TRIAL

Kapitola 10. Numerické integrování

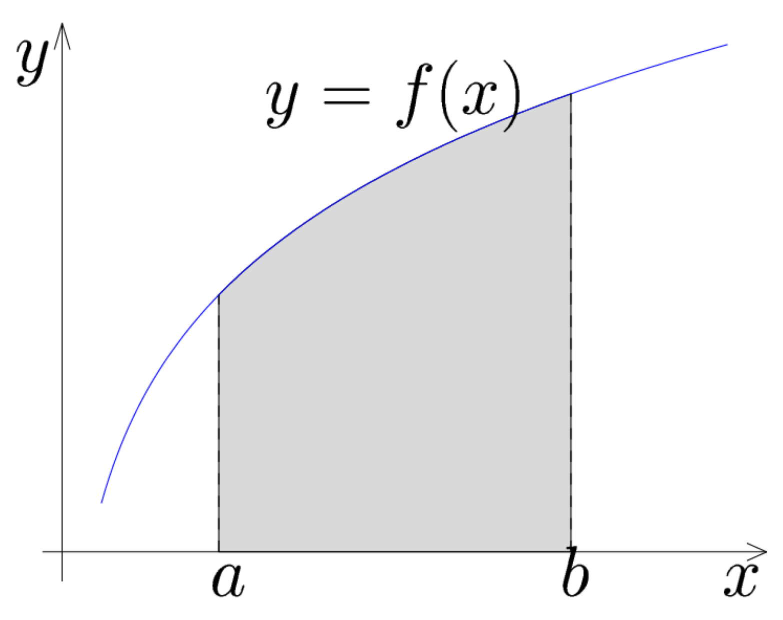
Numerický výpočet hodnoty určitého integrálu

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

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

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.

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

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 $I(f)$.

TRIAL

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

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

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

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

Vzorce pro výpočet určitého integrálu (tzv. **kvadraturní vzorce**) dělíme na:

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.

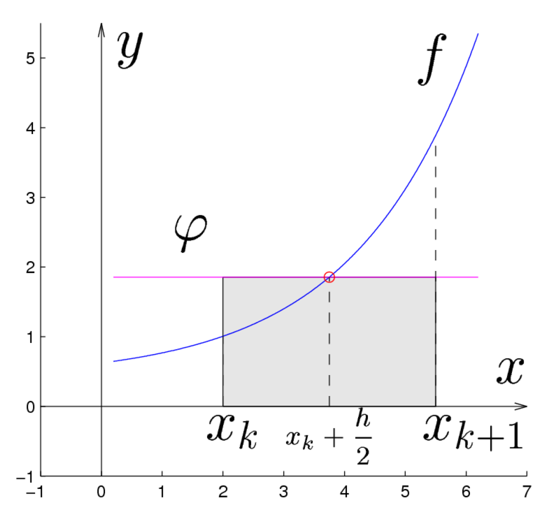
Ekvidistantní uzly potom vyjádříme takto

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

Newtonovy-Cotesovy základní kvadraturní vzorce

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

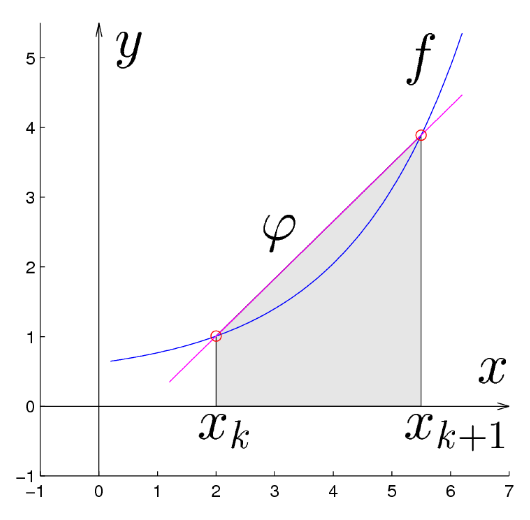
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \underbrace{h\cdot f(x_k+\frac{h}{2})}_{\equiv R_Z(f,h)}$$



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

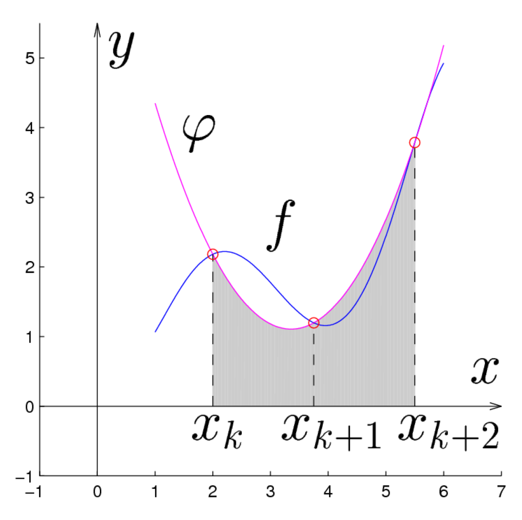
TRIAL

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



3) Simpsonovo pravidlo (f nahrazujeme kvadratickou funkcí φ)

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



Odvození Simpsonova pravidla

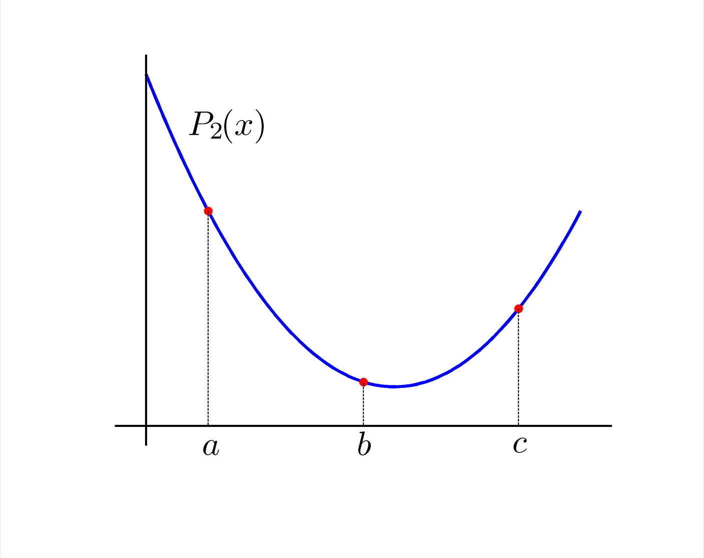
Např. pomocí Lagrangeova interpolačního polynomu:

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

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

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

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



TRIAL

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{2h}{6}\Big[-(a+c)2h + 2h3b - 2ha\Big] =$$

$$= -\frac{4h^2}{6}\Big[a + c - 3b + a\Big] =$$

$$= -\frac{4h^2}{6}\Big(\underbrace{2a - 2b}_{-2h} + \underbrace{c - b}_{h}\Big) =$$

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

$(**)$ $\quad \ldots = -\frac{1}{6}(2h)^3$ viz pomocný výpočet pro odvození lichoběžníkového pravidla (slide 10.5.)

