲.۲.۵ قاعده سیمسون

چندجمله‌ای درون‌یاب درجه دوم ($m = 2$) در نقاط x_i،x_{i+1} و x_{i+2} به صورت زیر است

$$p_2(x) = f_i + \theta\Delta f_i + \frac{\theta(\theta-1)}{2!}\Delta^2 f_i, \qquad \theta = \frac{x - x_i}{h}.$$

با قرار دادن $\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx \simeq \int_{x_i}^{x_{i+2}} p_2(x)dx$ و اِعمال تغییر متغیر $\theta = \frac{x-x_i}{h}$ داریم

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx &\simeq \int_0^2 (f_i + \theta\Delta f_i + \frac{\theta(\theta-1)}{2!}\Delta^2 f_i)hd\theta \\ &= h\left(\theta f_i + \tfrac{\theta^2}{2}\Delta f_i + (\tfrac{\theta^3}{6} - \tfrac{\theta^2}{4})\Delta^2 f_i\right)_0^2 \\ &= h(2f_i + 2\Delta f_i + \tfrac{1}{3}\Delta^2 f_i) \end{aligned}$$

و با جایگزینی Δf_i و $\Delta^2 f_i$، قاعده سیمسون ساده[۴] به صورت زیر به دست می‌آید

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2}).$$

حال با فرض زوج بودن n، می‌توان نوشت

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

[۴] simple Simpson's rule

بنابراین قاعده سیمسون مرکب[5] به صورت زیر ساخته می‌شود

$$\int_a^b f(x)dx \simeq S(h) = \frac{h}{3}(f_0 + 4(f_1 + f_3 + \cdots + f_{n-1}) + 2(f_2 + f_4 + \cdots + f_{n-2}) + f_n).$$

قضیه ۲.۵ (خطای قاعده سیمسون) *اگر $f \in C^4[x_i, x_{i+2}]$ آن‌گاه*

$$E_i = \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx - \frac{h}{3}(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2}) = \frac{-h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i), \qquad x_i \le \xi_i \le x_{i+2}$$

و اگر $f \in C^4[a,b]$ آن‌گاه $E_S(h) = \int_a^b f(x)dx - S(h) = \frac{-nh^5}{180} f^{(4)}(\xi) = \frac{-(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi)$ که در آن $\xi \in [a,b]$.

برهان. برای اثبات قسمت اول این قضیه کافی است از بسط تیلور f_{i+1}، f_{i+2} و $f(x) = f(x_i + x - x_i)$ استفاده شود و برای اثبات قسمت دوم قضیه با این فرض که n زوج باشد

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

و بنابراین $E_S(h) = E_0 + E_2 + \cdots + E_{n-2} = \frac{-h^5}{90}(f^{(4)}(\xi_0) + f^{(4)}(\xi_2) + \cdots + f^{(4)}(\xi_{n-2}))$. حال چون $f^{(4)}$ بر بازه بسته و کران‌دار $[a,b]$ پیوسته است پس اعداد m و M چنان وجود دارند که $m = \min_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x)$ و $M = \max_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x)$ و در نتیجه به ازای $i = 0, 2, \ldots, n-2$ داریم $m \le f^{(4)}(\xi_i) \le M$ و با جمع این نابرابری‌ها خواهیم داشت

$$m \le \frac{f^{(4)}(\xi_0) + f^{(4)}(\xi_2) + \cdots + f^{(4)}(\xi_{n-2})}{\frac{n}{2}} \le M$$

و بنابر قضیه مقدار میانی، عدد ξ بین a و b به گونه‌ای یافت می‌شود که $f^{(4)}(\xi) = \frac{f^{(4)}(\xi_0)+f^{(4)}(\xi_2)+\cdots+f^{(4)}(\xi_{n-2})}{\frac{n}{2}}$ و در نتیجه $E_S(h) = \frac{-h^5}{90} \times \frac{n}{2} f^{(4)}(\xi) = \frac{-nh^5}{180} f^{(4)}(\xi) = \frac{-(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi)$. $\square$

تذکر ۵.۵ *در عمل اگر به ازای هر x در $[a,b]$ داشته باشیم $|f^{(4)}(x)| \le M_4$، آن‌گاه خواهیم داشت*

$$|E_S(h)| \le \frac{(b-a)M_4}{180} h^4$$

و این یعنی خطای قاعده سیمسون از مرتبه $O(h^4)$ است و با توجه به ظاهر شدن جمله $f^{(4)}$ در عبارت خطای قاعده سیمسون، ملاحظه می‌شود این قاعده برای چندجمله‌ای‌های حداکثر از درجه ۳ دقیق است.

