Numerické integrování

Chceme určit:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

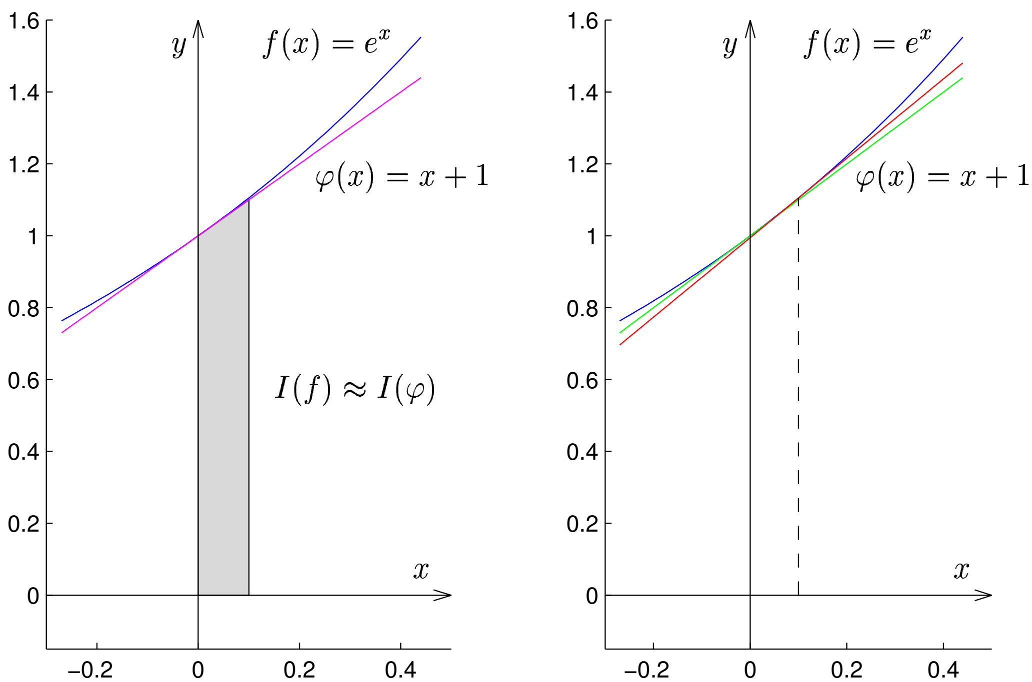
1. Užíváme tehdy, když $I(f)$ nelze spočítat analyticky (velmi častý případ).
2. Je-li $f(x)$ zadána tabulkou nebo grafem.

Myšlenka: Danou funkci f nahradíme její vhodnou aproximací φ.

$$I(f) \approx I(\varphi) = \int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x \quad \text{a tento integrál již můžeme vyjádřit analyticky.}$$

Poznámka: Narozdíl od výpočtu derivace je výpočet integrálu stabilní, protože je-li φ dobrou aproximací f na $\langle a, b\rangle$, je integrál $I(\varphi)$ dobrou aproximací $I(f)$:

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x\right| \le \int_a^b |f(x) - \varphi(x)|\,\mathrm{d}x \le (b-a)\overbrace{\sup_{x\in\langle a,b\rangle} |f(x) - \varphi(x)|}^{\varepsilon}$$



Příklad

$$f(x) = e^x \qquad \longrightarrow \qquad \varphi(x) = 1 + x \qquad \begin{pmatrix} \text{Taylorův rozvoj 1. stupně} \\ \text{v okolí bodu 0.} \end{pmatrix}$$

Vezmeme si interval $\langle 0; 0,1 \rangle$. Pro chybu aproximace funkce f polynomem φ na $\langle 0; 0,1 \rangle$ platí:

$$\max|f(x) - \varphi(x)| = e^{0,1} - (1 + 0,1) \doteq \underbrace{0{,}0052}_{\varepsilon}$$

a) Výpočet derivace

Platí: $f'(x) = e^x$, $f''(x) = e^x$ a $\varphi'(x) = 1$, $\varphi''(x) = 0$. Potom tedy:

$$\max|f'(x) - \varphi'(x)| = e^{0,1} - 1 \doteq \underbrace{0{,}1052}_{\approx 20\varepsilon},$$

$$\max|f''(x) - \varphi''(x)| = e^{0,1} \doteq \underbrace{1{,}1052}_{\approx 213\varepsilon}.$$

