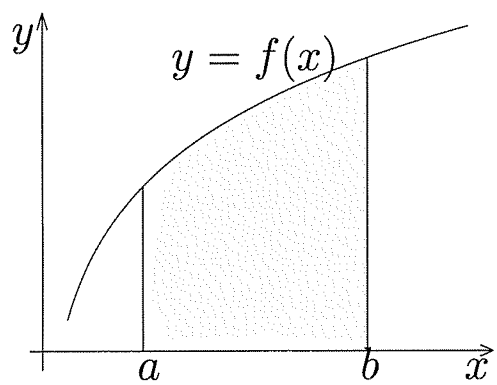
NUMERICKÉ INTEGROVÁNÍ

Formulace: Mějme na $\langle a, b \rangle$ dánu integrovatelnou funkci f Naším cílem je určit přibližnou hodnotu určitého integrálu

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

Poznámka: Geometrický význam integrálu $I(f)$ (viz obrázek) je obsah plochy mezi grafem funkce f a osou x na intervalu $\langle a, b \rangle$.



Numerické metody výpočtu integrálu užíváme zejména tehdy, když $I(f)$ není možno spočítat analyticky (velmi častý případ) nebo je sice analytické řešení možné, ale je velmi pracné. V případě že máme zadánu funkci f tabulkou, není ani jiný přístup možný.

Přirozený princip numerických metod pro výpočet integrálu vychází z aproximace funkce. Danou funkci f nahradíme její vhodnou aproximací φ a jako aproximaci integrálu $I(f)$ prohlásíme hodnotu integrálu $I(\varphi)$, tj.

$$I(f) \approx I(\varphi) = \int_a^b \varphi(x)\, dx.$$

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

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b \varphi(x)\,dx\right| \leq \int_a^b |f(x) - \varphi(x)|\,dx \leq$$

$$\leq (b-a)\underbrace{\sup_{x\in\langle a,b\rangle} |f(x) - \varphi(x)|}_{\varepsilon}.$$

Princip většiny metod na výpočet určitého integrálu $\int_a^b f(x)\,dx$ je založen na tom, že interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na N podintervalů $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ tak, že

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots\ldots < x_{N-1} < x_N = b.$$

Na těchto podintervalech nahradíme funkci f polynomem a integrujeme tento polynom.

Vzorce pro výpočet integrálu (tzv. **kvadraturní vzorce**)
na intervalech $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ ... **základní**
přes celý interval $\langle a, b\rangle$ ... **složený**
(složený kv. vzorec je součtem základních kv. vzorců).

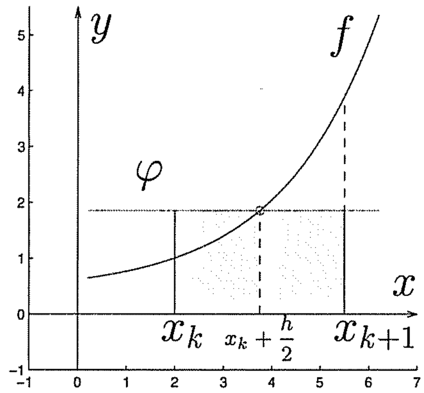
Pro jednoduchost předpokládáme, že jsou všechny podintervaly $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ stejně velké. Ekvidistantní uzly potom vyjádříme takto

$$x_k = x_0 + kh, \quad \text{kde} \quad k = 0, 1, \ldots, N-1 \quad \text{a} \quad h = \frac{b-a}{N}$$

Newtonovy-Cotesovy kvadraturní vzorce

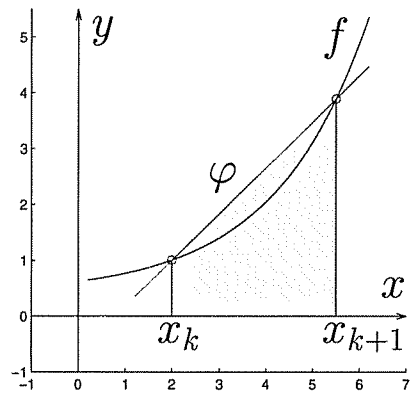
1) **Obdélníkové pravidlo** (f nahrazujeme konstantní funkcí φ)

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



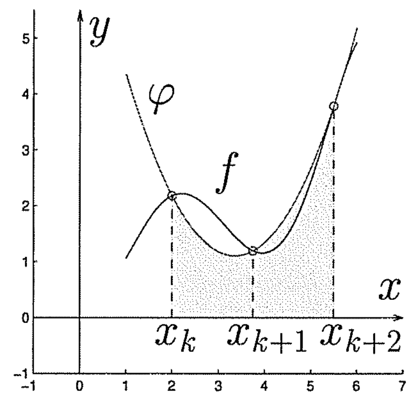
2) **Lichoběžníkové pravidlo** (f nahrazujeme lineární funkcí φ)

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



3) **Simpsonovo pravidlo** (f nahrazujeme kvadratickou funkcí φ)

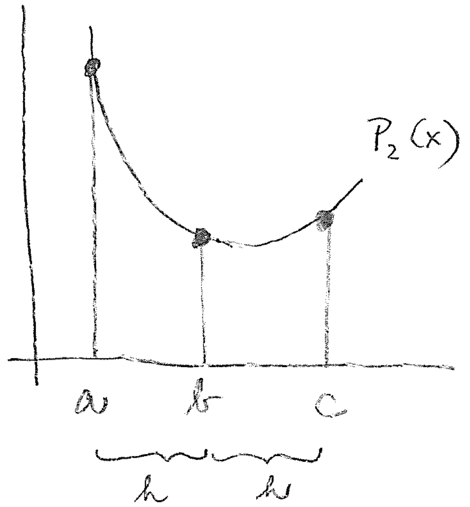
$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$
$$\approx \frac{h}{3}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] \equiv$$
$$\equiv S_Z(f,h)$$



Odvození Simpsonova pravidla

např. pomocí Lagrangeova int. pol.:

$$P_2(x) = f(a)\, l_a(x) + f(b)\, l_b(x) + f(c) \cdot l_c(x)$$



$$l_a(x) = \frac{(x-b)(x-c)}{(a-b)(a-c)} = \frac{(x-b)(x-c)}{2h^2}$$

$$l_b(x) = \frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} = \frac{(x-a)(x-c)}{-h^2}$$

$$l_c(x) = \frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)} = \frac{(x-a)(x-b)}{2h^2}$$

$$\int_a^c P_2(x)\,dx = \frac{f(a)}{2h^2}\int_a^c (x-b)(x-c)\,dx - \frac{f(b)}{h^2}\int_a^c (x-a)(x-c)\,dx +$$

$$+ \frac{f(c)}{2h^2}\int_a^c (x-a)(x-b)\,dx =$$

$$= \frac{f(a)}{2h^2}\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(b+c) + x\,bc\right]_a^c - \frac{f(b)}{h^2}\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(a+c) + x\,ac\right]_a^c +$$

$$+ \frac{f(c)}{2h^2}\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(a+b) + x\,ab\right]_a^c =$$

$= -\frac{1}{6}(2h)^3$ viz dále

$$= \frac{f(a)}{2h^2}\left[\frac{c^3}{3} - \frac{a^3}{3} - \left(\frac{c^2}{2} - \frac{a^2}{2}\right)(b+c) + (c-a)bc\right] - \frac{f(b)}{h^2}\left[\frac{c^3}{3} - \frac{a^3}{3} - \left(\frac{c^2}{2} - \frac{a^2}{2}\right)(a+c) + (c-a)ac\right]$$

$$+ \frac{f(c)}{2h^2}\left[\frac{c^3}{3} - \frac{a^3}{3} - \left(\frac{c^2}{2} - \frac{a^2}{2}\right)(a+b) + (c-a)ab\right] =$$

$$\frac{1}{6}(c-a)\left[2c^2 + 2ac + 2a^2 - 3(a+c)(b+c) + 6bc\right]$$

$$\frac{2h}{6}\left[2c^2 + 2ac + 2a^2 - 3(a+b)c - 3c^2 - 3ab + 6bc\right]$$

$$\frac{2h}{6}\left[-c^2 - ac + 3bc + 2a^2 - 3ab\right]$$

$$\underbrace{\underbrace{a^2-c^2}_{(a-c)(a+c)}}_{-2h} + 3b\underbrace{(c-a)}_{2h} + a\underbrace{(a-c)}_{-2h}$$

$$-\frac{2h}{6}\left[(a+c)2h + 2h\,3b - 2h \cdot a\right]$$

$$-\frac{4h^2}{6}\left[a+c-3b+a\right] = -\frac{4h^2}{6}\underbrace{\left(\underbrace{\frac{2a-2b}{-2h}}_{} + \underbrace{\frac{c-b}{h}}_{}\right)}_{-h}$$

$$= \frac{4h^3}{6} = \frac{2}{3}h^3$$

ze symetrie

$$\int_a^c P_2(x)\,dx = \frac{f(a)}{2h^2}\,\frac{2}{3}h^3 + \frac{f(b)}{h^2}\cdot\frac{1}{6}(2h)^3 + \frac{f(c)}{2h^2}\,\frac{2}{3}h^3$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(\underset{\substack{\downarrow\\ x_k}}{a}) + 4f(\underset{\substack{\downarrow\\ x_{k+1}}}{b}) + f(\underset{\substack{\downarrow\\ x_{k+2}}}{c})\right] = T_2(f,h)$$

Poznámka: Základní vzorce se odvodí snadno na základě geometrické interpretace. V případě, že chceme vyjádřit současně i vztahy pro chyby těchto vzorců, musíme použít k odvození Taylorův rozvoj.