مثال ۵.۵ *می‌خواهیم مقدار تقریبی $\int_0^2 e^{-x^2}dx$ را با خطایی کمتر از 10^{-4} با قاعده سیمسون به دست آوریم. ابتدا داریم*

$$f(x) = e^{-x^2},\ f'(x) = -2xe^{-x^2},\ f''(x) = (-2 + 4x^2)e^{-x^2},\ f'''(x) = (12x - 8x^3)e^{-x^2}$$

---

[5] composite Simpson's rule

و $f^{(۴)}(x) = (۱۲ - ۴۸x^۲ + ۱۶x^۴)e^{-x^۲}$. *با متحد صفر قرار دادن* $f^{(۵)}(x) = (-۱۲۰x + ۱۶۰x^۳ - ۳۲x^۵)e^{-x^۲}$ *خواهیم داشت* $x = ۰,\ x \simeq \pm ۰/۴۹۵,\ x \simeq \pm ۱/۰۴۳$ *و از آنجا داریم*

$$M_۴ = \max\{f^{(۴)}(۰), f^{(۴)}(۰/۴۹۵), f^{(۴)}(۱/۰۴۳), f^{(۴)}(۲)\} = ۱۲.$$

بنابراین باید داشته باشیم $\frac{(۲-۰)۱۲}{۱۸۰}h^۴ < ۱۰^{-۴}$. *در نتیجه* $h < ۰/۱۶۵۰۰۰$ *که نتیجه می‌دهد* $n > ۱۲/۱۲۰۰۰$. *پس* $n = ۱۴$. △

مثال ۶.۵ *به کمک قاعده سیمسون، تقریبی از* $\int_۰^۱ x\sin x dx$ *به دست آورید که خطای آن حداکثر* $۱۰^{-۵}$ *باشد. برای حل این مثال، برنامه* simpson.nb *را ببینید.* △

۳.۲.۵ قاعده نقطه میانی

در قاعده‌های ذوزنقه و سیمسون به مقدار $f(a)$ و $f(b)$ نیاز است و بنابراین چنین روش‌هایی برای محاسبه انتگرال‌هایی به شکل $\int_{-۱}^{۱}\frac{dx}{\sqrt{۱-x^۲}}$ یا $\int_۰^۱ \ln x dx$ مناسب نیستند. راه چاره استفاده از روش‌هایی است که به محاسبه $f(a)$ و $f(b)$ نیاز نداشته باشند. یکی از این روش‌ها قاعده نقطه میانی ساده[۶] است که به صورت زیر معرفی می‌شود

$$\int_{x_i}^{x_{i+۱}} f(x)dx \simeq hf(x_i + \frac{h}{۲}).$$

بنابراین می‌توان نوشت

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_۰}^{x_n} f(x)dx = \sum_{i=۰}^{n-۱}\int_{x_i}^{x_{i+۱}} f(x)dx \simeq \sum_{i=۰}^{n-۱} hf(x_i + \frac{h}{۲})$$

و در نتیجه قاعده نقطه میانی مرکب[۷] به صورت زیر ساخته می‌شود

$$\int_a^b f(x)dx \simeq M(h) = h\sum_{i=۰}^{n-۱} f(x_i + \frac{h}{۲}).$$

تعبیر هندسی این روش در شکل ۴.۵ نشان داده شده است.

قضیه ۳.۵ (خطای قاعده نقطه میانی) *اگر* $f \in C^۲[x_i, x_{i+۱}]$ *آن‌گاه*

$$E_i = \int_{x_i}^{x_{i+۱}} f(x)dx - hf(x_i + \frac{h}{۲}) = \frac{h^۳}{۲۴}f''(\xi_i), \qquad \xi_i \in [x_i, x_{i+۱}]$$

و در نتیجه اگر $f \in C^۲[a,b]$ *آن‌گاه* $E_M(h) = \int_a^b f(x)dx - M(h) = \frac{nh^۳}{۲۴}f''(\xi) = \frac{(b-a)h^۲}{۲۴}f''(\xi)$ *که در آن* $\xi \in [a,b]$.