$(***)$ $\quad \ldots = \frac{2}{3}h^3$ stejně jako $(*)$ – plyne ze symetrie

$$\int_a^c P_2(x)\,dx = \frac{f(a)}{2h^2}\,\frac{2}{3}h^3 + \frac{f(b)}{h^2}\,\frac{1}{6}(2h)^3 + \frac{f(c)}{2h^2}\,\frac{2}{3}h^3 = \frac{h}{3}\Big[f(a) + 4f(b) + f(c)\Big] = T_Z(f,h)$$

Příklad:

TRIAL

Pomocí základních Newtonových-Cotesových vzorců vypočtěte integrál

$$\int_{1}^{1{,}2} \mathrm{e}^{x}\, dx.$$

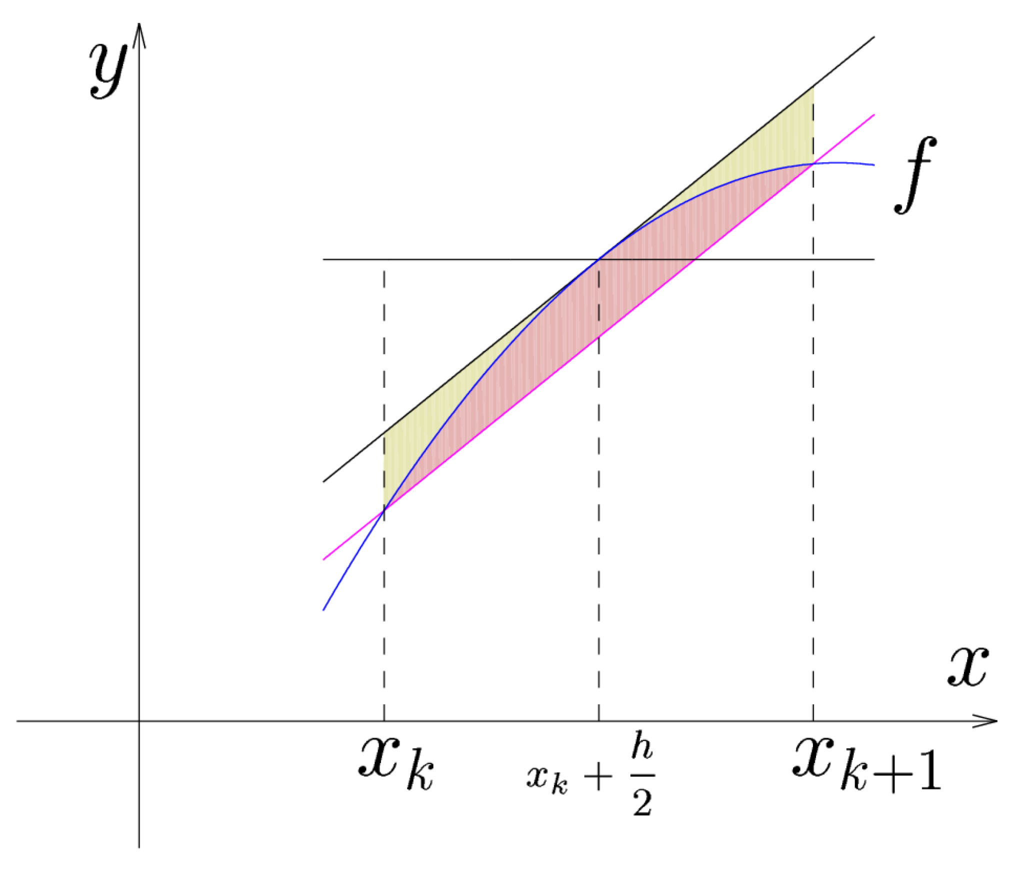
Řešení:

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

$R_Z(\mathrm{e}^x;\, 0,2) = 0,2\mathrm{e}^{1{,}1} \doteq 0{,}600833$	chyba: 0,001002
$T_Z(\mathrm{e}^x;\, 0,2) = \frac{0{,}2}{2}(\mathrm{e}^{1{,}0} + \mathrm{e}^{1{,}2}) \doteq 0{,}603839$	chyba: 0,002003
$S_Z(\mathrm{e}^x;\, 0,1) = \frac{0{,}1}{3}(\mathrm{e} + 4\mathrm{e}^{1{,}1} + \mathrm{e}^{1{,}2}) \doteq 0{,}601835$	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:



Základní vzorce se odvodí snadno na základě geometrické interpretace.

Pokud chceme vyjádřit současně i vztahy pro chyby těchto vzorců, musíme použít k odvození Taylorův rozvoj.

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

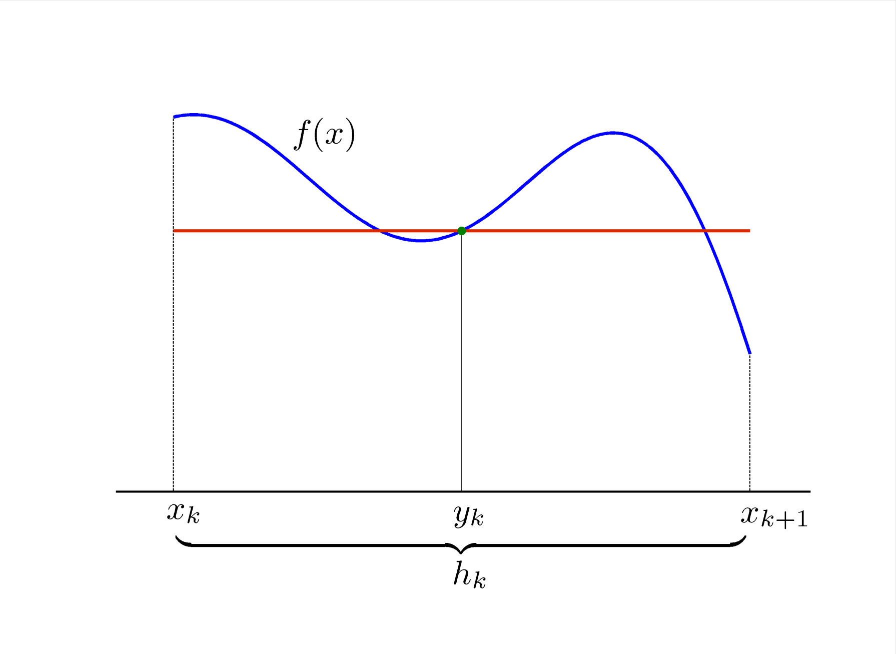
TRIAL

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

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,dx = S_Z(f,h) - \frac{h^5}{90}\,f^{(4)}(\xi)$$

Odvození pro obdélníkové pravidlo

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



Označíme

$$h_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}$$

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

Potom platí:

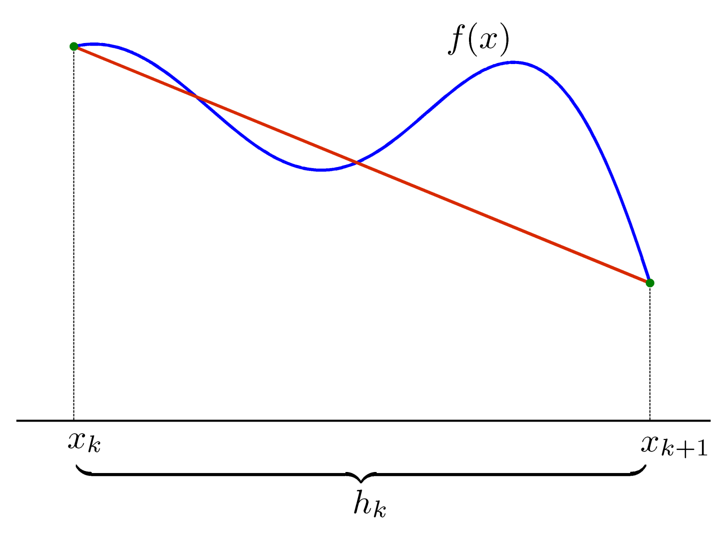
$$\boxed{\begin{aligned}\int\limits_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \underline{h_k f\Big(\frac{x_k+x_{k+1}}{2}\Big)} + \underline{\frac{1}{2}\Big[(\overbrace{x_{k+1}-y_k}^{\frac{h_k}{2}})^2 - (\overbrace{x_k-y_k}^{-\frac{h_k}{2}})^2\Big] f'\Big(\frac{x_k+x_{k+1}}{2}\Big)} +\\ \underline{+f''(\xi_k)\frac{1}{6}\Big[\overbrace{(x_{k+1}-y_k)^3}^{\frac{h_k^3}{8}} - \overbrace{(x_k-y_k)^3}^{-\frac{h_k^3}{8}}\Big]}\end{aligned}}$$

$$\int\limits_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \underbrace{h_k f\Big(\frac{x_k+x_{k+1}}{2}\Big)}_{R_Z(f,h_k)} + \underbrace{\frac{h_k^3}{24} f''(\xi_k)}_{\text{chyba metody}}$$

Odvození pro lichoběžníkové pravidlo

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

TRIAL



Z aproximací funkce známe:

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

Potom platí:

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

pomocný výpočet

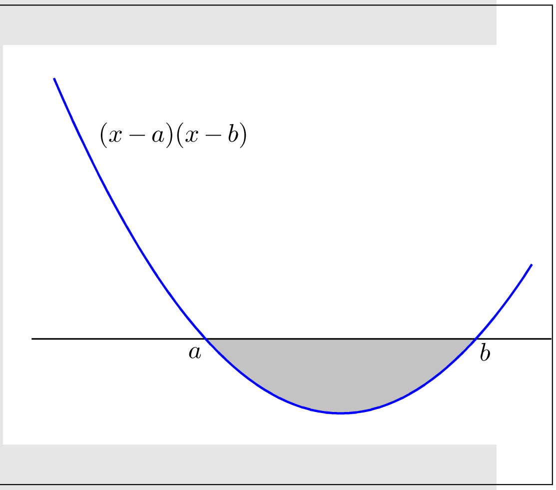
$$\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = \int_a^b \big(x^2 - x(a+b) + ab\big)\,dx =$$

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

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

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

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



$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \underbrace{\frac{h_k}{2}\big(f(x_k) + f(x_{k+1})\big)}_{T_Z(f,h_k)} - \underbrace{\frac{h_k^3}{12} f''(\xi_k)}_{\text{chyba metody}}$$

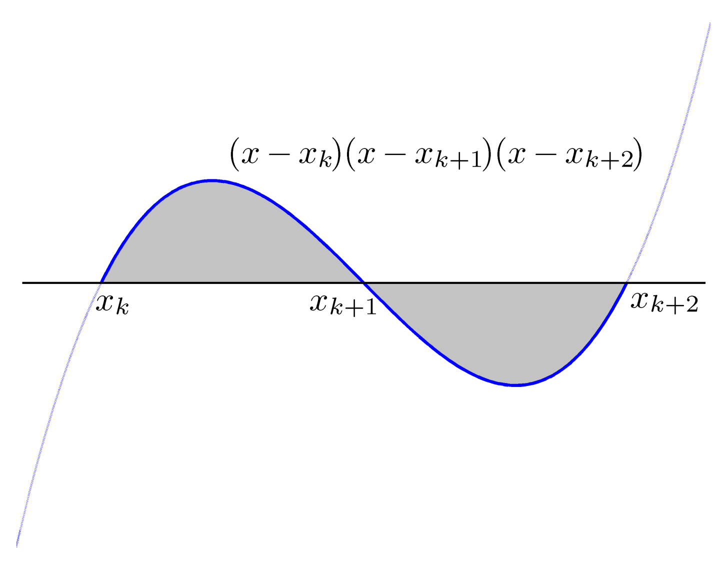
Komentář pro Simpsonovo pravidlo

Funkci f aproximujeme na $\langle x_k, x_{k+2}\rangle$ kvadratickou funkcí, tj. interpolačním polynomem 2. stupně.

$$f(x) = P_2(x) + \frac{f'''(\xi)}{6}(x - x_k)(x - x_{k+1})(x - x_{k+2})$$

$$\int\limits_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,dx = S_Z(f,h) + \frac{f'''(\xi)}{6} \int\limits_{x_k}^{x_{k+2}} (x-x_k)(x-x_{k+1})(x-x_{k+2})\,dx \ \ \ldots$$

Ačkoliv z uvedeného vychází, že chyba by řádově měla být h^4, je chyba o jeden řád vyšší. Důvod je podobný jako u odvození chyby obdélníkového pravidla (integrujeme funkci symetrickou podle středu intervalu).



Jelikož výraz pro chybu základního Simpsonova pravidla obsahuje 4-tou derivaci, je zřejmé, že Simpsonovo pravidlo bude přesně integrovat polynomy až do stupně 3, protože pro ně je 4-tá derivace identicky nulová.

Newton-Cotesovy složené kvadraturní vzorce

Složené kvadraturní vzorce získáme sečtením základních kvadraturních vzorců:

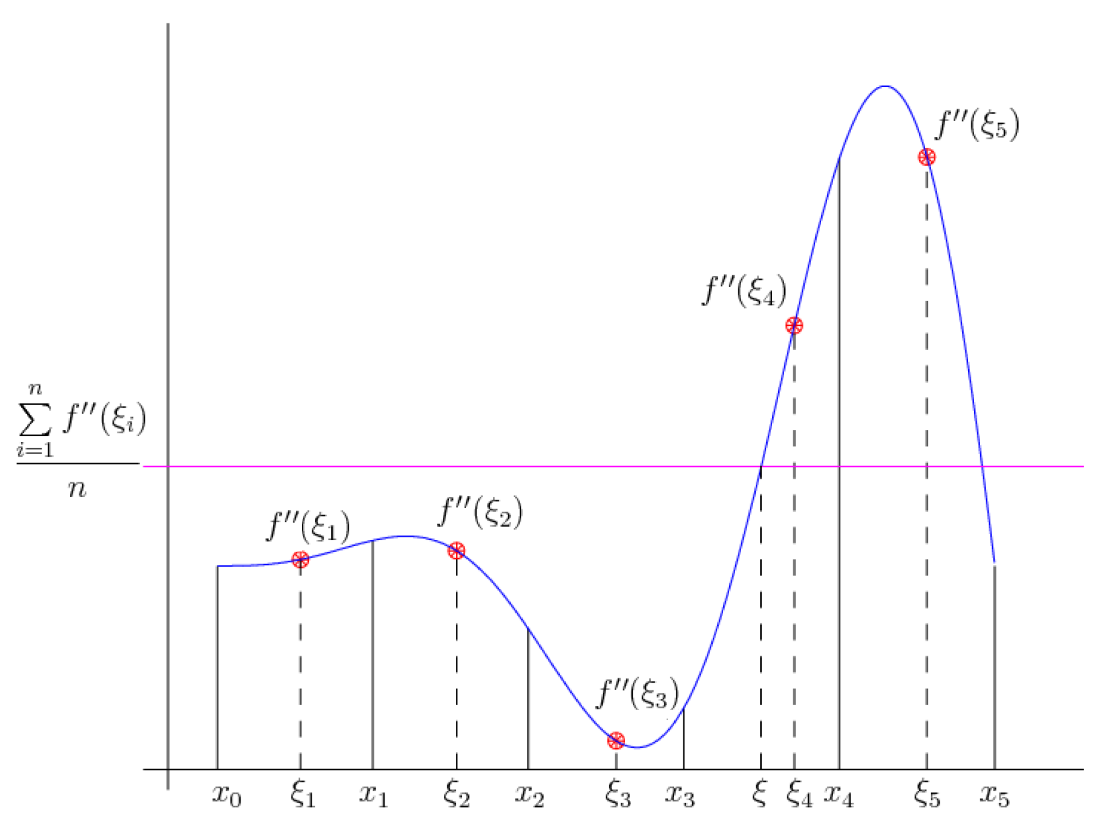
$$\int_a^b f(x)\,dx \ = \ \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \ \approx \ \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \varphi(x)\,dx$$

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

Pro chyby složených vzorců potom platí:

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

$$\sum_{k=1}^{N} \underbrace{\frac{h^3}{24}\,f''(\xi_k)}_{\text{chyba základního vzorce na } \langle x_{k-1}, x_k\rangle} = \frac{h^3}{24}\sum_{k=1}^{N} f''(\xi_k) = \frac{h^3}{24}\,N\,f''(\xi) = \frac{h^3}{24}\,\frac{b-a}{h}\,f''(\xi)$$



Průměr hodnot leží mezi minimální a maximální hodnotou:

$$\min_k f''(\xi_k) \le \frac{1}{N}\sum_k f''(\xi_k) \le \max_k f''(\xi_k)$$

Ze spojitosti funkce $f''(x)$ vyplyne:

$$\exists \xi \in (x_0, x_N): \quad f''(\xi) = \frac{1}{N}\sum_k f''(\xi_k)$$

TRIAL

Jak dosáhnout požadovanou přesnost ?

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

Příklad Určete h tak, aby chyba složeného lichoběžníkového pravidla pro výpočet

$$\boxed{I = \int_2^3 \frac{1}{(x-1)}dx}$$

byla nejvýše 10^{-3}.