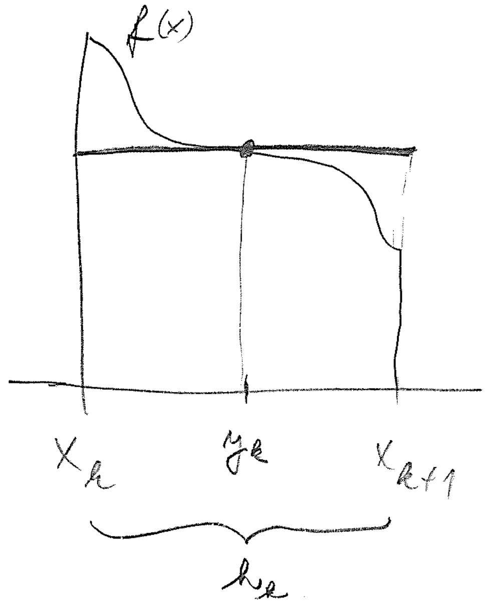
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = R_Z(f,h) + \frac{h^3}{24}\,f''(\xi)$$

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

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

Odvození pro obdélníkové pravidlo

Předpokládejme, že je integrovaná funkce f dostatečně hladká a použijme Taylorův polynom



označme $h_k = x_{k+1} - x_k$

$$y_k = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}$$

$$\boxed{f(x) = f(y_k) + (x - y_k) f'(y_k) + \frac{1}{2}(x - y_k)^2 f''(\xi_k) \qquad \xi_k \in \mathrm{int}\{y_k, x\}}$$

Potom platí:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = h_k \cdot f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) + \underbrace{\frac{1}{2}\left[(\overbrace{x_{k+1} - y_k}^{\frac{h_k}{2}})^2 - (\overbrace{x_k - y_k}^{-\frac{h_k}{2}})^2\right]}_{=0} \cdot f'\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) +$$

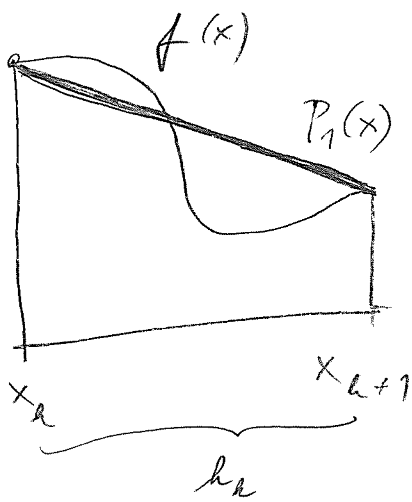
$$+ f''(\xi_k) \cdot \frac{1}{6}\left[\overbrace{(x_{k+1} - y_k)^3}^{\frac{h_k^3}{8}} - \overbrace{(x_k - y_k)^3}^{-\frac{h_k^3}{8}}\right]$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \underbrace{\boxed{h_k \cdot f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right)}}_{R_2(f, h_k)} + \frac{h_k^3}{24} \cdot f''(\xi_k)$$

chyba metody

Odvození pro lichoběžníkové pravidlo

Funkci f aproximujeme na $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ lineární funkcí, tj. interpolačním polynomem 1. stupně.



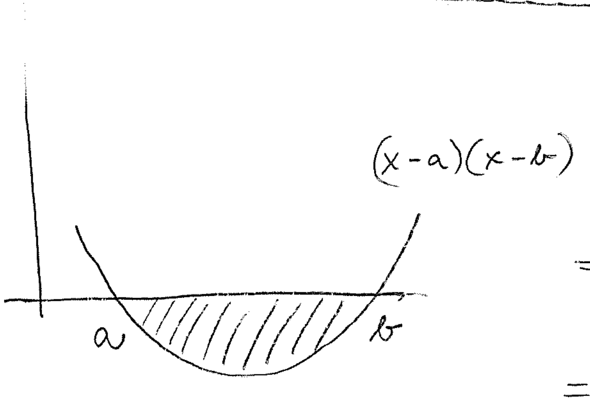
Z aproximační funkce známe:

$$\boxed{f(x) = P_1(x) + \frac{f''(\xi_k)}{2}(x-x_k)(x-x_{k+1}) \qquad \xi_k \in (x_k, x_{k+1})}$$

Potom platí:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \frac{h_k}{2}\left(f(x_k)+f(x_{k+1})\right) + \frac{f''(\xi_k)}{2}\int_{x_k}^{x_{k+1}}(x-x_k)(x-x_{k+1})\,dx$$

POMOCNÝ VÝPOČET



$$\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = \int_a^b \left(x^2 - x(a+b) + ab\right)dx =$$

$$= \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3} - \left(\frac{b^2}{2}-\frac{a^2}{2}\right)(a+b) + (b-a)ab =$$

$$= \frac{1}{3}(b-a)(b^2+ab+a^2) - \frac{1}{2}(b-a)(a+b)^2 + (b-a)ab$$

$$= \frac{1}{6}(b-a)\left[2b^2 + 2ab + 2a^2 - 3a^2 - 6ab - 3b^2 + 6ab\right] =$$

$$= \frac{1}{6}(b-a)\left[-a^2 + 2ab - b^2\right] = -\frac{1}{6}(b-a)^3$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \underbrace{\boxed{\frac{h_k}{2}\left(f(x_k)+f(x_{k+1})\right)}}_{T_2(f,h_k)} - \frac{h_k^3}{12} f''(\xi_k)$$

chyba metody

Příklad: Pomocí výše uvedených Newtonových-Cotesových vzorců vypočtěte integrál
$$\int_1^{1,2} e^x \, dx.$$

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

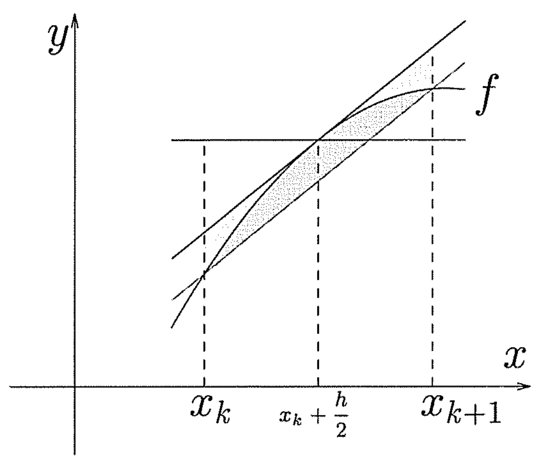
$R_Z(e^x; 0,2) = 0,2e^{1,1} \doteq 0{,}600833$ chyba: 0,001002

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

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

□

Poznámka: Všimněme si chyb. U obdélníkového pravidla vyšla chyba menší než u lichoběžníkového, přestože u lichoběžníkového pravidla jsme funkci f aproximovali „lepší“ funkcí φ (lineární). Chyba u Simpsonova pravidla vyšla menší než u ostatních. Tyto výsledky potvrzují vztahy pro chyby jednotlivých vzorců. Fakt, že obdélníkové pravidlo je přesnější než lichoběžníkové můžeme demonstrovat na obrázku:



Složené kv. vzorce získáme sečtením **základních** kv. vzorců:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;=\; \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \;\approx\; \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \varphi(x)\,dx$$

$$R(f,h) \;\equiv\; h\cdot \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k + \frac{h}{2})$$

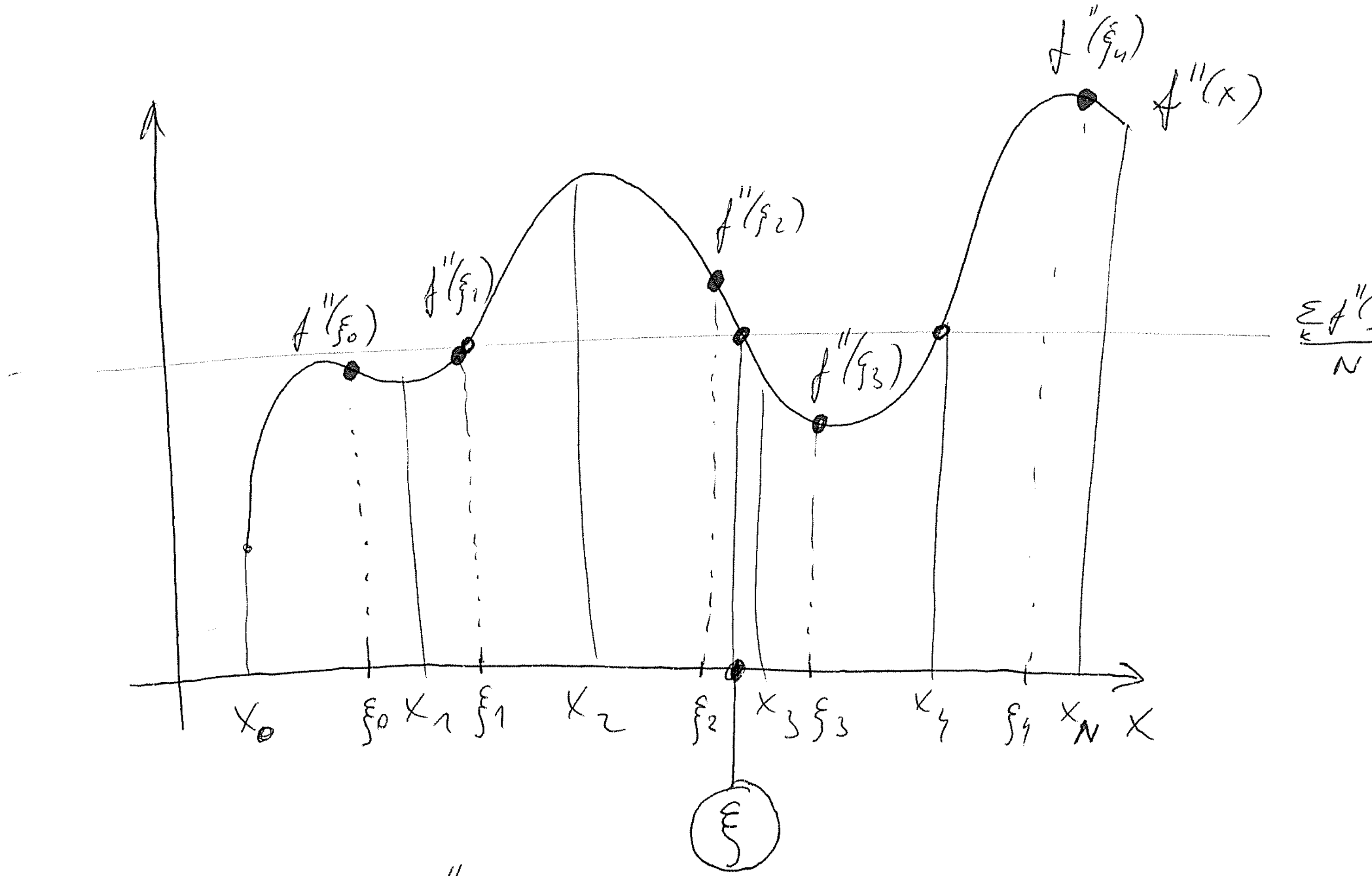
$$\begin{aligned} T(f,h) \;&\equiv\; \frac{h}{2}\,[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)] = \\ &= h\cdot \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + \frac{1}{2}f(x_N)\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S(f,h) \;&\equiv\; \frac{h}{3}\,[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \\ &+ \ldots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)] \end{aligned}$$

Pro chyby složených vzorců potom platí:

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

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{h^3}{24}\,f''(\xi_k) = \frac{h^3}{24}\sum_{k=0}^{N-1} f''(\xi_k) = \frac{h^3}{24}\,N\,f''(\xi) = \frac{h^3}{24}\,\frac{b-a}{h}\,f''(\xi)$$



ze spojitosti $f''(x)$

průměr hodnot leží mezi minimální a maximální

$$\min_k f''(\xi_k) \leq \frac{\sum_k f''(\xi_k)}{N} \leq \max_k f''(\xi_k)$$

$$\Downarrow$$

$$\exists\, \xi \in (x_0, x_N) \; : \quad f''(\xi) = \frac{\sum_k f''(\xi_k)}{N}$$

? ODHAD CHYBY ⇒ JAK DOSÁHNOUT POŽADOVANOU PŘESNOST ?