برهان. مشابه اثبات قضیه خطای قاعده سیمسون ثابت می‌شود. □

[۶] simple midpoint rule

[۷] composite midpoint rule

شکل ۴.۵: قاعده نقطه میانی ساده و مرکب

تذکر ۶.۵ *در عمل اگر به ازای هر* x *در* $[a,b]$ *داشته باشیم* $|f''(x)| \leq M_2$ *آن‌گاه* $|E_M(h)| \leq \frac{(b-a)M_2}{24}h^2$*. به وضوح مشاهده می‌شود در بیشتر مواقع خطای روش نقطه میانی حدود نصف خطای روش ذوزنقه‌ای است و هم‌چنین این روش برای چندجمله‌ای‌های حداکثر از درجه یک دقیق است.*

مثال ۷.۵ *مقدار تقریبی* $\int_0^1 \ln x dx$ *را به روش نقطه میانی با* $n = 4$ *به دست آورده با مقدار واقعی مقایسه کنید.*
به وضوح داریم $-1 = \int_0^1 \ln x dx \simeq 0/25(\ln\frac{1}{8} + \ln\frac{3}{8} + \ln\frac{5}{8} + \ln\frac{7}{8}) = -0/915000$. △

مثال ۸.۵ *مقدار* $\int_0^{0/09} \frac{dx}{\sqrt{x}}$ *را به کمک روش نقطه میانی چنان به دست آورید که خطای آن حداکثر* 10^{-2} *باشد.*
برای حل این مثال برنامه midpoint.nb *بررسی شود.* △

۴.۲.۵ قاعده‌های نیوتن-کاتس

با بررسی قاعده‌های انتگرال‌گیری، می‌توان شکل کلی یک قاعده انتگرال‌گیری یا کوادراتور[۸]، را به صورت زیر نوشت

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + E$$

که در آن $x_0, x_1, \ldots, x_n$ نقاطی در بازه $[a,b]$ و E بیان‌گر خطای روش است. در کوادراتورهای نیوتن-کاتس[۹]، نقاط $x_0, x_1, \ldots, x_n$ معلوم و هم‌فاصله فرض می‌شوند و ضرایب $a_0, a_1, \ldots, a_n$ به گونه‌ای تعیین می‌شوند که قاعده انتگرال‌گیری دارای درجه دقت (صحت) n باشد، یعنی برای $f(x) = 1, x, \ldots, x^n$ دقیق باشد ($E = 0$) و برای تعیین جمله خطا قرار می‌دهیم $f(x) = x^{n+1}$ و $E \neq 0$. کوادراتورهای نیوتن-کاتس به دو دسته بسته و باز تقسیم می‌شوند. در نوع بسته از دو مقدار $f(a)$ و $f(b)$ استفاده می‌شود حال آن‌که در نوع باز نیازی به آنها نیست.

مثال ۹.۵ *یک قاعده انتگرال‌گیری به صورت* $\int_0^{3h} f(x)dx = \sum_{i=0}^{3} a_i f(x_i) + E$ *با نقاط* $x_0 = 0$، $x_1 = h$، $x_2 = 2h$ *و* $x_3 = 3h$ *در نظر بگیرید. با قرار دادن* $E = 0$ *به ازای* $f(x) = 1, x, x^2, x^3$*، داریم*

$$\begin{aligned}
&f(x) = 1, \quad \int_0^{3h} 1dx = a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 3h\\
&f(x) = x, \quad \int_0^{3h} xdx = ha_1 + 2ha_2 + 3ha_3 = \tfrac{9h^2}{2}\\
&f(x) = x^2, \quad \int_0^{3h} x^2dx = h^2a_1 + 4h^2a_2 + 9h^2a_3 = 9h^3\\
&f(x) = x^3, \quad \int_0^{3h} x^3dx = h^3a_1 + 8h^3a_2 + 27h^3a_3 = \tfrac{81h^4}{4}
\end{aligned}$$

---

[۸] quadrature

[۹] Newton-Cotes

و از آنجا خواهیم داشت

$$a_۰ = \frac{۳h}{۸}, \qquad a_۱ = \frac{۹h}{۸}, \qquad a_۲ = \frac{۹h}{۸}, \qquad a_۳ = \frac{۳h}{۸}.$$

بنابراین $\int_۰^{۳h} f(x)dx = \frac{۳h}{۸}(f(۰)+۳f(h)+۳f(۲h)+f(۳h))+E$. حال به ازای $f(x)=x^۴$ قرار می‌دهیم $E=\tilde{E}$ و در نتیجه $\frac{(۳h)^۵}{۵} = \int_۰^{۳h} x^۴dx = \frac{۳h}{۸}(۰+۳h^۴+۳(۲h)^۴+(۳h)^۴)+\tilde{E}$ و از آن‌جا $\tilde{E} = \frac{-۹h^۵}{۱۰}$. حال قرار می‌دهیم

$$E = \tilde{E} \times \frac{f^{(۴)}(\xi)}{۴!} = \frac{-۹h^۵}{۱۰}\times\frac{f^{(۴)}(\xi)}{۴!} = \frac{-۳h^۵}{۸۰}f^{(۴)}(\xi), \qquad \xi\in[۰,۳h].$$