Musí platit:

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

$\Rightarrow$ je nutné odhadnout f'':

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

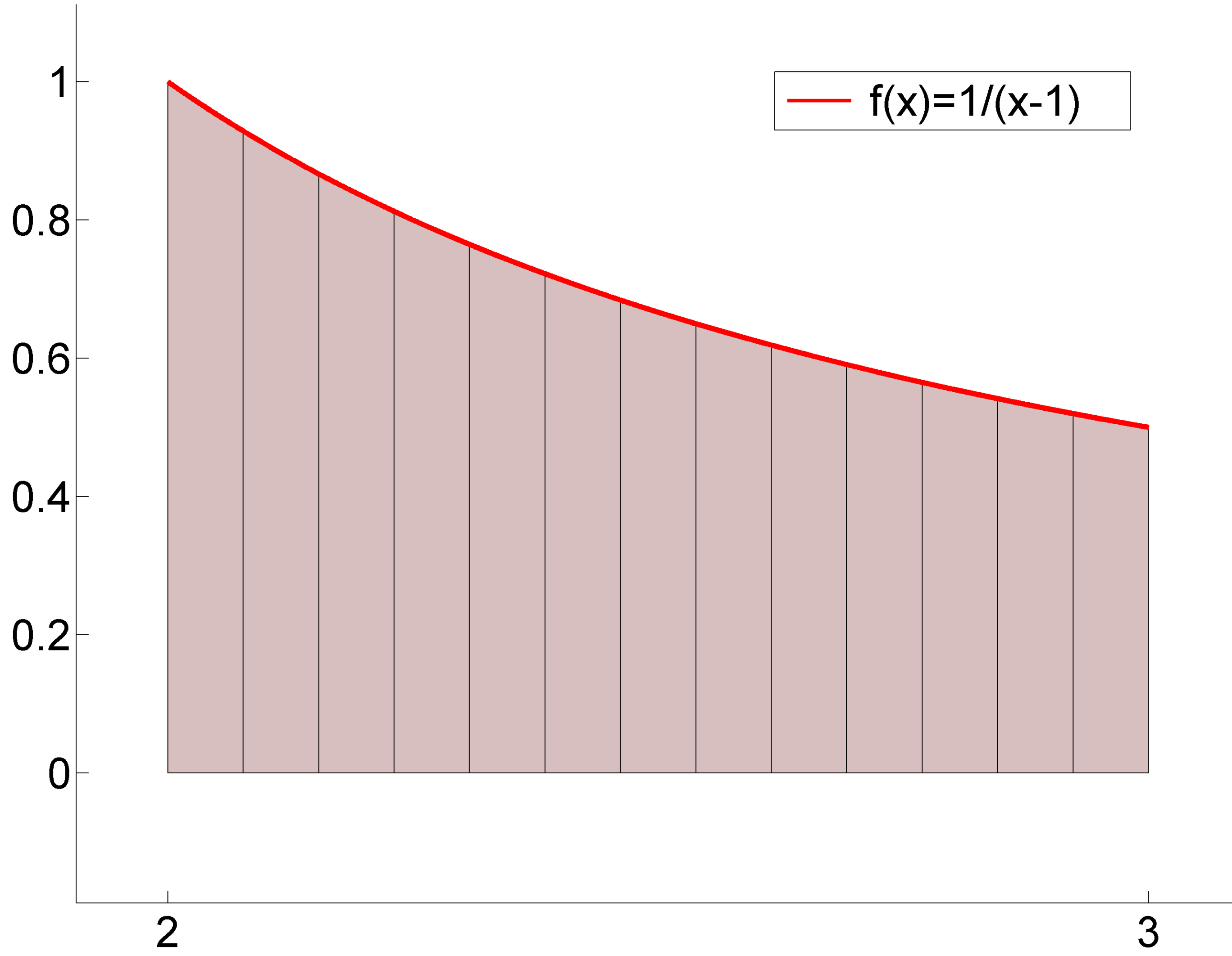
$$f'' = \frac{2}{(x-1)^3} \qquad \text{na } \langle 2,3\rangle \text{ je } f'' > 0 \text{ (kladná)}$$

$$f''' = -\frac{3}{(x-1)^4} < 0 \quad \Rightarrow \quad f'' \text{ je klesající}$$

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

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

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



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

Přesná hodnota: $I=\Big[\ln|x-1|\Big]_2^3=\ln 2-\ln 1=\ln 2\doteq 0,69315$

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

Nevýhody tohoto postupu:

- výrazy pro chybu obsahují derivace (často vysokého řádu), které není lehké odhadnout
- výsledné odhady jsou většinou velmi pesimistické
- Newton-Cotesovy vzorce nejsou konvergentní
  (zvyšujeme-li řád vzorce, nemusí konvergovat aproximace integrálů k teoretické hodnotě)
- pro odhad chyby je vhodné užít metodu polovičního kroku (Richardsonova extrapolace)

TRIAL

Richardsonova extrapolace

Stručně si připomeňme princip Richardsonovy extrapolace, kterou jsme již používali pro zpřesňování při výpočtu hodnoty derivace funkce.

Předpokládejme, že výraz pro chybu má tvar

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

Přesná hodnota integrálu je potom

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

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

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

Dosadíme-li h^k do $(\star)$, získáme

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

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

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

k ... řád eliminované chyby

Algoritmus (Pro složené lichoběžníkové pravidlo)

```
Pro $s = 0, 1, 2, \ldots, S$
    $T_{s,0} = T(f, h_s)$
    Pro $k = 1, 2, \ldots, s$
        $T_{s,k} = T_{s,k-1} + \frac{T_{s,k-1} - T_{s-1,k-1}}{4^k - 1}$
```

$$h_0 = b - a$$

$$h_1 = \frac{1}{2} h_0$$

$$\vdots$$

$$h_s = \frac{1}{2^s} h_0$$

Schéma

TRIAL

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 $T_{s,k}$ jsou aproximacemi původního integrálu.

Pro funkci f integrovatelnou v Riemannově smyslu platí

$$T_{sk} \to I(f) \quad \text{pro } s \to \infty, \ k = 0, 1, \ldots$$

a také

$$T_{kk} \to I(f) \quad \text{pro } k \to \infty.$$

Dále se dá ukázat, že celá procedura je numericky stabilní.

Příklad

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

Řešení: Pro rozvoj chyby lichoběžníkového pravidla platí

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

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

TRIAL

Pro kontrolu uveďme přesnou hodnotu integrálu:

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

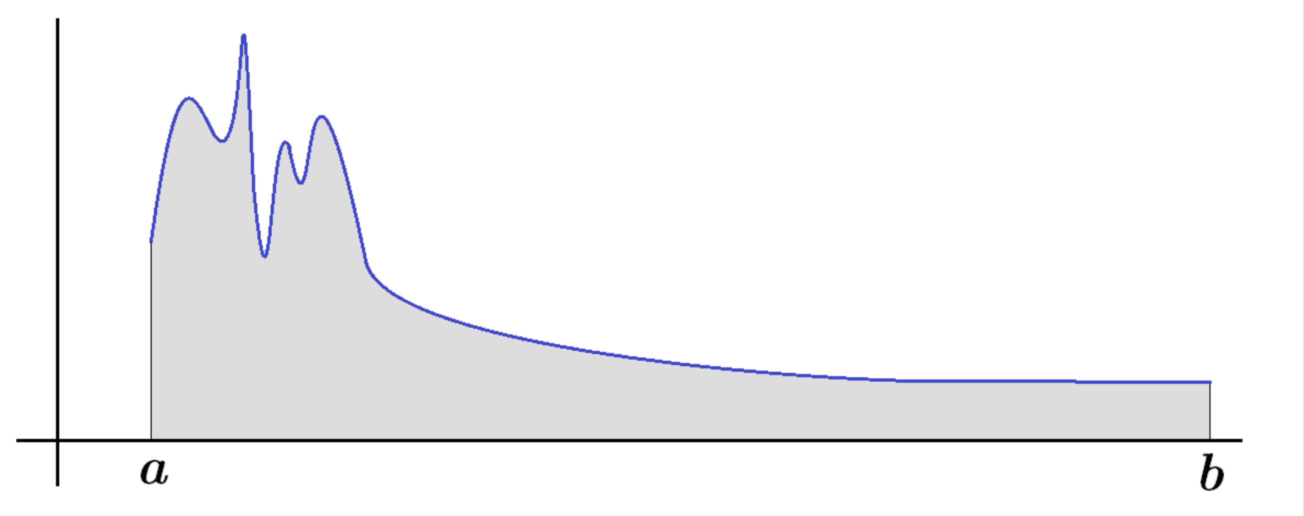
Poznámka

Metoda Richardsonovy extrapolace pro lichoběžníkové pravidlo se nazývá **Rombergova metoda**.