- ze vzorců lze odhadnout velikost chyby, případně určit krok h tak, aby chyba byla menší než předem zadaná tolerance

Př: Určete h tak, aby chyba lichoběžníkového pravidla pro výpočet $\boxed{I = \int_2^3 \frac{1}{(x-1)}\,dx}$ byla nejvýše 10^{-3}.

Musí platit:

$$\boxed{\frac{(b-a)}{12}\, h^2 \cdot \max_{x\in\langle 2,3\rangle} |f''(x)| \leq 10^{-3}}$$

→ je nutné odhadnout f'':

$$f' = -\frac{1}{(x-1)^2}$$

$$\left.\begin{array}{l} f'' = \dfrac{2}{(x-1)^3} \quad \text{na } \langle 2,3\rangle \text{ je } f''>0 \text{ (kladná)} \\ f''' = -\dfrac{3}{(x-1)^4} < 0 \Rightarrow f'' \text{ je klesající} \end{array}\right\} \Rightarrow$$

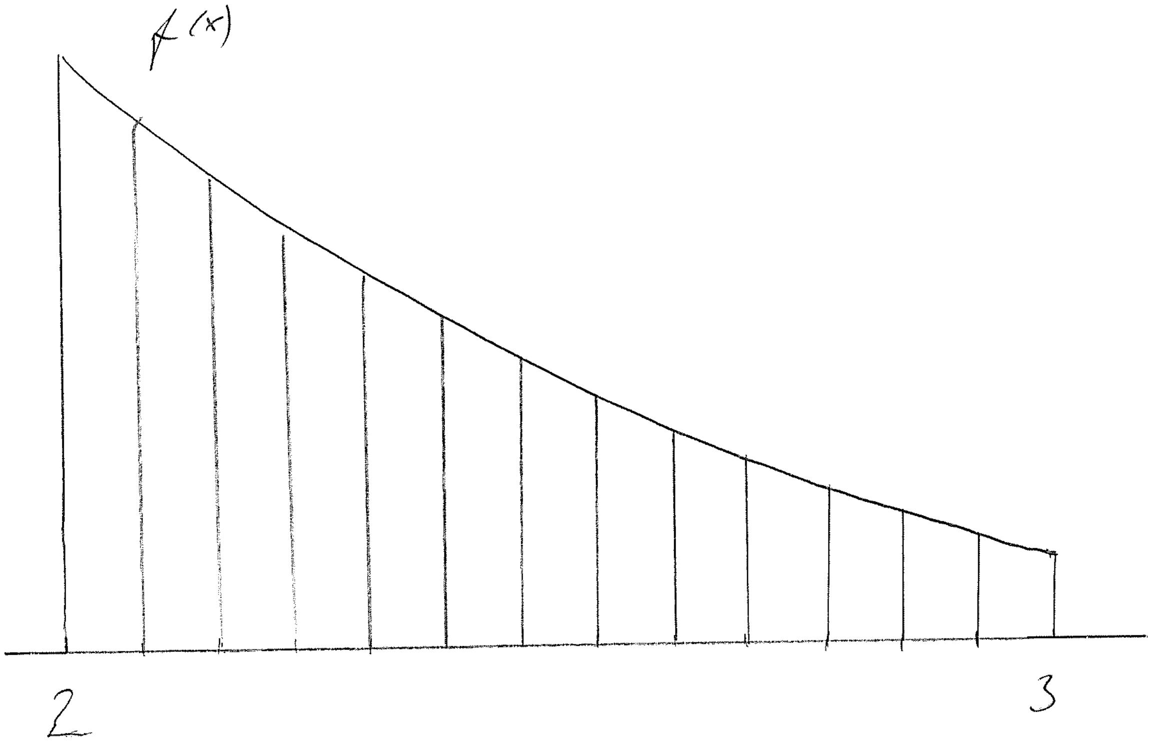
$$\Rightarrow \max_{x\in\langle 2,3\rangle} |f''(x)| = f''(2) = \frac{2}{(2-1)^3} = \underline{\underline{2}}$$

$$\boxed{\frac{1}{12} h^2 \cdot 2 \leq 10^{-3}} \Rightarrow h^2 \leq 6\cdot 10^{-3} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow N = \frac{b-a}{h} = \frac{1}{\sqrt{6\cdot 10^{-3}}} \doteq 12{,}9 \Rightarrow \boxed{N = 13}$$

nejbližší vyšší

$$\Rightarrow \boxed{h = \frac{1}{13}}$$



$$T\left(\frac{1}{(x-1)}, \frac{1}{13}\right) = \dots \doteq 0{,}69352$$

Přesná hodnota: $I = \left[\ln|x-1|\right]_2^3 = \ln 2 - \ln 1 =$

$$= \ln 2 \doteq 0{,}69315$$

Skutečná chyba: $\underline{\underline{3{,}7 \cdot 10^{-4} \leq 10^{-3}}}$

Nevýhody tohoto postupu:

- výrazy pro chybu obsahují derivaci (často vysokého řádu), které není lehké odhadovat
- výsledné odhady jsou většinou velmi pesimistické

- pro odhad chyby není vhodné zvyšovat řád použitého vzorce, protože Newton-Cotesovy vzorce nejsou konvergentní (zvyšujeme-li řád vzorce, nemusí konvergovat aproximace integrálu k korektní hodnotě)

- pro odhad chyby je vhodné užít metodu polovičního kroku (RICHARDSONOVA EXTRAPOLACE)

Richardsonova extrapolace

Předpokládejme, že výraz pro chybu má tvar

$$e(f) = h^k M, \quad h = \frac{b-a}{N}$$

Přesná hodnota integrálu je potom

$$I = K(h) + h^k M \tag{1}$$

Integrál vypočteme stejným vzorcem, ale s krokem $\frac{h}{2}$. Dostaneme

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

Dosadíme-li h^k do (5), získáme

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

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

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

Odtud plyne odhad chyby ε

$$\varepsilon \approx \frac{1}{2^k - 1}\left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h)\right]$$

a přesnější hodnota integrálu je potom

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

ROMBERGOVA METODA

Příklad: Pomocí lichoběžníkového pravidla vypočtěte $\int_1^5 \ln x \, dx$. Ke zpřesnění použijte Richardsonovu extrapolaci.

Řešení: Pro rozvoj chyby lichoběžníkového pravidla platí

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

Výsledky opět zapíšeme do tabulky

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

Pro kontrolu uveďme přesnou hodnotu integrálu:

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

$\square$

Přesnější hodnota integrálu:

$$\boxed{I = k\left(\tfrac{h}{2}\right) + \underbrace{\frac{1}{2^{k}-1}\left[k\left(\tfrac{h}{2}\right) - k(h)\right]}_{\varepsilon}}$$

měníme podle řádu eliminované chyby

ALGORITMUS:

Pro $s = 0, 1, 2, \dots \bar{s}$

$$T_{s0} = T(f, h_s)$$

Pro $k = 1, 2, \dots s$

$$T_{s,k} = T_{s,k-1} + \frac{T_{s,k-1} - T_{s-1,k-1}}{4^k - 1}$$

$h_0 = b - a$
$h_1 = \frac{1}{2} h_0$
$h_k = \frac{1}{2^k} h_0$

Schéma:

h	T_{00}			
$\frac{h}{2}$	T_{10}	T_{11}		
$\frac{h}{4}$	T_{20}	T_{21}	T_{22}	
$\frac{h}{8}$	T_{30}	T_{31}	T_{32}	T_{33}

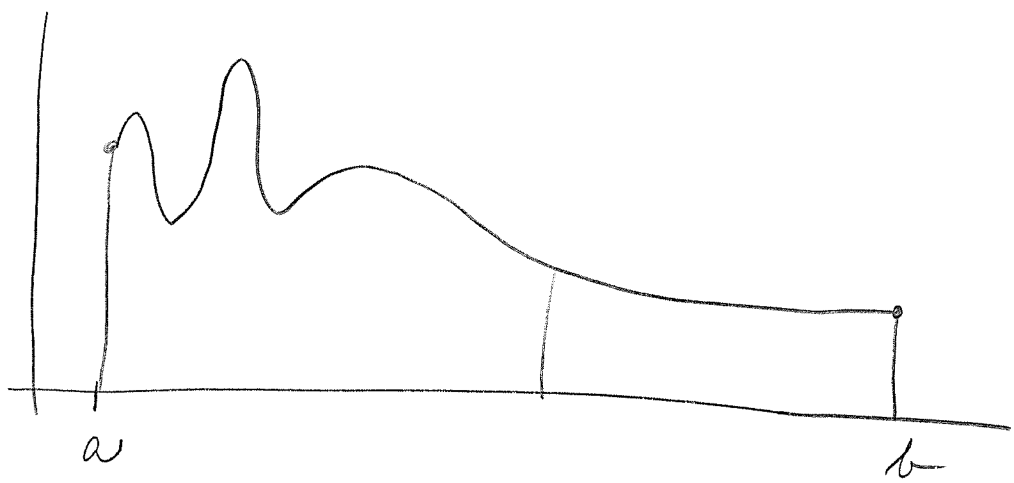
Všechny hodnoty T_{ik} jsou aproximací původního integrálu

Pro funkci f integrovatelnou v Riemannově smyslu platí $T_{ik} \to I(f)$ pro $i \to \infty$, $k = 0, 1, \dots$ a také $T_{kk} \to I(f)$ pro $k \to \infty$. Dále se dá ukázat, že celá procedura je <u>numericky stabilní</u>.

ADAPTIVNÍ INTEGROVÁNÍ

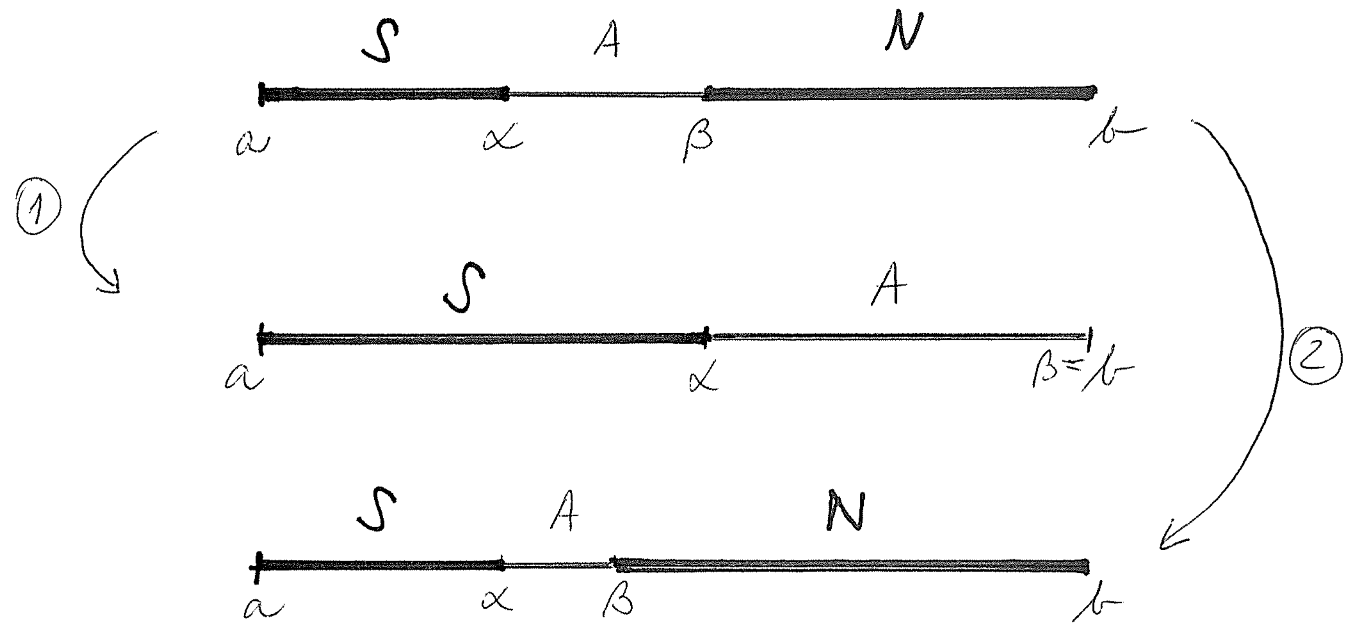
- intervaly integrace nejsou dány dopředu.
- určují se na základě splnění testu chyby založeném na odhadu pomocí metody polovičního kroku.