پس $\int_۰^{۳h} f(x)dx = \frac{۳h}{۸}(f(۰)+۳f(h)+۳f(۲h)+f(۳h)) - \frac{۳h^۵}{۸۰}f^{(۴)}(\xi)$ و با تغییر متغیر $t = x+x_۰$ یک قاعده چهار نقطه‌ای به نام قاعده $\frac{۳}{۸}$ سیمسون به صورت زیر به دست می‌آید

$$\int_{x_۰}^{x_۳} f(t)dt = \frac{۳h}{۸}(f_۰+۳f_۱+۳f_۲+f_۳) - \frac{۳h^۵}{۸۰}f^{(۴)}(\xi), \qquad x_۰\le\xi<x_۳.$$

قاعده $\frac{۳}{۸}$ سیمسون مرکب را به دست آورید. △

تذکر ۷.۵ در مثال ۹.۵، از روش ضرایب نامعین استفاده کرده و یک قاعده به دست آوردیم. به صورت مشابه می‌توان قاعده‌های نیوتن-کاتس $(m+۱)$-نقطه‌ای از نوع بسته را به دست آورد. شکل کلی این قاعده‌ها به صورت زیر است

$$\int_{x_۰}^{x_m} f(x)dx = A_۰h\sum_{i=۰}^{m}a_if_i + A_۱h^{l+۱}f^{(l)}(\xi), \qquad \xi\in[x_۰,x_m]$$

که در آن $l=m+۱$ یا $l=m+۲$ به ترتیب اگر m فرد یا زوج باشد. برای تعیین سایر مجهولات می‌توان از جدول ۲.۵ کمک گرفت. باید توجه داشت که ضرایب در جدول داده‌شده متقارن هستند. چون به ازای $m=۸$ به بعد، ضرایب منفی آشکار می‌شوند، جهت جلوگیری از انجام عمل منها، بهتر است از mهای کوچک استفاده کرد.

m	$A_۰$	$a_۰$	$a_۱$	$a_۲$	$a_۳$	$a_۴$	$A_۱$
۱	$\frac{۱}{۲}$	۱	۱				$\frac{-۱}{۱۲}$
۲	$\frac{۱}{۳}$	۱	۴	۱			$\frac{-۱}{۹۰}$
۳	$\frac{۳}{۸}$	۱	۳	۳	۱		$\frac{-۳}{۸۰}$
۴	$\frac{۴}{۴۵}$	۷	۳۲	۱۲	۳۲	۷	$\frac{-۸}{۹۰۵}$
۵	$\frac{۵}{۲۸۸}$	۱۹	۷۵	۵۰	۵۰	۷۵	$\frac{-۲۷۵}{۲۰۹۶}$
۶	$\frac{۱}{۱۴۰}$	۴۱	۲۱۶	۲۷	۲۷۲	۲۷	$\frac{-۹}{۱۴۰۰}$
۷	$\frac{۷}{۱۷۲۸۰}$	۷۵۱	۳۵۷۷	۱۳۲۳	۲۹۸۹	۲۹۸۹	$\frac{-۸۱۸۳}{۵۱۸۴۰۰}$
۸	$\frac{۴}{۱۴۱۷۵}$	۹۸۹	۵۸۸۸	−۹۲۸	۱۰۹۴۸	−۴۵۰۴۰	$\frac{-۲۳۶۸}{۴۶۷۷۷۵}$

جدول ۲.۵: قاعده‌های نیوتن-کاتس

تذکر ۸.۵ *افراز منظم* $a = t_۰ < t_۱ < \cdots < t_n = b$ *از بازه* $[a, b]$ *را در نظر بگیرید به طوری که*

$$t_i = t_۰ + ih, \quad i = ۰, ۱, \ldots, n, \qquad h = \frac{b-a}{n}.$$

سپس تعریف کنید $x_۱ = t_۰ + h/۲$ *و* $x_i = x_۱ + (i-۱)h,\ i = ۱, \ldots, n$. *قاعده‌های نیوتن-کاتس باز با استفاده از نقاط* $x_۱, \ldots, x_n$ *ساخته می‌شوند. به عنوان مثال قاعده نقطه میانی یک کوادراتور نیوتن-کاتس دو نقطه‌ای باز است.*

۵.۲.۵ کوادراتور گاوس

در این روش یک کوادراتور به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود

$$\int_{-۱}^{۱} f(x)dx = \sum_{i=۱}^{n} \omega_i f(x_i) + E$$

که در آن ضرایب و نقاط مجهول فرض می‌شوند. بنابراین $۲n$ مجهول داریم و $۲n$ معادله به این صورت ساخته می‌شوند که فرض می‌شود درجه دقت کوادراتور $۲n - ۱$ باشد، یعنی قاعده برای چندجمله‌ای‌های تا درجه $۲n - ۱$ دقیق باشد به عبارت دیگر برای $f(x) = ۱, x, x^۲, \ldots, x^{۲n-۱}$ قرار می‌دهیم $E = ۰$ و برای تعیین E قرار می‌دهیم $f(x) = x^{۲n}$.