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

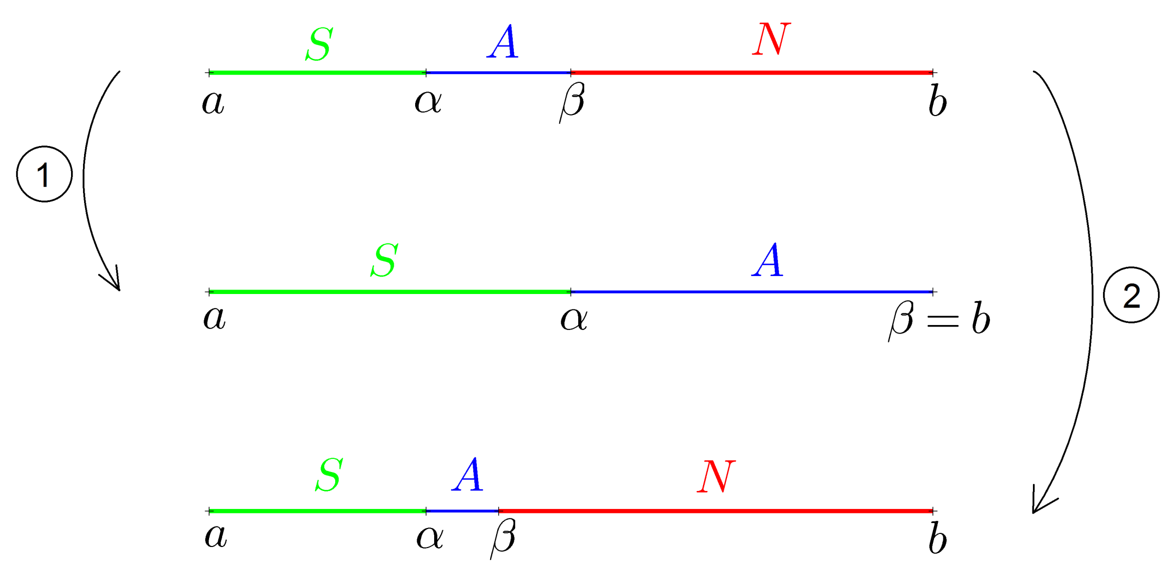


je zřejmé, že na druhé části intervalu stačí pro splnění zadané tolerance uvažovat větší kroky, než v první části.

Stavy

S ... interval, na kterém je zajištěno splnění chybového testu
A ... aktivní interval integrace
N ... interval, přes který se ještě nezapočítal dílčí integrál

TRIAL



Změny stavu:

(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

$$\varepsilon_f(\alpha,\beta) \approx \frac{1}{2^k-1}\left[I_{\langle\alpha,\beta\rangle}\left(\frac{h}{2}\right) - I_{\langle\alpha,\beta\rangle}(h)\right], \qquad k \text{ – řád chyby vzorce}$$

$$\boxed{\varepsilon_f(\alpha,\beta) \le \varepsilon\,\frac{\beta-\alpha}{b-a}}$$

ε – celková požadovaná přesnost

Algoritmus

na začátku:

$A = \langle a, b\rangle$

$N = \emptyset$

$S = \emptyset$

$I_S = 0 \qquad (I_S \approx \int\limits_a^\alpha f(x)\,dx)$

(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:

TRIAL

(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 $S \neq \langle a, b \rangle$

Příklad

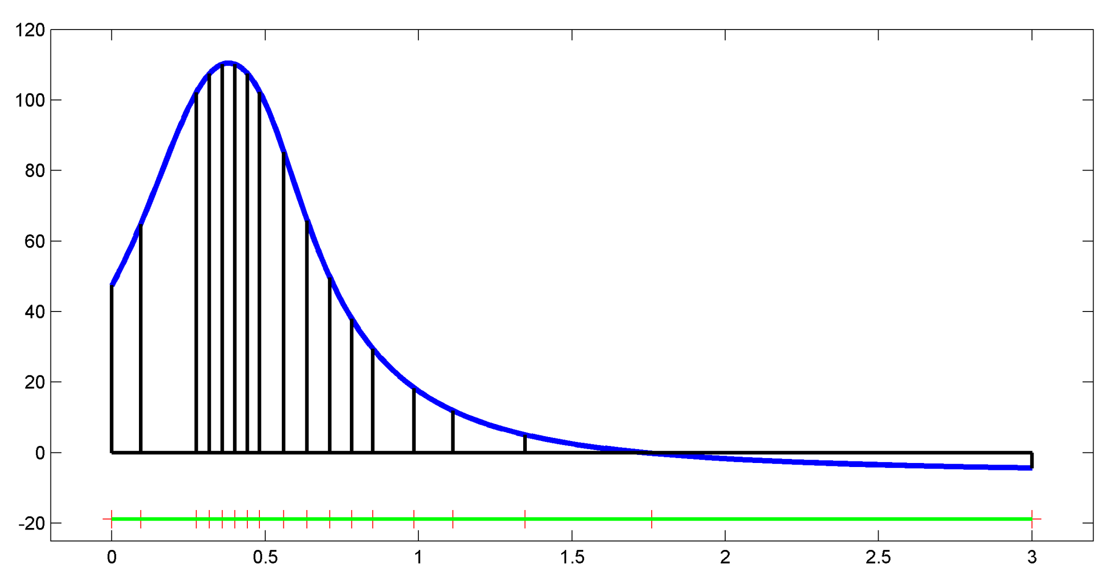
Použijte adaptivní přístup pro výpočet

$$\int_0^3 \frac{1}{(0{,}3x-0{,}1)^2+0{,}01} + \frac{1}{(x-0{,}5)^2+0{,}04} - 6\,dx$$

tak, aby výsledná chyba aproximace integrálu byla menší než 0,25.

Pro výpočet použijte obdélníkové, lichoběžníkové i Simpsonovo pravidlo.

Obdélníkové pravidlo

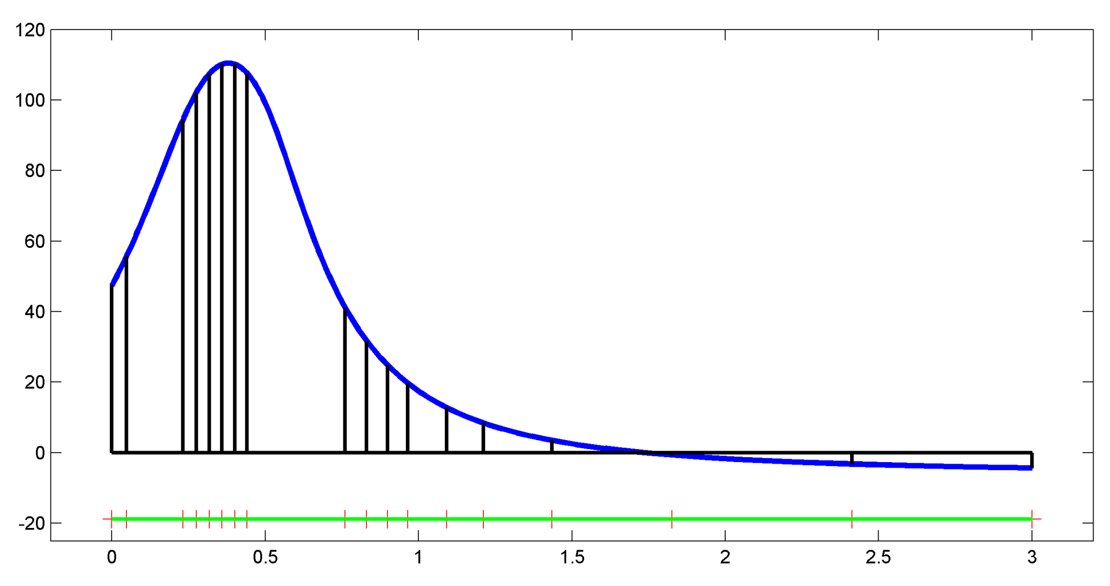


výsledky v MATLABu

TRIAL

```
-------------------------------------------------------------------
  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_0.
-------------------------------------------------------------------
  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
-------------------------------------------------------------------
```