MOTIVACE: Pokud má integrovaná funkce např. tento průběh



je zřejmé, že na druhé části intervalu stačí pro splnění zadané tolerance brát větší kroky než v první části.

STAV



A... aktivní interval integrace

S... interval, na kterém je zajištěno splnění chybového testu

N... interval, přes který se ještě nespočítal dílčí integrál.

---

1 Je splněna podmínka na velikost chyby na intervalu A

2 Není splněna podmínka na velikost chyby na intervalu A

TEST CHYBY: (pomocí metody polovičního kroku)
- interval $\langle \alpha, \beta \rangle$ rozpůlíme a použijeme stejný vzorec

$$\mathcal{E}_f(\alpha,\beta) \approx \frac{1}{2^k-1}\left[I_{\langle\alpha,\beta\rangle}\left(\frac{h}{2}\right) - I_{\langle\alpha,\beta\rangle}(h)\right]$$

$$\boxed{\mathcal{E}_f(\alpha,\beta) \leq \varepsilon \, \frac{\beta-\alpha}{b-a}}$$

(k... řád chyby vzorce)

ε ... celková požadovaná přesnost

$\boxed{\text{ALGORITMUS}}$

na začátku: $A = \langle a, b \rangle$

$N = \emptyset$

$S = \emptyset$

$I_S = 0 \qquad \left(I_S \approx \int_a^{\alpha} f(x)\,dx \right)$

① je splněn TEST CHYBY:

(i) $I_S := I_S + I_A$

(ii) $S = S \cup A \; ; \quad A = N$

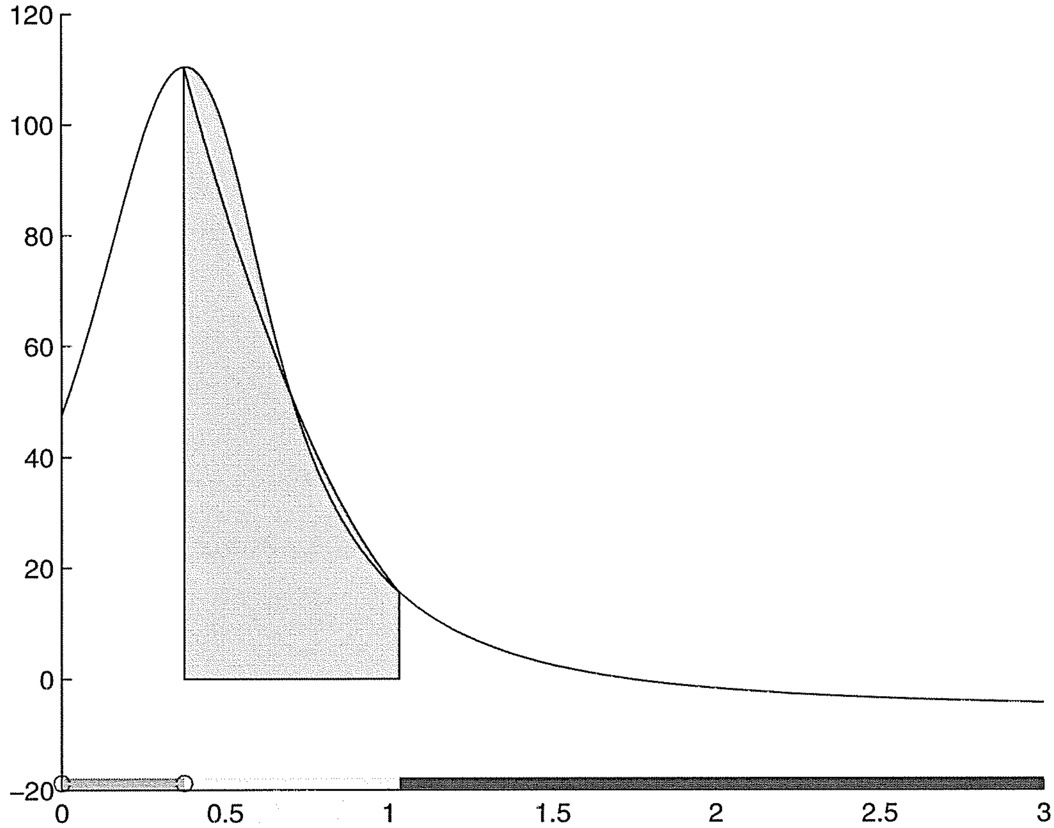
② není splněn TEST CHYBY:

(i) A rozpůlíme, tj. $A = \langle \alpha, \frac{\alpha+\beta}{2} \rangle$

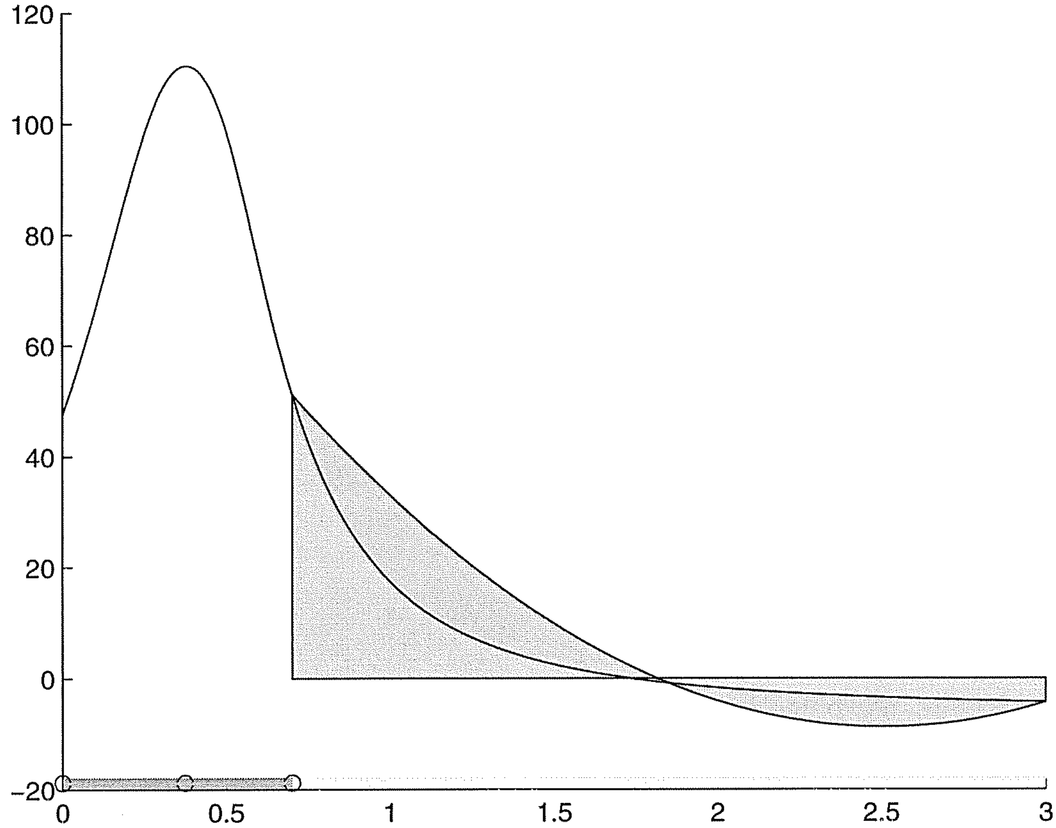
(ii) $N := N \cup \langle \frac{\alpha+\beta}{2}, \beta \rangle$

(iii) nový TEST CHYBY

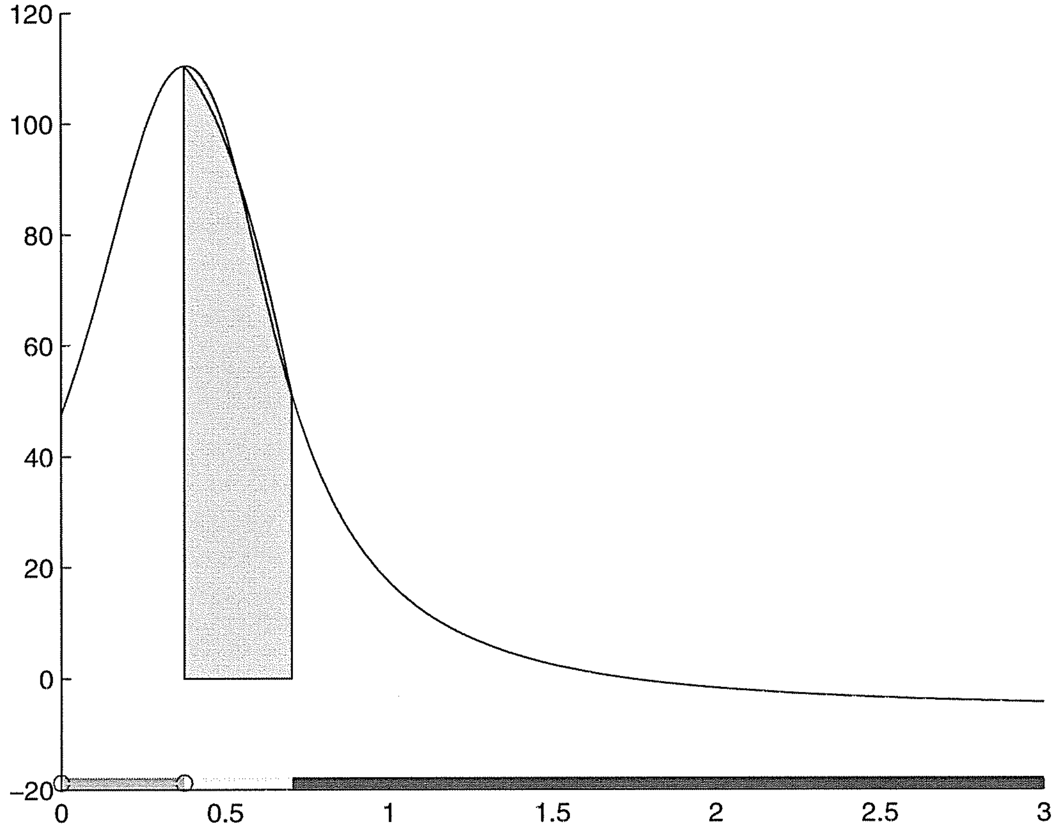
① a ② opakujeme dokud $S \neq \langle a, b \rangle$