مثال ۱۰.۵ *برای به دست آوردن کوادراتور دو نقطه‌ای گاوس با فرض* $\int_{-۱}^{۱} f(x)dx = \omega_۰ f(x_۰) + \omega_۱ f(x_۱) + E$ *و با قرار دادن* $E = ۰$ *به ازای* $f(x) = ۱, x, x^۲, x^۳$ *خواهیم داشت*

$$\begin{cases} ۲ = \int_{-۱}^{۱} dx = \omega_۰ + \omega_۱, & ۰ = \int_{-۱}^{۱} x dx = \omega_۰ x_۰ + \omega_۱ x_۱, \\ \frac{۲}{۳} = \int_{-۱}^{۱} x^۲ dx = \omega_۰ x_۰^۲ + \omega_۱ x_۱^۲, & ۰ = \int_{-۱}^{۱} x^۳ dx = \omega_۰ x_۰^۳ + \omega_۱ x_۱^۳ \end{cases}$$

و بنابراین با حل این دستگاه غیرخطی (که چندان هم راحت نیست) داریم $\omega_۰ = \omega_۱ = ۱$ *و* $x_۱ = -x_۰ = \frac{\sqrt{۳}}{۳}$. *در نتیجه* $\int_{-۱}^{۱} f(x)dx = f(\frac{-\sqrt{۳}}{۳}) + f(\frac{\sqrt{۳}}{۳}) + E$. *برای یافتن* E *به ازای* $f(x) = x^۴$ *قرار می‌دهیم* $E = \tilde{E}$ *و خواهیم داشت* $\int_{-۱}^{۱} x^۴ dx = (\frac{-\sqrt{۳}}{۳})^۴ + (\frac{\sqrt{۳}}{۳})^۴ + \tilde{E}$ *و از آن‌جا* $\tilde{E} = \frac{۸}{۴۵}$. *حال قرار می‌دهیم* $E = \tilde{E} \times \frac{f^{(۴)}(\xi)}{۴!} = \frac{f^{(۴)}(\xi)}{۱۳۵}$ *که در آن* $\xi \in [-۱, ۱]$. *پس کوادراتور دو نقطه‌ای گاوس به صورت زیر به دست می‌آید*

$$\int_{-۱}^{۱} f(x)dx = f(\frac{-\sqrt{۳}}{۳}) + f(\frac{\sqrt{۳}}{۳}) + \frac{f^{(۴)}(\xi)}{۱۳۵}$$

البته به شرط آن که $f \in C^۴[-۱, ۱]$. △

در عمل برای تعیین کوادراتورهای گاوس، به جای حل دستگاه $۲n + ۲$ معادله غیرخطی، از قضیه زیر کمک می‌گیریم.

قضیه ۴.۵ *(کوادراتور گاوس-لژاندر) کوادراتور* n *نقطه‌ای گاوس-لژاندر در بازه* $[-۱, ۱]$ *به صورت زیر است*

$$\int_{-۱}^{۱} f(x)dx = \sum_{i=۱}^{n} \omega_i f(x_i) + E_n$$

که در آن $x_۱, x_۲, \ldots, x_n$ *ریشه‌های* p_n *یعنی چندجمله‌ای درجه* n *لژاندر هستند و ضرایب (وزن‌ها) از رابطه*

$$\omega_i = \frac{۲(۱ - x_i^۲)}{n^۲ (p_{n-۱}(x_i))^۲}, \qquad i = ۱, \cdots, n$$

به دست می‌آیند. هم‌چنین $E_n = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{(2n)}(\xi)$ که در آن $\xi \in [-1, 1]$.