Při výpočtu derivace funkce f v bodě $0,1$ je vidět, že počáteční chyba aproximace je ε (pro funkci f a φ), při výpočtu 1. derivace se zhruba *zdvacetinásobí* a při výpočtu 2. derivace je více jak 200ε (výpočet derivace je nestabilní).

b) Výpočet integrálu

$$\int_0^{0,1} e^x \, \mathrm{d}x = [e^x]_0^{0,1} = e^{0,1} - 1 \doteq 0{,}1052 \approx$$

$$\approx \int_0^{0,1} (1 + x) \, \mathrm{d}x = \left[x + \frac{x^2}{2} \right]_0^{0,1} = 0{,}1 + \frac{0,01}{2} = 0{,}1050.$$

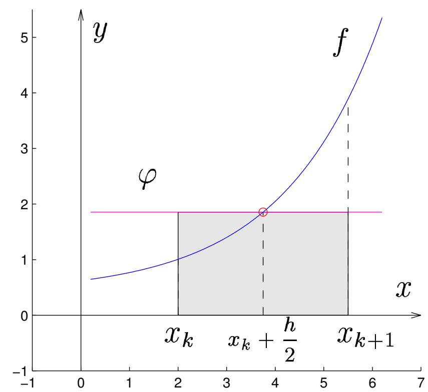
Chyba je v tomto případě 0,0002, tj. zhruba *25x menší* než je chyba aproximace f funkcí φ (výpočet integrálu je stabilní).

Newtonovy-Cotesovy kvadraturní vzorce

Princip: Interval $\langle a, b\rangle$ přes který integrujeme rozdělíme na N stejných podintervalů *(ekvidistantní uzly)*. Jednotlivé uzly označíme $x_k = x_0 + kh$, kde $k = 0, 1, \ldots, N-1$ a $h = \dfrac{b-a}{N}$. Na těchto podintervalech nahradíme funkci f polynomem.

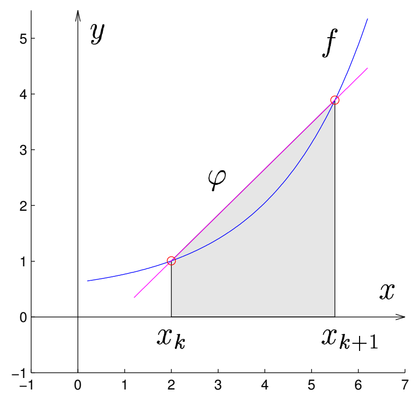
1) Obdélníkové pravidlo (nahrazujeme konstantní funkcí)

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$
$$\approx h\cdot f(x_k + \frac{h}{2}) \equiv R_Z(f,h)$$



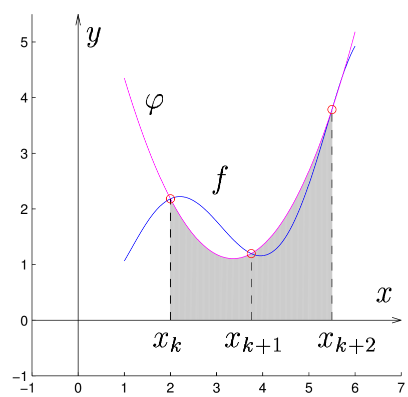
2) Lichoběžníkové pravidlo (nahrazujeme lineární funkcí)

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$
$$\approx \frac{h}{2}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right] \equiv T_Z(f,h)$$



3) Simpsonovo pravidlo (nahrazujeme kvadratickou funkcí)

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$
$$\approx \frac{h}{3}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] \equiv S_Z(f,h)$$



Příklad: Vypočtěte integrál $\int_1^{1,2} e^x \,\mathrm{d}x$.