Lichoběžníkové pravidlo

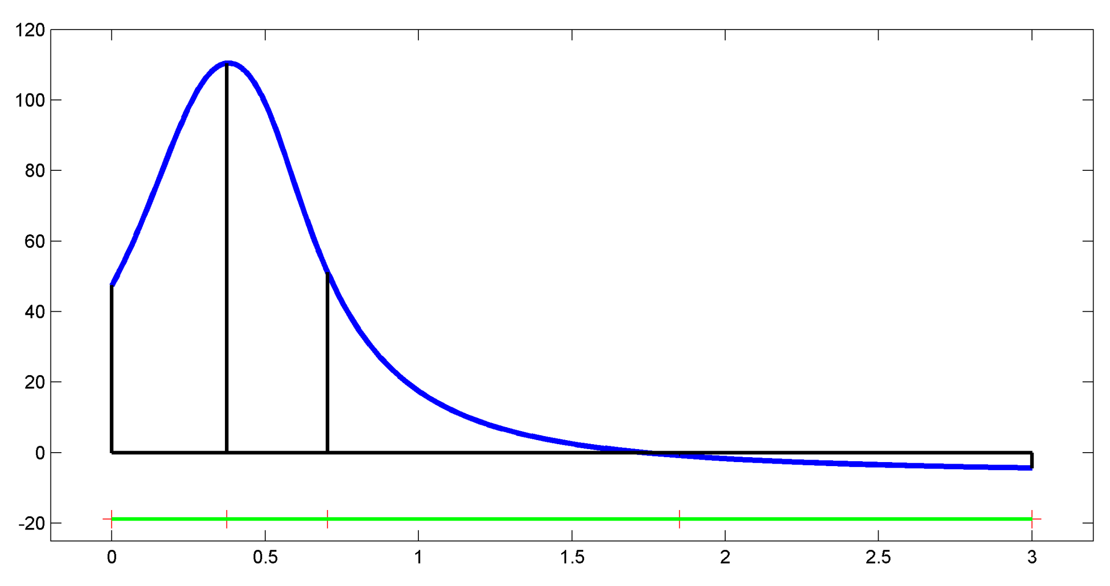


výsledky v MATLABu

TRIAL

```
-----------------------------------------------------------------
  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
-----------------------------------------------------------------
```