برهان. به کتاب‌های آنالیز عددی پیشرفته مراجعه شود. □

مثال ۱۱.۵ *برای به دست آوردن کوادراتور سه نقطه‌ای گاوس-لژاندر، ابتدا چندجمله‌ای‌های لژاندر را به کمک رابطه بازگشتی زیر به دست می‌آوریم*

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x, \quad p_{n+1} = \frac{2n+1}{n+1} x p_n(x) - \frac{n}{n+1} p_{n-1}(x), \qquad n = 1, 2, \ldots.$$

می‌توان از رابطه $p_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left((x^2-1)^n\right)$ نیز کمک گرفت. در اینجا $n = 3$ و داریم

$$p_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \qquad p_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x.$$

از حل $p_3(x) = 0$ خواهیم داشت $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}},\ x_1 = 0,\ x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. بنابراین

$$\omega_0 = \frac{2(1-x_0^2)}{9(p_2(x_0))^2} = \frac{5}{9} = \omega_2, \qquad \omega_1 = \frac{2(1-x_1^2)}{9(p_2(x_1))^2} = \frac{8}{9}.$$

هم‌چنین $E_3 = \frac{2^7 \times (3!)^4}{7 \times (6!)^3} f^{(6)}(\xi) = \frac{1}{15750} f^{(6)}(\xi)$ که در آن $\xi \in [-1, 1]$. در نتیجه

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{1}{9}\left(5f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + 8f(0) + 5f(\sqrt{\frac{3}{5}})\right) + \frac{f^{(6)}(\xi)}{15750}.$$

این قاعده برای چندجمله‌ای‌های تا درجه ۵ دقیق است. به عنوان مثال اگر $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ آن‌گاه

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1+x^2} \simeq \frac{1}{9}\left(\frac{5}{1+\frac{3}{5}} + \frac{8}{1+0} + \frac{5}{1+\frac{3}{5}}\right) = \frac{19}{12} = 1/58\bar{3}$$

از طرف دیگر $\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1+x^2} = \tan^{-1}(x)]_{-1}^{1} = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2} \simeq 1/57$. △

کوادراتورهای گاوس-لژاندر را مانند کوادراتورهای نیوتن-کاتس یک بار به دست آورده و به نکات زیر توجه داریم

- $x_{n-i} = -x_i$ و $\omega_{n-i} = \omega_i$ و اگر n فرد باشد $x_{\frac{n-1}{2}} = 0$؛
- ω_i ها همه مثبت هستند و $0 < \omega_i \leq 1$ (اگر $f(x_i)$ دارای خطا باشد ضریب آن کوچک است)؛
- با تغییر متغیر $x = \frac{1}{2}((b-a)t + (b+a))$ ($dx = \frac{1}{2}(b-a)dt$) خواهیم داشت

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(\frac{1}{2}((b-a)t + (b+a)))dt.$$

مثال ۱۲.۵ *ضرایب ω_i در قاعده زیر را به گونه‌ای به دست آورید که این قاعده دارای درجه دقت ۲ باشد.*

$$\int_0^h f(\sqrt{x})dx \simeq \omega_1 f(0) + \omega_2 f'(0) + \omega_3 f(h)$$

به ازای $f(x) = 1, x, x^2$ *خواهیم داشت*

$$h = \int_0^h dx = \omega_1 + 0 + \omega_3$$

$$\frac{2}{3}h^{\frac{3}{2}} = \int_0^h \sqrt{x}dx = 0 + \omega_2 + h\omega_3$$

$$\frac{h^2}{2} = \int_0^h xdx = 0 + 0 + h^2\omega_3$$

و از حل آن داریم $\omega_1 = h - \frac{1}{2},\ \omega_2 = \frac{2}{3}h^{\frac{3}{2}} - \frac{h}{2},\ \omega_3 = \frac{1}{2}$. *به عنوان تمرین قاعده مرکب نظیر را بنویسید.* △

۶.۲.۵ روش رامبرگ

روش رامبرگ از قاعده انتگرال‌گیری ذوزنقه (سیمسون) استفاده کرده و به کمک برون‌یابی ریچاردسون تقریب‌های بهتری به دست می‌آورد. برای توابع به اندازه‌ی کافی مشتق‌پذیر می‌توان نشان داد

$$\int_a^b f(x)dx = T(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

که در آن h اندازه گام نقاط هم فاصله، $T(h)$ قاعده ذوزنقه مرکب و a_2، a_4،... ضرایبی ثابت و مستقل از h هستند. با تبدیل h به $\frac{h}{2}$ در این رابطه و حذف a_2 خواهیم داشت

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} - \frac{a_4}{4}h^4 - \frac{5a_6}{16}h^6 - \cdots$$