Řešení: (přesné řešení: $[e^x]_1^{1,2} = e^{1,2} - e^1 \doteq 0{,}601835$)

$$R_Z(e^x;\, 0,2) = 0,2e^{1,1} \doteq 0{,}600833 \qquad \text{chyba: } 0{,}001002$$

$$T_Z(e^x;\, 0,2) = \frac{0,2}{2}(e^{1,0} + e^{1,2}) \doteq 0{,}603839 \qquad \text{chyba: } 0{,}002003$$

$$S_Z(e^x;\, 0,1) = \frac{0,1}{3}(e + 4e^{1,1} + e^{1,2}) \doteq 0{,}601835 \quad \text{chyba: } 0{,}000000$$

Poznámka: Obdélníkové pravidlo vychází přesněji než lichoběžníkové. Simpsonovo pravidlo vyšlo lépe než ostatní.

Chyby:

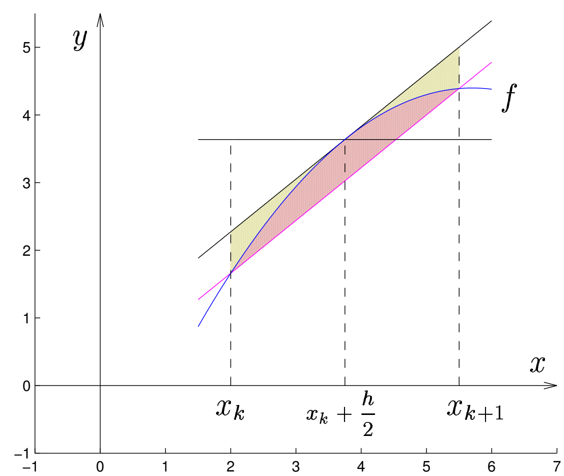
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = R_Z(f,h) + \frac{h^3}{24}f''(\xi)$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = T_Z(f,h) - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,\mathrm{d}x = S_Z(f,h) - \frac{h^5}{90}f^{(IV)}(\xi)$$

Poznámka:

Skutečně má obdélníkové pravidlo asi poloviční chybu než lichoběžníkové.



Složené vzorce: Sečteme dílčí integrály a dostaneme $I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$.

$$
\begin{aligned}
R(f,h) &\equiv h\cdot \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k + \frac{h}{2}) \\
T(f,h) &\equiv \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)\right] = \\
&= h\cdot \left[\frac{1}{2} f(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + \frac{1}{2} f(x_N)\right] \\
S(f,h) &\equiv \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \right. \\
&\left. + \ldots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\right]
\end{aligned}
$$

a jejich chyby:

$$
\begin{aligned}
I &= R(f,h) + (b-a)\frac{h^2}{24} f''(\xi) \\
I &= T(f,h) - (b-a)\frac{h^2}{12} f''(\xi) \\
I &= S(f,h) - (b-a)\frac{h^4}{180} f^{(IV)}(\xi)
\end{aligned}
$$

Richardsonova extrapolace

Zpřesňování výsledků

Metoda polovičního kroku *(Runge)*

výraz pro chybu má tvar: $e(f) = h^k M, \quad h = \dfrac{b-a}{N}$

přesná hodnota:

$$(1) \qquad I = K(h) + h^k M$$

Idea: Vypočteme integrál stejným vzorcem, ale s krokem $\dfrac{h}{2}$.