Simpsonovo pravidlo



výsledky v MATLABu

TRIAL

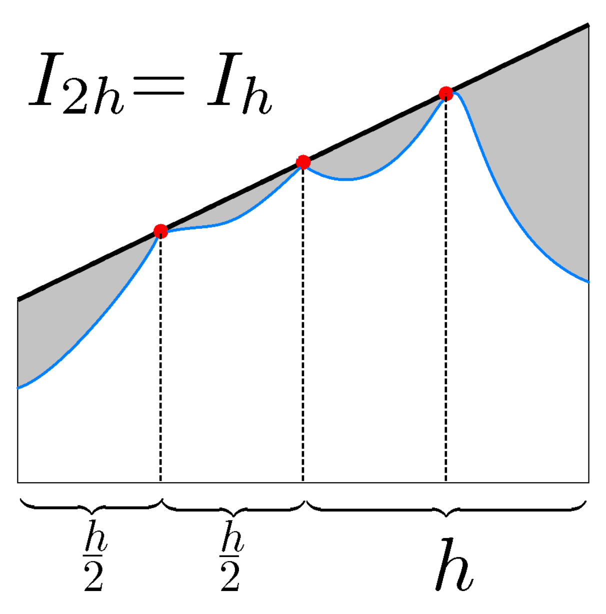
```
-------------------------------------------------------------------
  Adaptivni numericky vypocet urciteho integralu funkce
  f(x)=1 /((0.3*x-.1)^2+.01)+1/((x-.5)^2+.04)-6
  na intervalu <0.000000,3.000000>
  se zadanou presnosti 0.250000
  Pro vypocet se pouzije Simpsonovo pravidlo I_S.
-------------------------------------------------------------------
  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

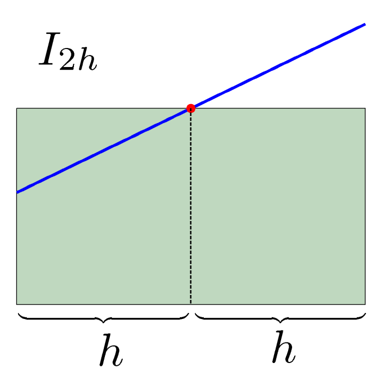
Odhadujeme-li chybu pomocí metody polovičního kroku, nemusí být skutečná chyba menší než zadaná tolerance.

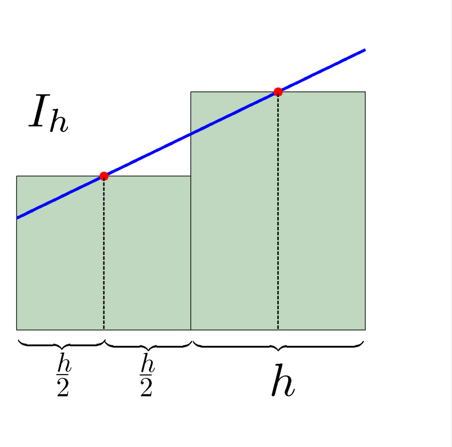
Příklady v nichž je splněn TEST CHYBY, ale chyba je ve skutečnosti větší než zadaná tolerance

- Obdélníkové pravidlo:

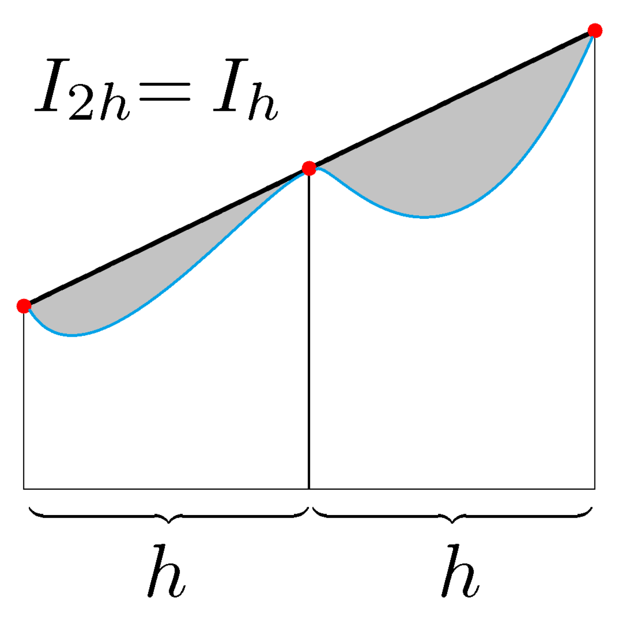


TRIAL



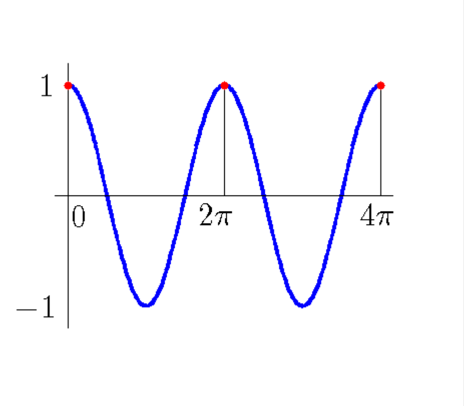


- Lichoběžníkové pravidlo:



Např:

$$\int_0^{4\pi} \cos x \, dx, \qquad \text{tolerance} \quad \varepsilon = 10^{-5}$$



TRIAL

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

Odhad chyby je

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

Přesná hodnota je

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

Chyba skutečná je

$$4\pi$$

Poznámka:

Newtonovy-Cotesovy vzorce používají $(m+1)$ ekvidistantních uzlů a integrují přesně polynomy až do m-tého, případně. $(m+1)$-ního 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 na základním intervalu $m+1$ bodů, potom nejvyšší možný stupeň polynomu, který ještě kvadraturní vzorec integruje přesně, je $2m+1$ (mluvíme o tzv. **algebraickém řádu 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 $\sim m$.)

Cenou za vyšší přesnost budou ovšem neekvidistantní uzly.

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

Řešení:

Kvadraturní vzorec pro $m = 0$ má tvar

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

kde vystupují 2 neznámé w_0 a x_0.

TRIAL

Vzorec musí přesně integrovat:

1) konstantu

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

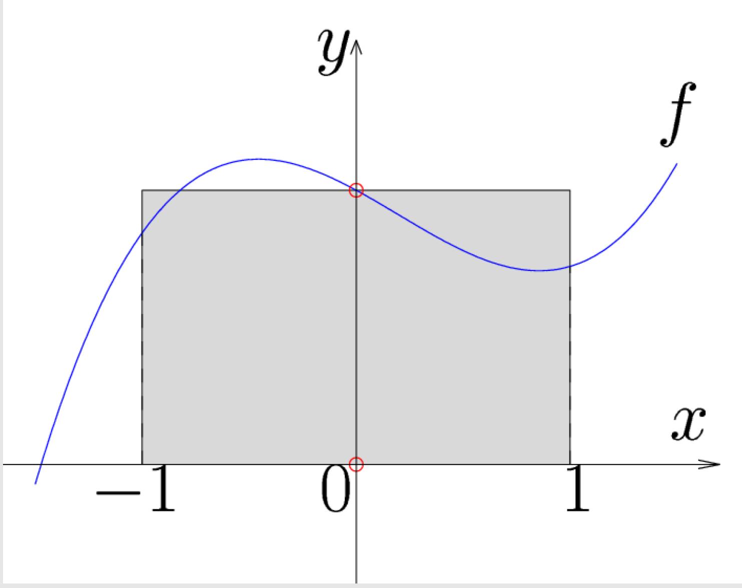
2) lineární funkci

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

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

Jednobodový základní Gaussův kvadraturní vzorec je

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



Příklad: Odvoďte pro interval $\langle -1, 1\rangle$ základní Gaussův kvadraturní vzorec pro $m = 1$ (tj. v intervalu uvažujeme 2 uzly).

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:

TRIAL

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

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

Soustava nelineárních rovnic pro 4 neznámé:

$$\begin{array}{lrcll}
a: & w_0x_0^3+w_1x_1^3 & = & 0 & (1)\\