و این یعنی $\frac{4T(\frac{h}{2})-T(h)}{3}$ تقریبی برای مقدار انتگرال با خطای $O(h^4)$ است، در حالی که $T(h)$ تقریبی با خطای $O(h^2)$ است. برای ساختن یک روند تکراری، به ازای $i = 0, 1, 2, \ldots$ قرار می‌دهیم

$$h_i = \frac{b-a}{2^i}, \quad x_j = a + jh_i,\ j = 0, 1, \ldots, 2^i, \quad T_{0i} = T(h_i) = \frac{h_i}{2}\left(f(a) + 2\sum_{j=1}^{2^i-1} f(x_j) + f(b)\right)$$

و برای $p = 1, 2, \ldots$ قرار می‌دهیم $T_{pi} = \frac{4^pT_{(p-1)(i+1)} - T_{(p-1)i}}{4^p-1}$. در عمل یک جدول از مقادیر T_{pi} تهیه کرده و روند را تا جایی ادامه می‌دهیم که برای نمونه شرط توقف $|T_{p0} - T_{(p-1)0}| < \varepsilon$ برقرار شود.

تذکر ۹.۵ *خطای T_{pi} از مرتبه $O(h^{2p+2})$ است و برای چندجمله‌ای‌های تا درجه $2p+1$ دقیق است و به علاوه ثابت می‌شود*

$$\lim_{p\longrightarrow\infty} T_{p0} = \int_a^b f(x)dx.$$

تذکر ۱۰.۵ *بعضی از قاعده‌های نیوتن-کاتس در حین محاسبه جملات قاعده رامبرگ به دست می‌آیند.* چون می‌دانیم $T(h) = \frac{h}{2}(f(a) + f(b))$ و $T(\frac{h}{2}) = \frac{h}{4}\left(f(a) + 2f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right)$، پس

$$\frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = \frac{h}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right) = S(\frac{h}{2}).$$

مثال ۱۳.۵ *برای تعیین مقدار تقریبی $I=\int_0^{\frac{\pi}{4}}\sec x dx$ با روش رامبرگ، ابتدا جدول زیر را می‌سازیم*

h	T_{0i}	T_{1i}	T_{2i}	T_{3i}
$\frac{\pi}{4}$	۰/۹۴۸۰۶			
$\frac{\pi}{8}$	۰/۸۹۹۰۸	۰/۸۸۲۷۶		
$\frac{\pi}{16}$	۰/۸۸۵۸۹	۰/۸۸۱۴۹	۰/۸۸۱۴۰	
$\frac{\pi}{32}$	۰/۸۸۲۵۱	۰/۸۸۱۳۸	۰/۸۸۱۳۷	۰/۸۸۱۳۷
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

دلیل ادامه ندادن جدول آن است که $|T_{30}-T_{20}|=|0/88137-0/88140|=0/3\times 10^{-4}<0/5\times 10^{-4}$.
پس $I\simeq 0/8814\ (4D)$ *و با مقایسه با مقدار واقعی*

$$\int_0^{\frac{\pi}{4}}\sec x dx=(\ln(\sec x+\tan x))_0^{\frac{\pi}{4}}=\ln(\sqrt{2}+1)=0/881373587$$

در می‌یابیم $|\int_0^{\frac{\pi}{4}}\sec x dx-0/8814|<0/3\times 10^{-5}$. $\triangle$

تمرین ۶.۵ *برون‌یابی ریچاردسون را روی قاعده سیمسون پیاده کرده و رابطه S_{pi} را مشخص کنید. باید توجه داشت که*

$$\int_a^b f(x)dx=S(h)+a_4h^4+a_6h^6+a_8h^8+\cdots.$$

۳.۵ تمرین‌ها

۱. با استفاده از بسط تیلور فرمول مشتق عددی $f''(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ را به دست آورید.

۲. با استفاده از بسط تیلور فرمول مشتق عددی $f'(x)=\frac{-3f(x)+4f(x+h)-f(x+2h)}{2h}$ را به دست آورید.
نکته : در فرمول‌های مشتق، مجموع ضرایب ترکیب خطی برابر صفر است.

۳. اگر $\frac{\alpha_0f_0+\alpha_1f_1+\cdots+\alpha_nf_n}{kh}$ تقریبی برای f_0' باشد آن‌گاه، مقدار $\sum_{i=0}^{n}i\alpha_i$ را بیابید.

۴. مقادیر α، β و γ چگونه باشند که فرمول $f'(x)\simeq\frac{\alpha f(x)+\beta f(x+h)+\gamma f(x+2h)}{h}$ خطایی از مرتبه $O(h^2)$ داشته باشد؟

۵. خطای برشی فرمول مشتق عددی $f_i''=\frac{\triangle^2f_i-\triangle^3f_i}{h^2}$ از چه مرتبه‌ای است؟

۶. ضرایب را به گونه‌ای بیابید که قاعده $f''(x_i)=w_0f_{i-1}+w_1f_i+w_2f_{i+1}$ برای چند جمله‌ای‌های حداکثر درجه دو دقیق باشد.