Dostaneme:

$$(2) \qquad I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \underbrace{\left(\frac{h}{2}\right)^k M_1}_{\text{ozn. } \varepsilon}$$

$$\Rightarrow \qquad h^k = \frac{\varepsilon\, 2^k}{M_1}$$

$$(1') \qquad I = K(h) + \frac{\varepsilon\, 2^k\, M}{M_1}$$

Předpokládáme-li, že se hodnota derivace ve výrazu $e(f)$ pro chybu příliš nemění (tj. $M \approx M_1) \Rightarrow \dfrac{M}{M_1} \approx 1$. Pro (1') a (2) musí platit:

$$K\left(\frac{h}{2}\right) + \varepsilon \approx K(h) + 2^k \varepsilon$$

odhad chyby: $\varepsilon \approx \dfrac{1}{2^k - 1}\left[K\left(\dfrac{h}{2}\right) - K(h)\right].$

Přesnější hodnota integrálu:

$$I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^k - 1}\left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h)\right]$$

Poznámka: Metoda polovičního kroku není nic jiného než jeden krok Richardsonovy extrapolace.

Příklad: Vypočtěte pomocí lichoběžníkového pravidla $\int_1^5 \ln x \,\mathrm{d}x$. Ke zpřesnění použijte Richardsonovu extrapolaci.

Řešení:

Rozvoj chyby lichoběžníkového pravidla:

$$I = T(f,h) + \underbrace{a_1 h^2}_{\text{tab. } k=2} + \underbrace{a_2 h^4}_{\text{tab. } k=4} + a_3 h^6 + \dots$$

Výsledky zapíšeme do tabulky:

h	$T(f,h)$	zpřesnění $k=2$	zpřesnění $k=4$
4	$\frac{4}{2}(\ln 1 + \ln 5)$ $= 3,2188$		
2	$\frac{2}{2}(\ln 1 + 2\ln 3 +$ $+ \ln 5) = 3,8066$	$\frac{3,8066 - 3,2188}{3} +$ $+3,8066 = \underline{4,0025}$	
1	$\frac{1}{2}(\ln 1 + 2\ln 2 +$ $2\ln 3 + 2\ln 4 +$ $\ln 5) = 3,9827$	$\frac{3,9827 - 3,8066}{3} +$ $3,9827 = \underline{4,0414}$	$\frac{4,0414 - 4,0025}{15} +$ $4,0414 = \underline{\underline{4,04399}}$

Přesná hodnota:

$$\int_1^5 \ln x \,\mathrm{d}x = \left| \begin{array}{ll} u = \ln x & v' = 1 \\ u' = \frac{1}{x} & v = x \end{array} \right| = [x \ln x]_1^5 - \int_1^5 \mathrm{d}x = 5\ln 5 - 4 \doteq \underline{\underline{4,04719}}$$

Gaussovy kvadraturní vzorce

Poznámka: Newtonovy-Cotesovy vzorce používají ekvidistantní uzly $(n+1)$ a integrují přesně polynomy až do n-tého stupně (máme na mysli základní vzorce na intervalu (x_k, x_{k+1}) nebo na (x_n, x_{k+2})).

Princip: Dá se ukázat, že při vhodné volbě uzlů lze dosáhnout toho, aby *algebraický řád* byl $(2n+1)$, tj. vzorec bude potom integrovat přesně polynomy až do $(2n+1)$ stupně.

Poznámka: Uzly budou ovšem *neekvidistantní.*

Kvadraturní vzorec hledáme ve tvaru:

$$K(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i); \quad w_i \text{ (váhy)},\ x_i \text{ (uzly)}$$

…určíme tak, abychom přesně integrovali polynom do stupně $2n+1$.

Příklad: Určete Gaussovy kvadraturní vzorce pro $n = 0, 1$ a pro interval $\langle -1, 1\rangle$.