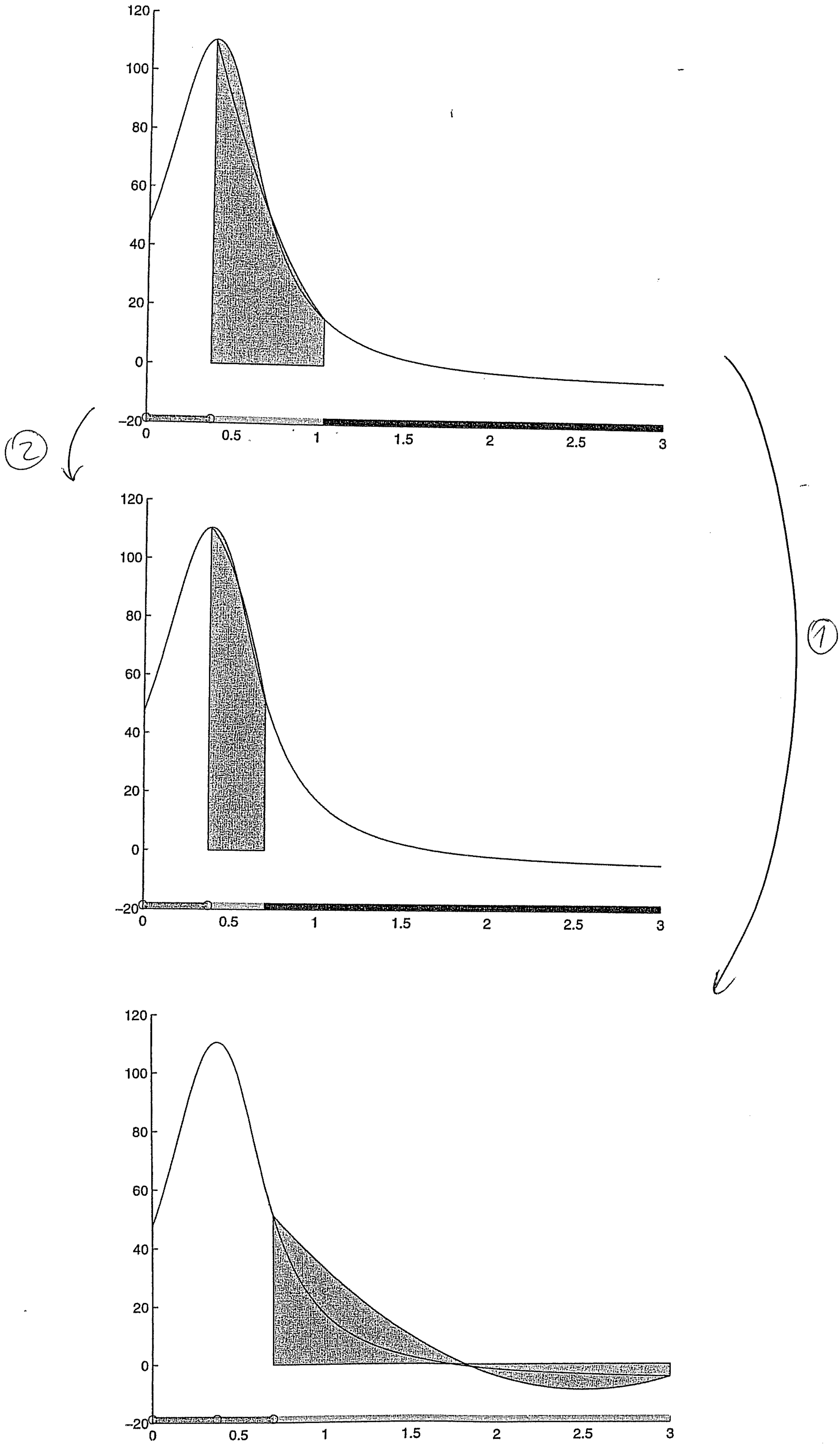
120
100
80
60
40
20
0
−20
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3



120
100
80
60
40
20
0
−20
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

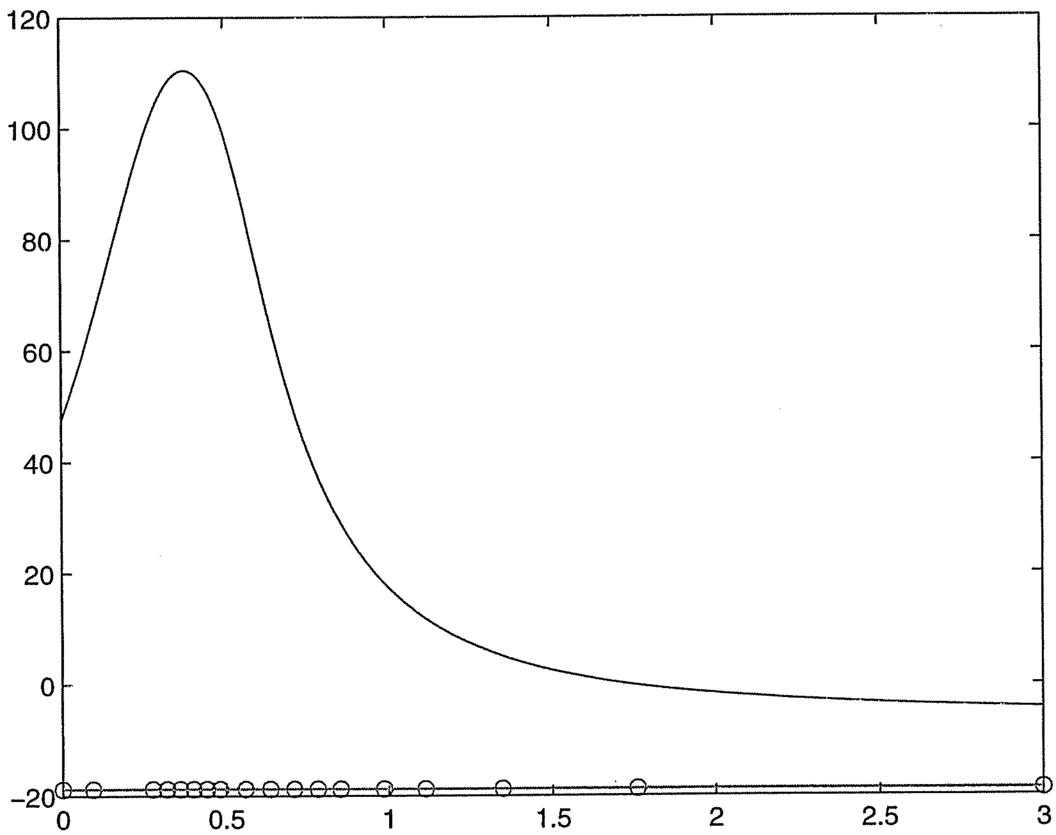


120
100
80
60
40
20
0
−20
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

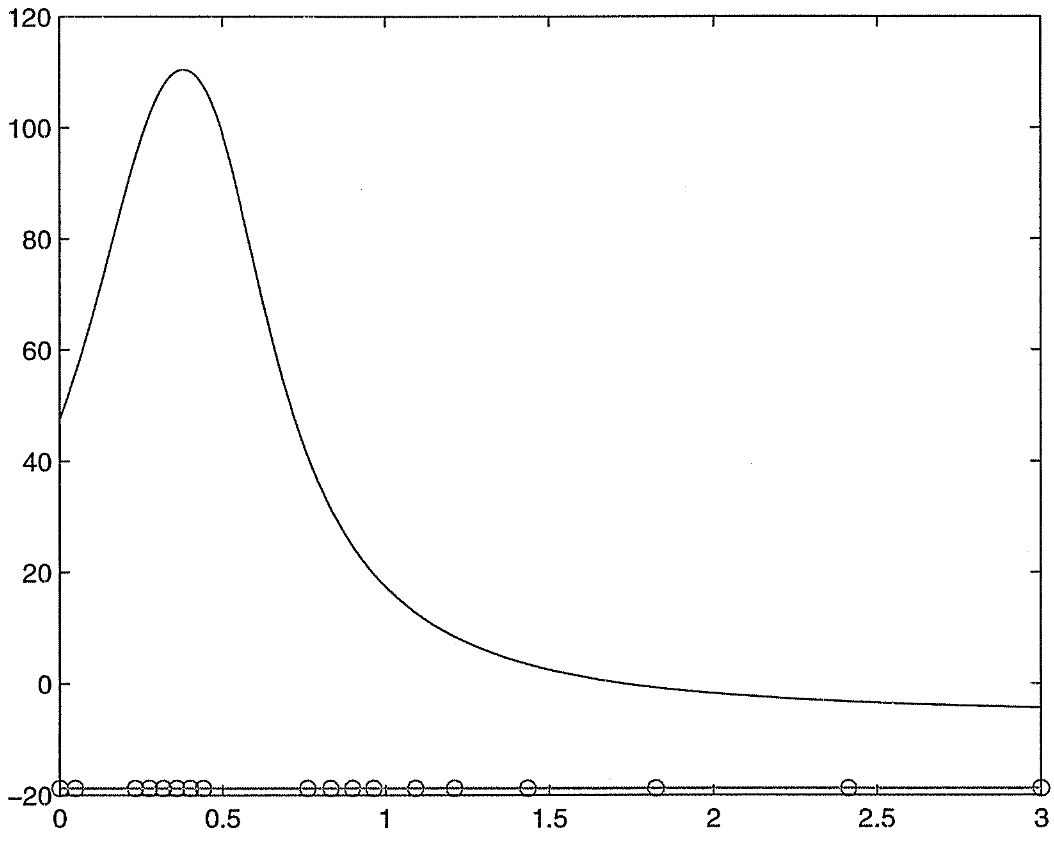


120
100
80
60
40
20
0
−20
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
2
1