۷. فرض کنید $f(h)$ تقریبی از مرتبه n برای L باشد، یعنی $m>n$ ،$L=f(h)+ch^n+o(h^m)$. همچنین فرض کنید $h_L>h$ و $r=\frac{h_L}{h}$. اگر از برون‌یابی ریچاردسون جهت استخراج $f_1(h)$ به عنوان تقریب بهتری از L استفاده کنیم، مقدار $f_1(h)$ را بیابید.

۸. خطای فرمول تقریبی $f'_i = \frac{\triangle f_i - \frac{1}{2}\triangle^2 f_i}{h}$ از مرتبه چند است؟

۹. می‌دانیم که $f'(x) = \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} + \alpha h^p$. مقادیر α و p کدامند؟

۱۰. تقریب مناسبی برای انتگرال‌گیری عددی تابع f با مقادیر معلوم $f(-1) = 1, f(0) = 2, f(1) = 4, f(3) = 5$ پیدا کنید.

۱۱. اگر برای محاسبه انتگرال $\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{1}{2+sin(x)} dx$ از روش رامبرگ استفاده کنیم، درایه اول ستون سوم چیست؟

۱۲. فرض کنید $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ یک افراز دلخواه ثابت برای بازه $[a, b]$ باشد. نشان دهید $\gamma_0, \gamma_1, \ldots, \gamma_n$ یکتایی وجود دارد که برای هر چندجمله‌ای P با درجه حداکثر n در $\sum_{i=0}^{n} \gamma_i P(x_i) = \int_a^b P(x)dx$ صدق می‌کند.

۱۳. قاعده انتگرال‌گیری تقریبی زیر داده شده است

$$I = \int_0^h f(x)dx = Qf = \frac{h}{2}(f(0) + f(h)) + \frac{h^2}{12}(f'(0) - f'(h))$$

الف) نشان دهید که این قاعده برای چندجمله‌ای‌های تا درجه سه دقیق است.

ب) فرمول این قاعده را برای محاسبه انتگرال $\int_0^{nh} f(x)dx$ به دست آورید.

۱۴. اگر بخواهیم تقریبی از $\int_0^{pi/2} x\cos(x)dx$ به روش سیمپسون به دست آوریم که خطای آن کمتر از 10^{-5} باشد، بازه را به چند قسمت تقسیم کنیم؟

۱۵. یک فرمول درجه دوم روی بازه $[-1, 1]$ با استفاده از نقاط مربعی $x_1 = \alpha, x_0 = -\alpha$ که $0 < \alpha \le 1$ به صورت زیر است

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_0 f(-\alpha) + w_1 f(\alpha).$$

فرمول برای هر چندجمله‌ای f از درجه یک دقیق است. نشان دهید که مستقل از مقدار α داریم $w_0 = w_1 = 1$.. همچنین نشان دهید که یک α معین وجود دارد که به ازای آن، این فرمول برای چندجمله‌ای‌های درجه دو نیز دقیق است. این α را تعیین کنید و نشان دهید به ازای آن،فرمول برای چندجمله‌ای‌های درجه سه نیز دقیق است.

کتاب‌نامه

[۱] اسمعیل بابلیان، مبانی آنالیز عددی، انتشارات فاطمی، ۱۳۹۲.

[۲] اسمعیل بابلیان و میرنیا میرکمال، نخستین گامها در آنالیز عددی، نوشته هوسکینگ و دیگران (ترجمه)، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۰.

[۳] بهفروز غلامحسین و میرنیا میرکمال، نظریه و کاربرد آنالیز عددی، نوشته تیلور و دیگران (ترجمه)، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۷۳.

[۴] عالم‌زاده علی اکبر، بابلیان اسماعیل و امیدوار محمدرضا، آنالیز عددی، نوشته بردن و دیگران (ترجمه)، انتشارات منصوری، ۱۳۶۸.

[5] American Heritage Dictionary, 1992.

[6] Chambers 20th Century Dictionary, 1983.

[7] Henrichi P., Elements of numerical analysis, 1964.

[8] Kincaid D. and Cheney E. W., Numerical analysis, Mathematics of scientific computing, 1991.

[9] Scarborough J.B., Numerical Mathematical Analysis, 1930.

[10] Traub J., Communications of the ACM, 1972.

[11] Trefethen L. N., SIAM News, November 1992.

[12] Webster's New Collegiate Dictionary, 1973.