Řešení:

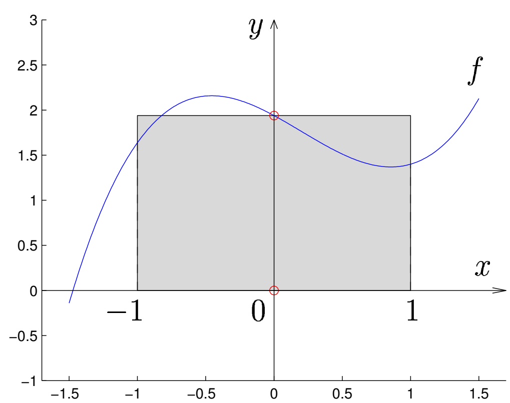
1) pro $n = 0$: $K(f) = w_0 f(x_0)$ (máme 2 neznámé w_0, x_0)
vzorec musí přesně integrovat:

konstantu: $\displaystyle\int_{-1}^{1} b\,\mathrm{d}x = 2b \overset{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{b} \Rightarrow w_0 = 2.$

lineární funkci: $\displaystyle\int_{-1}^{1} (ax+b)\,\mathrm{d}x =$

$$= \left[a\frac{x^2}{2} + bx\right]_{-1}^{1} = \underbrace{\frac{a}{2} - \frac{a}{2}}_{=0} + 2b \overset{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{ax_0+b} \Rightarrow 2b = 2(ax_0+b) \Rightarrow x_0 = 0.$$

$$K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = 2f(0) + \underbrace{\frac{1}{3}f''(\xi)}_{\text{chyba}}$$



2) pro $n = 1$: $\quad K(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) \qquad$ (4 neznámé)

vzorec musí integrovat přesně polynom až 3 stupně:

$$\int_{-1}^{1} \left(ax^3 + bx^2 + cx + d\right)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \left[a\frac{x^4}{4} + b\frac{x^3}{3} + c\frac{x^2}{2} + dx\right]_{-1}^{1} = 0 \cdot a + \frac{2}{3}b + 0 \cdot c + 2d \overset{\text{pož.}}{=}$$

$$\overset{\text{pož.}}{=} w_0\left(ax_0^3 + bx_0^2 + cx_0 + d\right) + w_1\left(ax_1^3 + bx_1^2 + cx_1 + d\right) = K(f).$$

$$\begin{array}{lll} a: & (1) & w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 = 0 \\[2mm] b: & (2) & w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\[2mm] c: & (3) & w_0 x_0 + w_1 x_1 = 0 \\[2mm] d: & (4) & w_0 + w_1 = 2 \end{array}$$

soustava nelineárních rovnic pro 4 neznámé

(1)–(3): $\quad w_0 x_0 (x_0^2 - 1) + w_1 x_1 (x_1^2 - 1) = 0.$

(2)–(4): $\quad w_0 (x_0^2 - 1) + w_1 (x_1^2 - 1) = -\dfrac{4}{3} \qquad / \cdot (-x_1)^{\dagger} \qquad / \cdot (-x_0)^{\ddagger}$

$$\left.\begin{array}{lrcl} \dagger & \underbrace{w_0(x_0 - x_1)}(x_0^2 - 1) & = & \frac{4}{3}x_1 \\[2mm] \ddagger & \underbrace{w_1(x_1 - x_0)}(x_1^2 - 1) & = & \frac{4}{3}x_0 \\[2mm] (3) \text{ a } (4) \Rightarrow & w_1 & = & 2 - w_0 \\ & w_0 x_0 + (2 - w_0) x_1 & = & 0 \\ & \underbrace{w_0(x_0 - x_1)} & = & -2x_1 \end{array}\right\} \quad \begin{array}{rcl} -2x_1(x_0^2 - 1) & = & \frac{4}{3}x_1 \\[2mm] -2(x_0^2 - 1) & = & \frac{4}{3} \\[2mm] x_0^2 - 1 & = & -\frac{2}{3} \\[2mm] x_0^2 & = & \frac{1}{3} \end{array}$$

$$\Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{1}{3}}$$

analogicky:

$$\left.\begin{array}{lcl} (3) \text{ a } (4) \Rightarrow \quad w_0 & = & 2 - w_1 \\ (2-w_1)x_0 + w_1 x_1 & = & 0 \\ \underbrace{w_1(x_1 - x_0)} & = & -2x_0 \end{array}\right\} \quad \begin{array}{rcl} -2x_0(x_1^2 - 1) & = & \frac{4}{3}x_0 \\ -2(x_1^2-1) & = & \frac{4}{3} \\ x_1^2 - 1 & = & -\frac{2}{3} \\ x_1^2 & = & \frac{1}{3} \end{array}$$