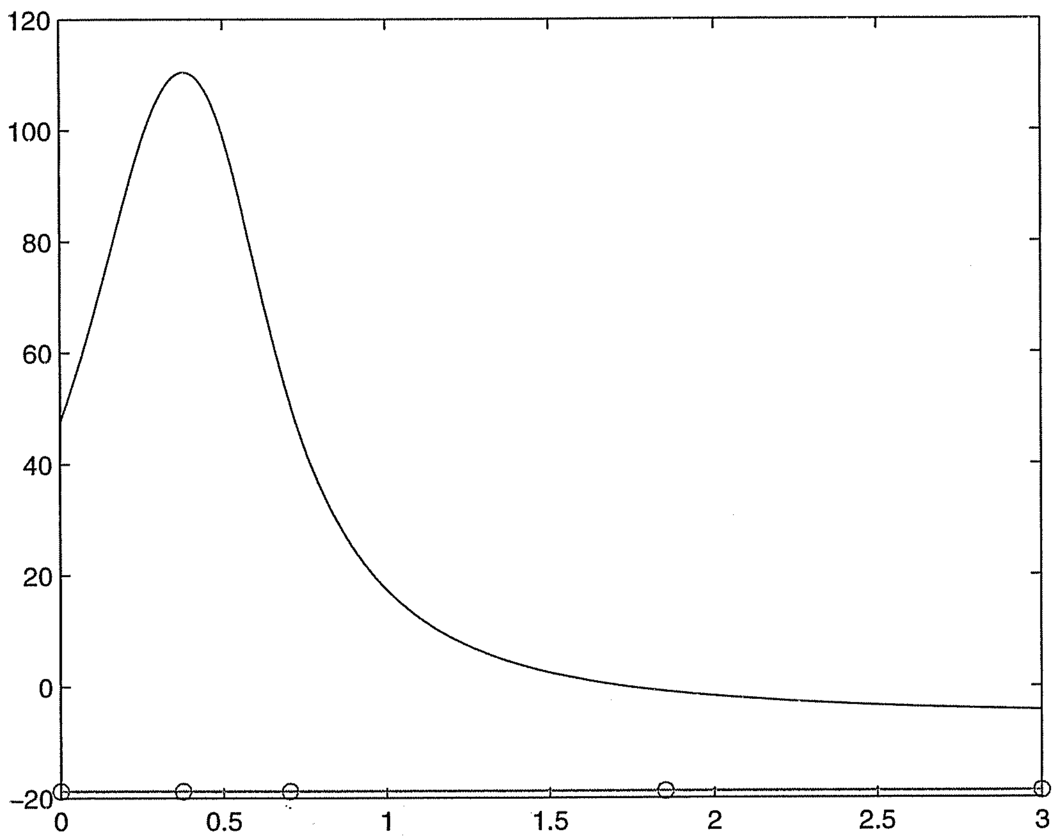
```
---------------------------------------------------------------------
  Adaptivni numericky vypocet urciteho integralu funkce
  f(x)=1 /((0.3*x-.1)^2+.01)+1/((x-.5)^2+.04)-6
  na intervalu <0.000000,3.000000>
  se zadanou presnosti 0.250000
  Pro vypocet se pouzije obdelnikove pravidlo I_O.
---------------------------------------------------------------------
  Presna hodnota integralu ....... 69.800931
  Vypoctena hodnota integralu .... 69.784747
  Skutecna chyba ................. 0.016184
  Odhadnuta chyba ................ 0.110713
  Pocet podintervalu ............. 17
  Celkovy pocet deleni intervalu
    pro dodrzeni odhadu chyby .... 94
---------------------------------------------------------------------
```



```
----------------------------------------------------------------------
  Adaptivni numericky vypocet urciteho integralu funkce
  f(x)=1 /((0.3*x-.1)^2+.01)+1/((x-.5)^2+.04)-6
  na intervalu <0.000000,3.000000>
  se zadanou presnosti 0.250000
  Pro vypocet se pouzije lichobeznikove pravidlo I_L.
----------------------------------------------------------------------
  Presna hodnota integralu ....... 69.800931
  Vypoctena hodnota integralu .... 69.686611
  Skutecna chyba ................. 0.114320
  Odhadnuta chyba ................ -0.084305
  Pocet podintervalu ............. 17
  Celkovy pocet deleni intervalu
    pro dodrzeni odhadu chyby .... 89
----------------------------------------------------------------------
>>
```



```
----------------------------------------------------------------------
  Adaptivni numericky vypocet urciteho integralu funkce
  f(x)=1 /((0.3*x-.1)^2+.01)+1/((x-.5)^2+.04)-6
  na intervalu <0.000000,3.000000>
  se zadanou presnosti 0.250000
  Pro vypocet se pouzije Simpsonovo pravidlo I_S.
----------------------------------------------------------------------
  Presna hodnota integralu ....... 69.800931
  Vypoctena hodnota integralu .... 69.849993
  Skutecna chyba ................. -0.049061
  Odhadnuta chyba ................ -0.073144
  Pocet podintervalu ............. 4
  Celkovy pocet deleni intervalu
    pro dodrzeni odhadu chyby .... 11
----------------------------------------------------------------------
>>
```

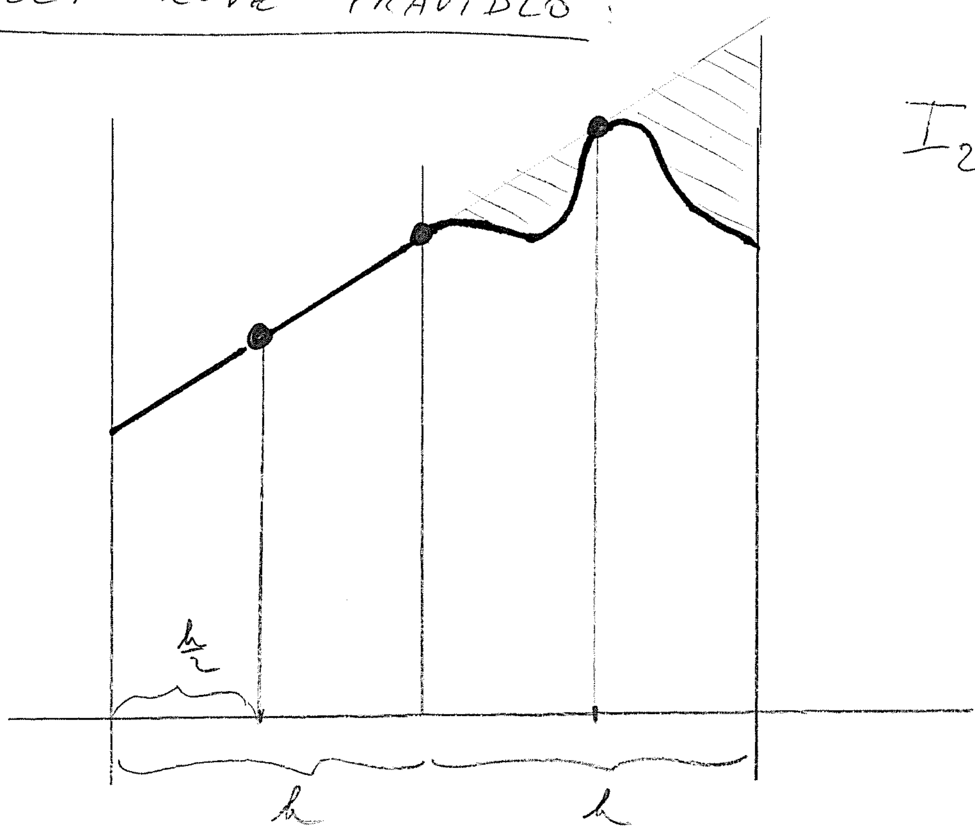


Poznámka

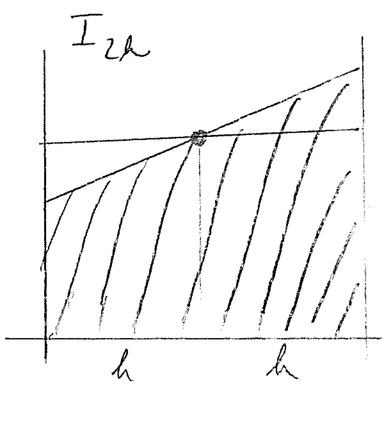
Odhadujeme-li chybu pomocí metody polovičního kroku, nemusí být skutečná chyba menší než zadaná tolerance

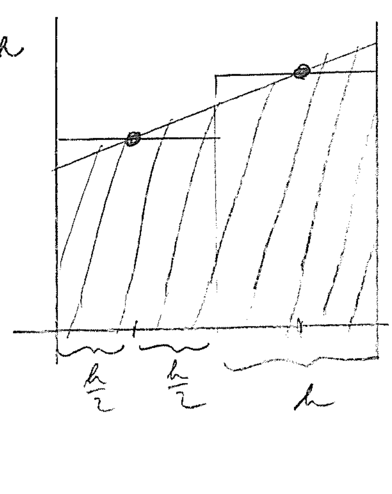
Příklady v nichž je splněn TEST CHYBY, ale chyba je ve skutečnosti větší než zadaná tolerance

- OBDÉLNÍKOVÉ PRAVIDLO:

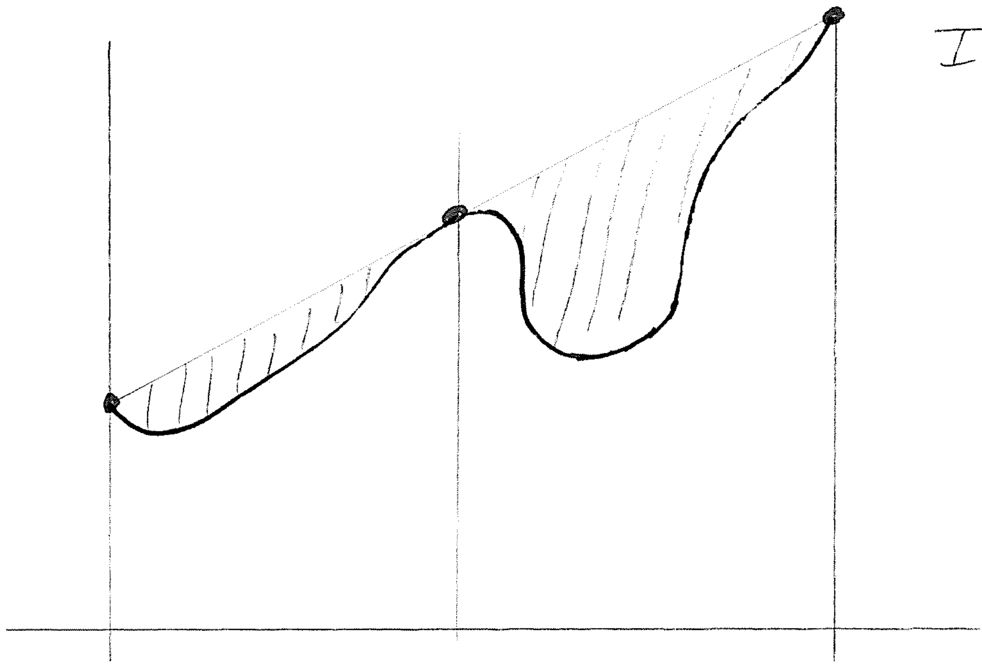


$$I_{2h} = I_h$$



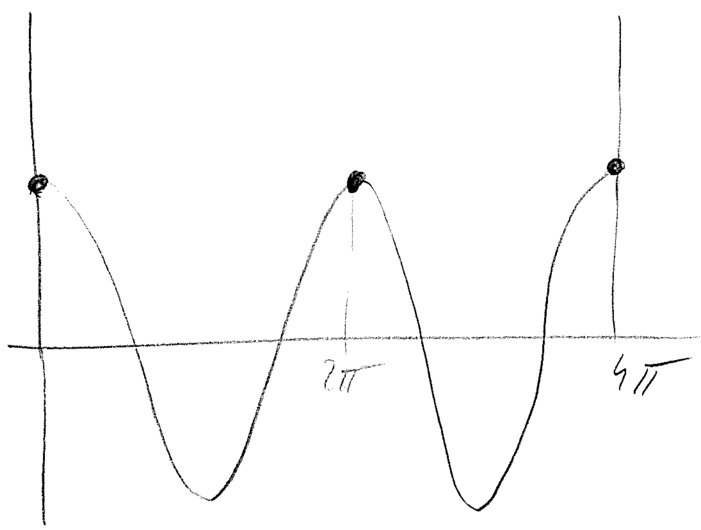


◦ LICHOBĚŽNÍKOVÉ PRAVIDLO:



$$I_{2h} = I_h$$

<u>např.</u>: $\int_0^{4\pi} \cos x \, dx$, tolerance $\varepsilon = 10^{-5}$



$I_{4\pi} = 1 \cdot 4\pi$ $\qquad$ $I_{2\pi} = 1 \cdot 2\pi + 1 \cdot 2\pi = 4\pi$

odhad chyby $\left(I_{2\pi} - I_{4\pi}\right) \cdot \frac{1}{3} = 0$

Přesná hodnota: $\int_0^{4\pi} \cos x \, dx = 0$

Chyba skutečná: 4π

Poznámka:

Newtonovy-Cotesovy vzorce používají $(m+1)$ ekvidistantních uzlů a integrují přesně polynomy až do m-tého stupně (máme na mysli základní vzorce na intervalu (x_k, x_{k+m})). Pro zvýšení přesnosti by se mohlo zdát výhodné použít více uzlů a funkci f aproximovat polynomem vyššího řádu. Ze zkušeností z aproximace funkce polynomem ovšem víme, že limitní případ polynomu stupně $m \to \infty$ nemusí odpovídat původní funkci (říkáme, že Newton-Cotesovy vzorce **nejsou konvergentní**).

Gaussovy kvadraturní vzorce

Princip:

snažíme se , aby kvadraturní vzorec integroval přesně polynomy co možná nejvyššího řádu. Obecně kvadraturní vzorec (základní) uvažujeme ve tvaru

$$K(f) = \sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i),$$

kde w_i jsou tzv.*váhy* a x_i jsou *uzly.*

Máme-li, že na základním intervalu $m+1$ bodů, potom nejvyšší možný stupeň polynomu, který ještě kvadraturní vzorec integruje přesně, je $2m+1$ (**algebraický řád přesnosti**).

Počet parametrů kvadraturního vzorce je $2m+2$
- polovina pro váhy w_i
- polovina pro uzly x_i

(Newton-Cotesovy vzorce integrovaly přesně polynomy do stupně m.)
Cenou za vyšší přesnost budou ovšem **neekvidistantní uzly**.

Příklad: Určete Gaussův kvadraturní vzorec pro $m = 0$ (tj. v intervalu uvažujeme pouze jeden uzel) a pro interval $\langle -1, 1 \rangle$.

Řešení: Kvadraturní vzorec pro $m = 0$ má tvar

$$K(f) = w_0 f(x_0),$$

kde vystupují 2 neznámé w_0 a x_0. Vzorec musí přesně integrovat:

1) konstantu

$$\int_{-1}^{1} b\,dx = 2b \overset{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{b} \quad \Rightarrow \quad w_0 = 2.$$

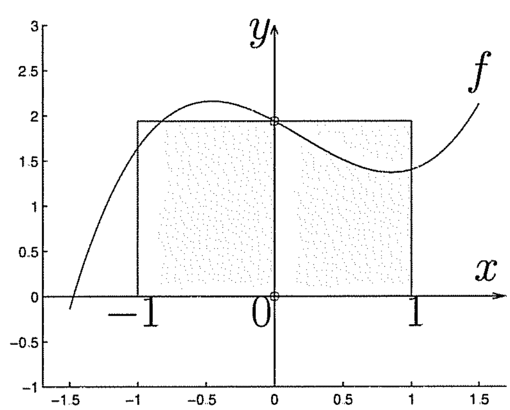
2) lineární funkci

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

$$\Rightarrow \quad 2b = 2(ax_0 + b) \Rightarrow x_0 = 0.$$

Nejjednodušší Gaussův kvadraturní vzorec je

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



$\square$

Příklad: Určete Gaussův kvadraturní vzorec pro $m = 1$ (tj. v intervalu uvažujeme dva uzly) a pro interval $\langle -1, 1\rangle$.

Řešení: Kvadraturní vzorec pro $m = 1$ má tvar

$$K(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1),$$

kde vystupují 4 neznámé w_0, w_1, x_0 a x_1.
Vzorec musí přesně integrovat polynom až 3 stupně:

$$\int_{-1}^{1} \left(ax^3 + bx^2 + cx + d\right)\,\mathrm{d}x = \left[a\frac{x^4}{4} + b\frac{x^3}{3} + c\frac{x^2}{2} + dx\right]_{-1}^{1} =$$

$$= 0 \cdot a + \frac{2}{3}b + 0 \cdot c + 2d \overset{\text{pož.}}{=}$$

$$\overset{\text{pož.}}{=} w_0 \underbrace{\left(ax_0^3 + bx_0^2 + cx_0 + d\right)}_{f(x_0)} + w_1 \underbrace{\left(ax_1^3 + bx_1^2 + cx_1 + d\right)}_{f(x_1)} = K(f).$$

Soustava nelineárních rovnic pro 4 neznámé:

$$a\colon\quad w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 = 0 \qquad (1)$$

$$b\colon\quad w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 = \frac{2}{3} \qquad (2)$$

$$c\colon\quad w_0 x_0 + w_1 x_1 = 0 \qquad (3)$$

$$d\colon\quad w_0 + w_1 = 2 \qquad (4)$$

$$
\begin{aligned}
&(1)\text{–}(3): \quad w_0x_0(x_0^2-1)+w_1x_1(x_1^2-1)=0. \\
&(2)\text{–}(4): \quad w_0(x_0^2-1)+w_1(x_1^2-1)=-\frac{4}{3} \quad /\cdot(-x_1)^{\dagger} \quad /\cdot(-x_0)^{\ddagger}
\end{aligned}
$$

$$
\left.
\begin{array}{lrcl}
\dagger & \underbrace{w_0(x_0-x_1)}(x_0^2-1) & = & \frac{4}{3}x_1 \\
\ddagger & \underbrace{w_1(x_1-x_0)}(x_1^2-1) & = & \frac{4}{3}x_0 \\
(3) \text{ a } (4) \Rightarrow & w_1 & = & 2-w_0 \\
 & w_0x_0+(2-w_0)x_1 & = & 0 \\
 & \underbrace{w_0(x_0-x_1)} & = & -2x_1
\end{array}
\right\} \Rightarrow
$$

$$
-2x_1(x_0^2-1)=\frac{4}{3}x_1 \;\Rightarrow\; -2(x_0^2-1)=\frac{4}{3} \;\Rightarrow\; x_0^2-1=-\frac{2}{3} \;\Rightarrow\; x_0^2=\frac{1}{3}
$$

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

analogicky:

$$
\left.
\begin{array}{lrcl}
(3) \text{ a } (4) \Rightarrow & w_0 & = & 2-w_1 \\
 & (2-w_1)x_0+w_1x_1 & = & 0 \\
 & \underbrace{w_1(x_1-x_0)} & = & -2x_0
\end{array}
\right\} \Rightarrow
$$

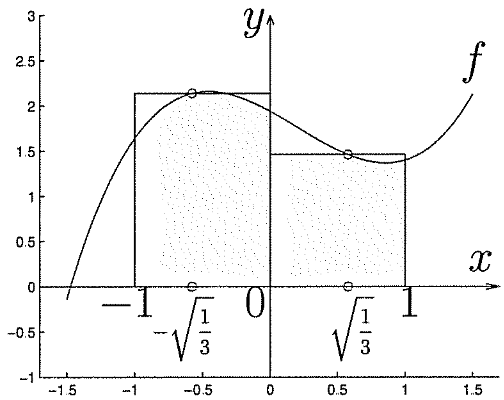
$$
-2x_0(x_1^2-1)=\frac{4}{3}x_0 \;\Rightarrow\; -2(x_1^2-1)=\frac{4}{3} \;\Rightarrow\; x_1^2-1=-\frac{2}{3} \;\Rightarrow\; x_1^2=\frac{1}{3}
$$

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

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

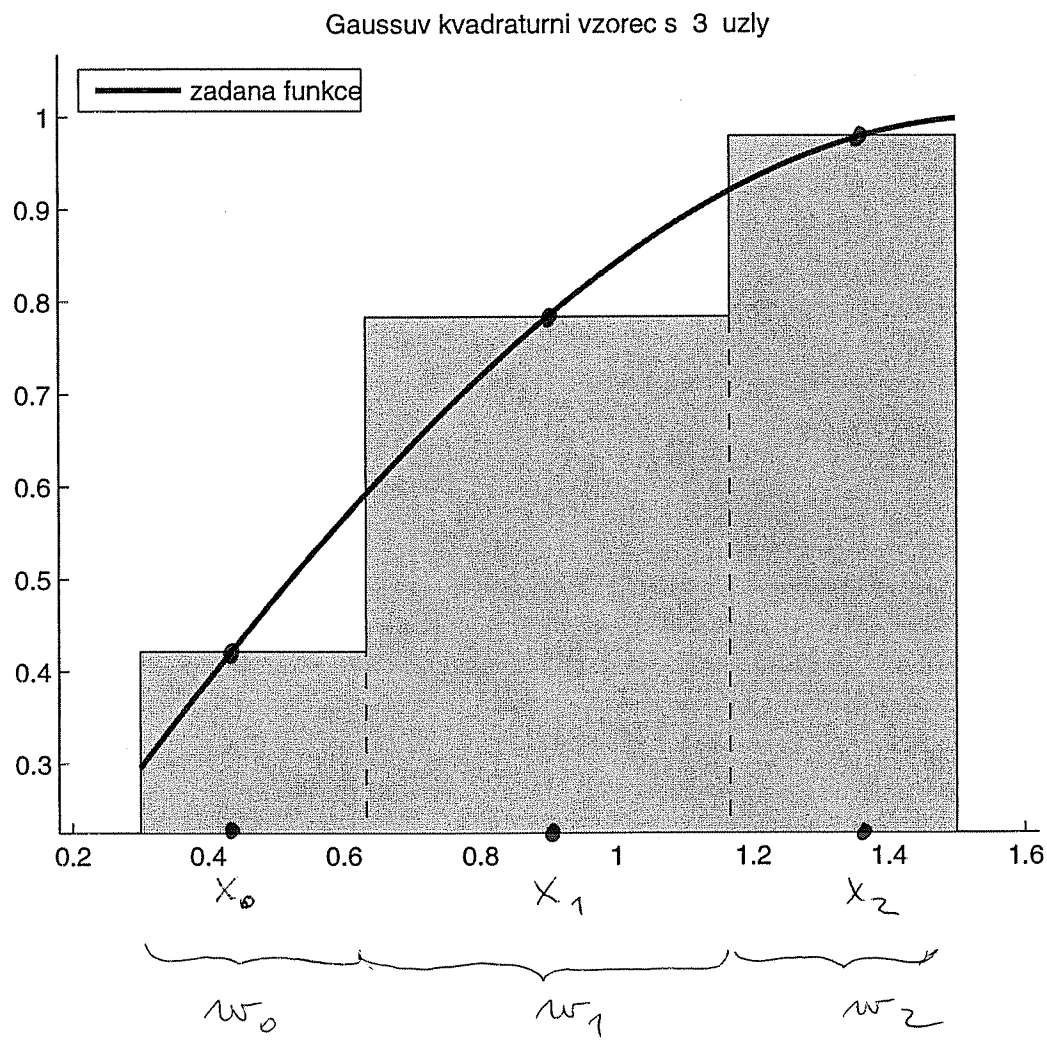
Dostáváme vztah:

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



Poznámka: Další Gaussův kvadraturní vzorec (pro $m = 2$) vypadá takto:

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



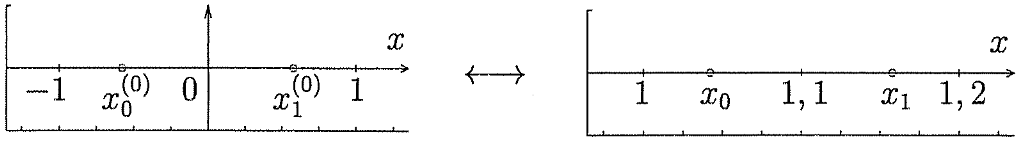
Poznámka:
Koeficienty a uzly vzorců vyšších řádů jsou uvedeny v tabulkách.

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

Poznámka:
Gaussovy kvadraturní vzorce jsou konvergentní.

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

Řešení:



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

$n = 0$

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

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

$n = 1$

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

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

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

SPECIÁLNÍ ÚLOHY

I. **Integrování periodické funkce přes periodu**

Pro lichoběžníkové pravidlo platí:

$$\boxed{T(f,h) = \int_a^b f(x)\,dx + \frac{h^2}{12}\left[f'(b) - f'(a)\right] - \frac{h^4}{720}\left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right] + \dots}$$

(srv. Eulerův–Maclaurinův vzorec)

(souvislost s rozvojem chyby:

$$T(f,h) = \int_a^b f(x)\,dx + \frac{h^2}{12}\underbrace{f''(x)}_{\frac{f'(b)-f'(a)}{b-a}}(b-a) + \frac{h^4}{720}\underbrace{f^{(4)}(x)}_{\frac{f'''(b)-f'''(a)}{b-a}}(b-a) + \dots$$

)

Pro hladkou periodickou funkci s periodou na intervalu $\langle a, b\rangle$ platí:

$$f'(a) = f'(b)$$
$$f^{(3)}(a) = f^{(3)}(b)$$
$$\vdots$$

Pozor: Obecně nemusí platit, že $T(f,h)$ je přesná hodnota integrálu $\int_a^b f(x)\,dx$, protože zbytek má tvar

$$\boxed{(b-a)\, c_{2m}\, h^{2m} f^{(2m)}(\xi)}$$ a ξ neznáme

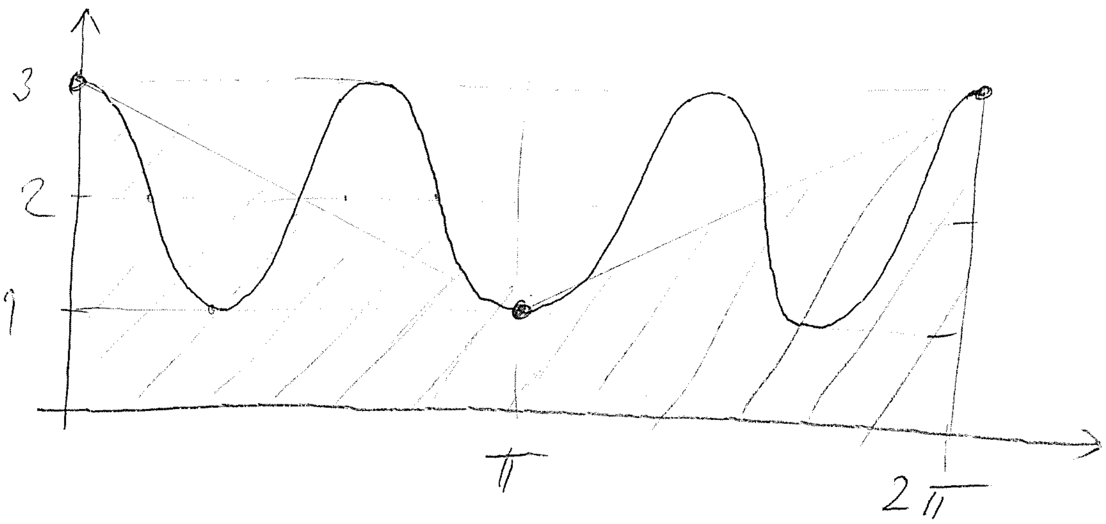
Platí však, že chyba je velikosti $O(h^{2m})$ pro libovolné m takové, že f má spojitou $2m$-tou derivaci.

Proto není nutné používat Rombergovu metodu.

Příklad: Vypočtěte složeným lichoběžníkovým pravidlem

$$\int_0^{2\pi} (2 + \cos 3x)\, dx$$

Přesná hodnota: 4π



zvolíme krok $h = \pi$, tj. $N = 2$

$$T(f, \pi) = \frac{\pi}{2}\left[f(0) + 2 \cdot f(\pi) + f(2\pi)\right]$$

$$= \frac{\pi}{2}\left[3 + 2 \cdot 1 + 3\right] = 4\pi$$

Platí: Složené lich. pravidlo s $(k+2)$ uzly integruje přesně trigonometrické polynomy k-tého stupně a stupně menších (tj. obsahující členy $\cos kx$, $\sin kx$) přes periodu 2π.

II. $\boxed{\text{Nevlastní integrály}}$

Při výpočtu integrálu $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx}$ budeme většinou předpokládat, že hodnoty funkce f a vyšší derivace f jsou vně nějakého intervalu $\langle -R, R\rangle$ dostatečně malé. Proto je vhodné použít lichoběžníkové pravidlo pro integrál $\boxed{\int_{-R}^{R} f(x)\,dx}$.

<u>Příklad</u>: Vypočtěte integrál $I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx$.

Pro $|x| \geq 4$ je integrand menší než $0{,}5 \cdot 10^{-6}$ a jeho první derivace menší než 10^{-6}. Použijeme-li lichoběžníkové pravidlo pro $\langle -4, 4\rangle$, dostaneme:

$$T(f,1) = 1{,}772636$$
$$T(f;0{,}5) = 1{,}772453$$

Přesná hodnota: $I = \sqrt{\pi} = 1{,}7724538$.

Poznamenejme, že $\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx - \int_{-4}^{4} e^{-x^2}\,dx\right| < 10^{-7}$. ∎

Při výpočtu integrálu $\boxed{\int_{0}^{\infty} f(x)\,dx}$ můžeme použít transformaci $x = \varphi(t)$.

a) $x = -\ln t$, $dx = -\frac{dt}{t}$

x	0	∞
t	1	0

$$\int_0^{\infty} f(x)\,dx = -\int_1^0 f(-\ln t)\,\frac{dt}{t} = \int_0^1 f(-\ln t)\cdot\frac{dt}{t}$$

b) $x = \frac{t}{1-t}$, $dx = (1-t)^{-2}\,dt$

x	0	∞
t	0	1

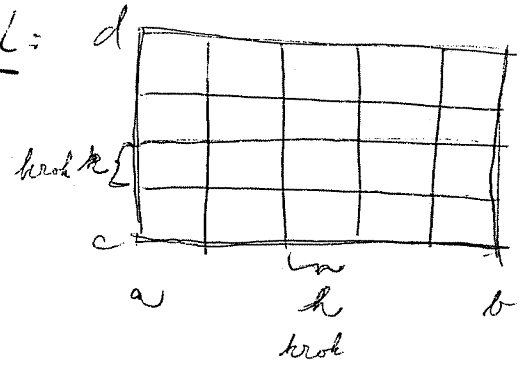
$$\int_0^{\infty} f(x)\,dx = \int_0^1 f\left(\frac{t}{1-t}\right)\frac{dt}{(1-t)^2}$$

INTEGROVÁNÍ FUNKCÍ 2 PROMĚNNÝCH

Odvoďte obdélníkové a lichoběžníkové pravidlo pro integrování fce dvou proměnných na obdélníku $\langle a, b\rangle \times \langle c, d\rangle$, tj.

$$\int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\,dy\right)dx$$

Řešení:



$$h = \frac{b-a}{N}$$

$$k = \frac{d-c}{M}$$

$$\begin{pmatrix} x_k = a + k \cdot h \\ y_L = c + L \cdot k \end{pmatrix}$$

$$\int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\, dy \right) dx =$$

obdélníkové pr.:

$$= h \cdot \sum_{k=0}^{N-1} \left(\int_c^d f\left(x_k + \frac{h}{2}, y\right) dy \right) =$$

$$= h \cdot \sum_{k=0}^{N-1} \left(k \cdot \sum_{L=0}^{M-1} f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_L + \frac{k}{2}\right) \right) =$$

$$= h \cdot k \cdot \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{L=0}^{M-1} f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_L + \frac{k}{2}\right)$$

lichoběžníkové pr.:

$$= \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left(\int_c^d [f(x_k, y) + f(x_{k+1}, y)]\, dy \right) =$$

$$= \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{k}{2} \sum_{L=0}^{M-1} [f(x_k, y_L) + f(x_k, y_{L+1})] + \frac{k}{2} \sum_{L=0}^{M-1} [f(x_{k+1}, y_L) + f(x_{k+1}, y_{L+1})] \right)$$

$$= \frac{h}{2} \cdot \frac{k}{2} \cdot \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{L=0}^{M-1} [f(x_k, y_L) + f(x_k, y_{L+1}) + f(x_{k+1}, y_L) + f(x_{k+1}, y_{L+1})]$$