$$\Rightarrow x_1 = -\sqrt{\frac{1}{3}}$$

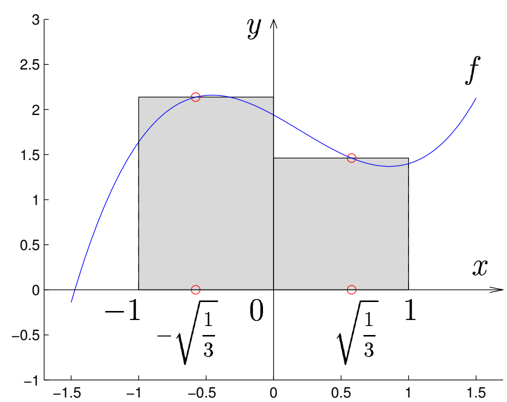
$$\begin{array}{lcl} (3) \text{ a } (4): \quad w_0 + w_1 & = & 2 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}w_0 - \sqrt{\frac{1}{3}}w_1 & = & 0 \Rightarrow w_0 = w_1 \Rightarrow w_0 = w_1 = 1 \end{array}$$

Dostáváme vztah:

$$K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \underbrace{\frac{1}{135}f^{(IV)}(\xi)}_{\text{chyba}}.$$

Poznámka: Pro $n = 2$ bychom jsme dostali:

$$K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \underbrace{\frac{1}{15750}f^{(VI)}(\xi)}_{\text{chyba}}.$$

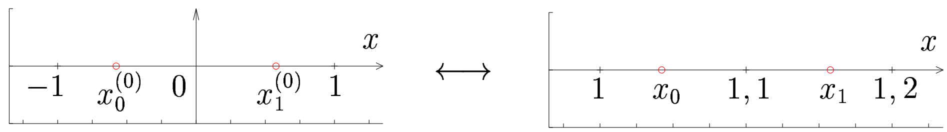


Poznámka: Koeficienty a uzly vzorců vyšších řádů jsou uvedeny v tabulkách. Opět lze používat složené vzorce.

Poznámka: To, že jsme vyjádřili $\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x$ neubírá nic na obecnosti, můžeme totiž libovolný interval $\langle a, b\rangle$ transformovat na $\langle -1, 1\rangle$ a použít odvozené vztahy.

Příklad: Vypočtěte $\int_1^{1,2} e^x \,\mathrm{d}x$ prvními 2 kvadraturními vzorci.

Řešení:



$$x_i = 1,1 + 0,1 \cdot x_i^{(0)},$$
$$w_i = \frac{1}{2}(1,2-1)w_i^{(0)} = 0,1w_i^{(0)}.$$

$n = 0$

$$\int_1^{1,2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \quad 0,2 \cdot f(1,1) = = 0,2 \cdot e^{1,1} = = 0{,}600833.$$

$$x_0 = 1,1 + 0,1 \cdot 0 = 1,1$$
$$w_0 = 0,1 \cdot 2 = 0,2$$

$n = 1$

$$\int_1^{1,2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$
$$\approx 0,1 \left[f(1,1 - 0,1\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(1,1 + 0,1\frac{1}{\sqrt{3}}) \right] \doteq$$
$$\doteq 0,1[2,835632 + 3,182716] =$$
$$= 0{,}601834.$$

$$\begin{aligned} x_0 &= 1,1 + 0,1 \cdot \left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) = \\ &= 1,1 - 0,1\sqrt{\frac{1}{3}}, \\ x_1 &= 1,1 + 0,1\sqrt{\frac{1}{3}}, \\ w_0 &= 0,1 \cdot 1 = 0,1, \\ w_1 &= 0,1. \end{aligned}$$

Přesný výsledek: $e^{1,2} - e \doteq \underline{\underline{0{,}601835}}$.