b: & w_0x_0^2+w_1x_1^2 & = & \tfrac{2}{3} & (2)\\
c: & w_0x_0+w_1x_1 & = & 0 & (3)\\
d: & w_0\quad+w_1 & = & 2 & (4)
\end{array}$$

(1) – (3): $w_0x_0(x_0^2-1)+w_1x_1(x_1^2-1)=0.$

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

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

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

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

analogicky:

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

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

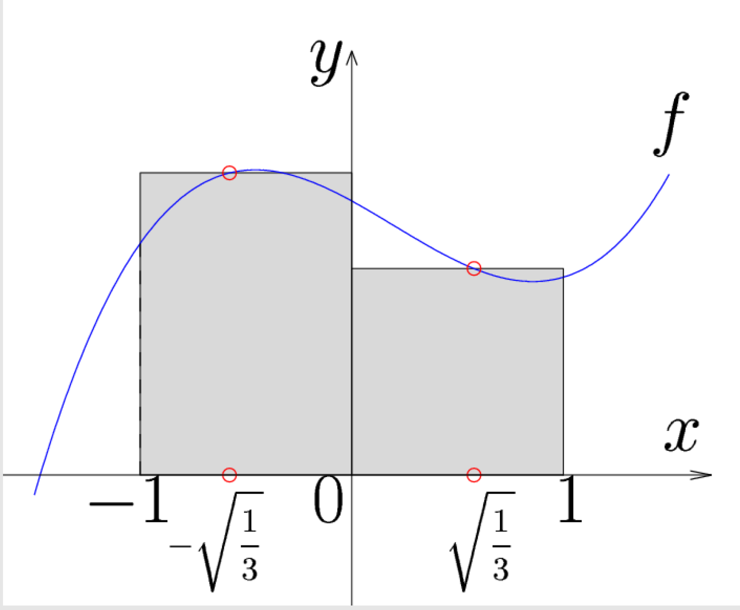
$$\Rightarrow x_1=\sqrt{\frac{1}{3}}$$

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

TRIAL

Dvoubodový základní Gaussův kvadraturní vzorec je

$$\boxed{K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \underbrace{\frac{1}{135} f^{(4)}(\xi)}_{\text{chyba}}}$$

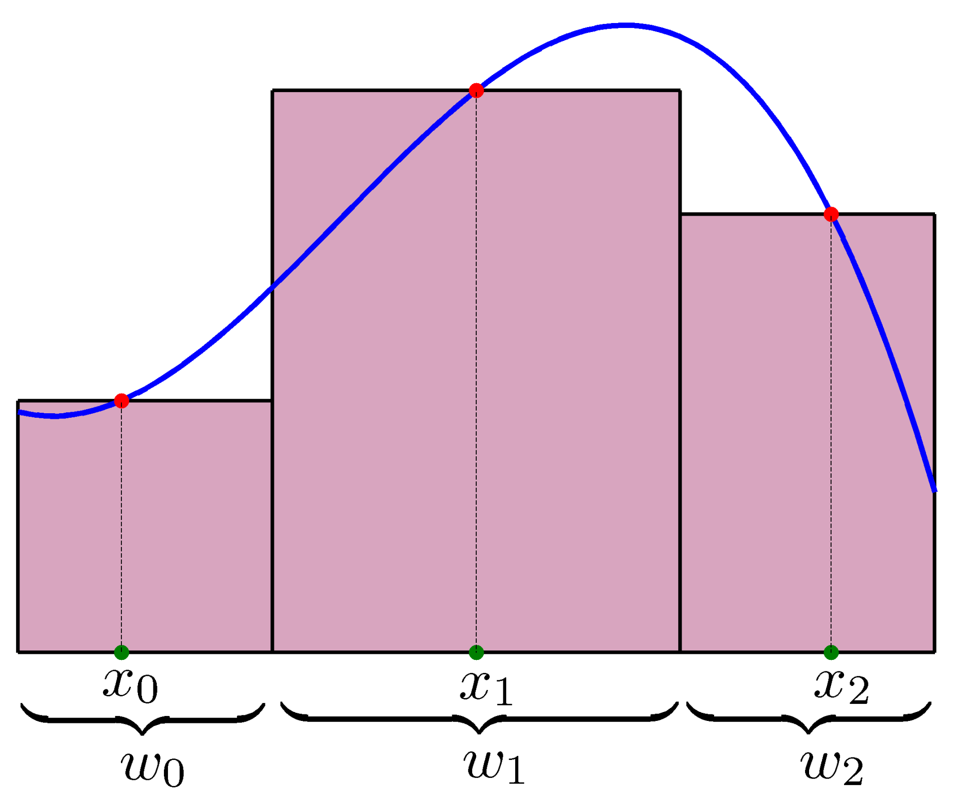


Poznámka:

Další základní Gaussův kvadraturní vzorec (tříbodový, tj. pro $m = 2$) vypadá na intervalu $\langle -1, 1\rangle$ takto:

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

TRIAL



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

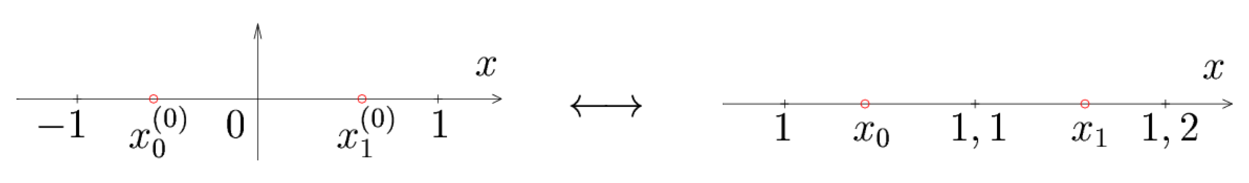
Poznámka: To, že jsme vyjádřili $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$ neubírá nic na obecnosti, můžeme totiž libovolný interval $\langle a, b\rangle$ transformovat na $\langle -1, 1\rangle$ a použít odvozené vztahy.

Poznámka: Gaussovy kvadraturní vzorce jsou konvergentní.

Příklad

Vypočtěte $\int_{1}^{1{,}2} \mathrm{e}^x\,dx$ použitím jedno- a dvoubodového základního Gaussova kvadraturního vzorce.

Řešení:



$$x_i = 1,1 + 0,1 \cdot x_i^{(0)},$$

$$w_i = \tfrac{1}{2}(1,2-1)w_i^{(0)} = 0,1w_i^{(0)}.$$

$n = 0$

$$\begin{aligned}\textstyle\int_1^{1,2} f(x)\,dx \approx{} & 0,2 \cdot f(1,1) = \\ ={} & 0,2 \cdot \mathrm{e}^{1,1} = \\ ={} & \underline{0{,}600833}.\end{aligned}$$

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

TRIAL

$n = 1$

$\int_1^{1,2} f(x)\,dx \approx$

$\approx 0,1\left[f(1,1-0,1\tfrac{1}{\sqrt{3}}) + f(1,1+0,1\tfrac{1}{\sqrt{3}})\right] \doteq$

$\doteq 0,1[2,835632 + 3,182716] =$

$= \underline{0{,}601834}.$

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

<u>Přesný výsledek:</u> $\mathrm{e}^{1,2} - \mathrm{e} \doteq \underline{\underline{0{,}601835}}.$

<u>Poznámka:</u>

Podobně jako u Newton-Cotesových vzorců můžeme definovat **složené Gaussovy kvadraturní vzorce**

Příklad

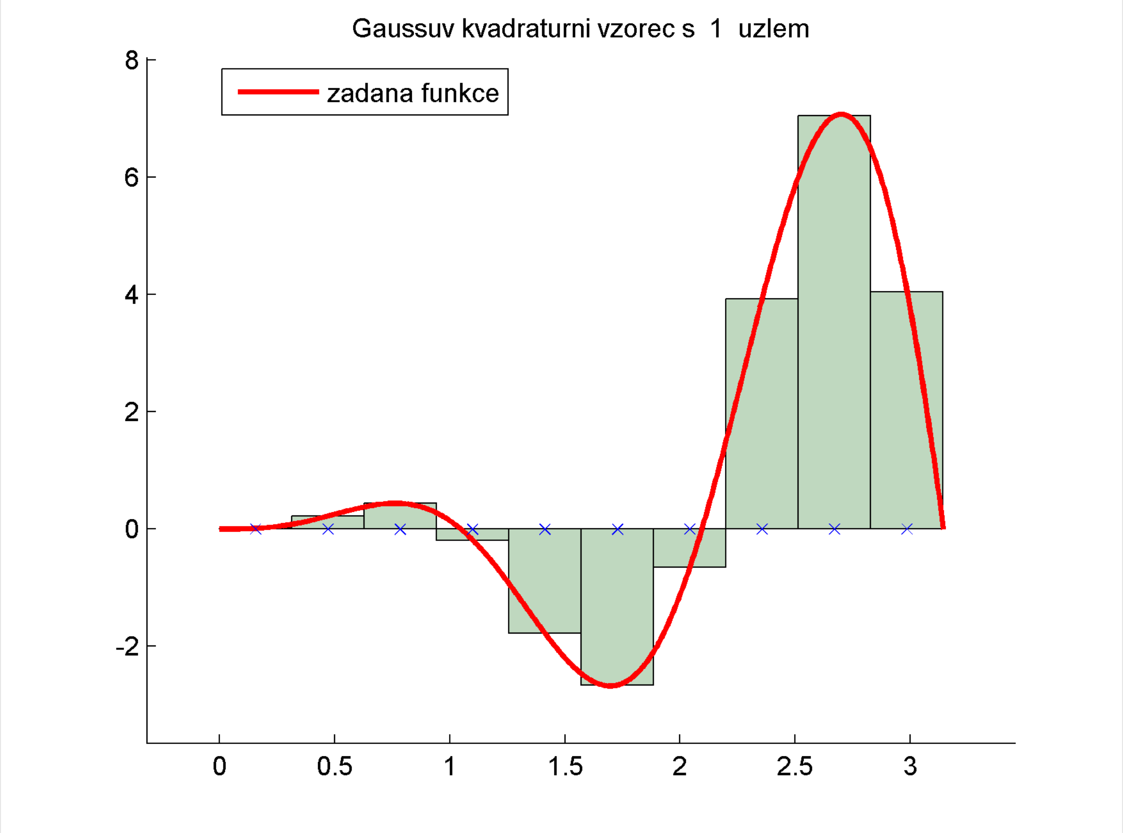
Vypočtěte $\displaystyle\int_0^{\pi} x^2 \sin 3x\,dx$ použitím jedno-, dvou- a tříbodového složeného Gaussova kvadraturního vzorce. Počet dělení intervalu $\langle 0, \pi\rangle$ volte $N = 10$, resp. $N = 20$.

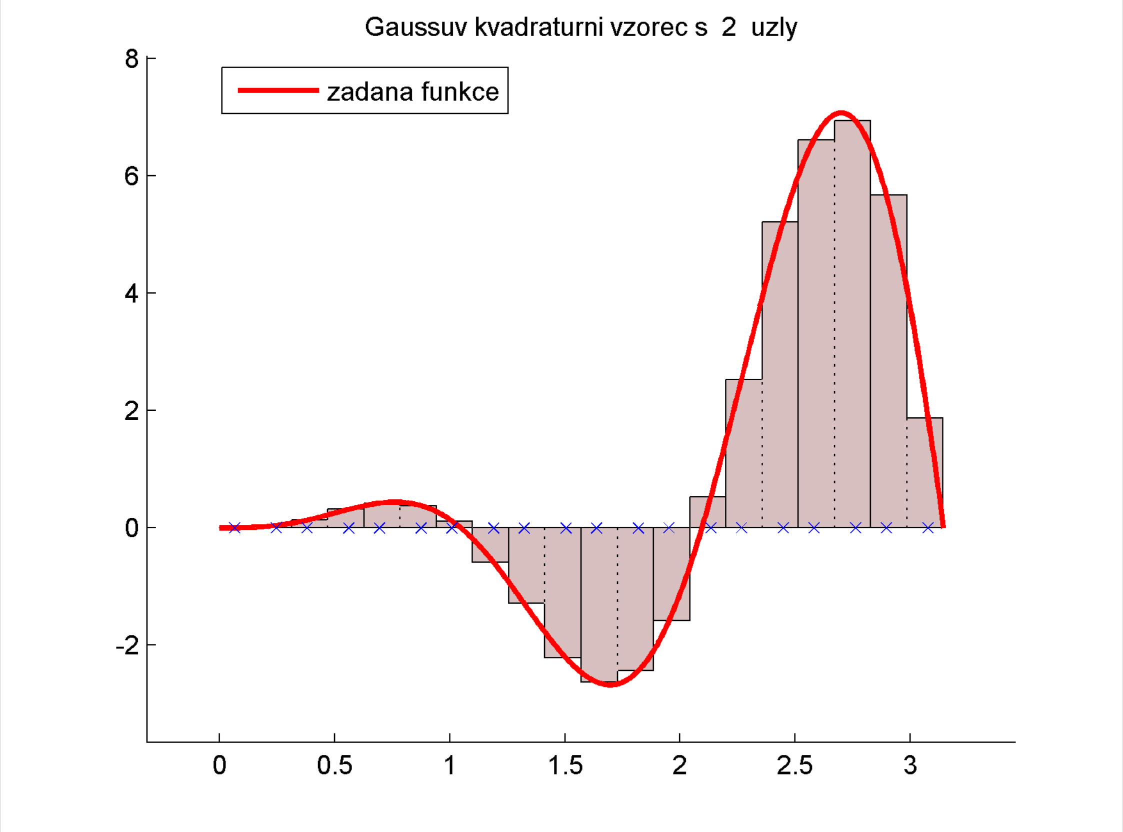
<u>Řešení:</u>

výsledky v MATLABu

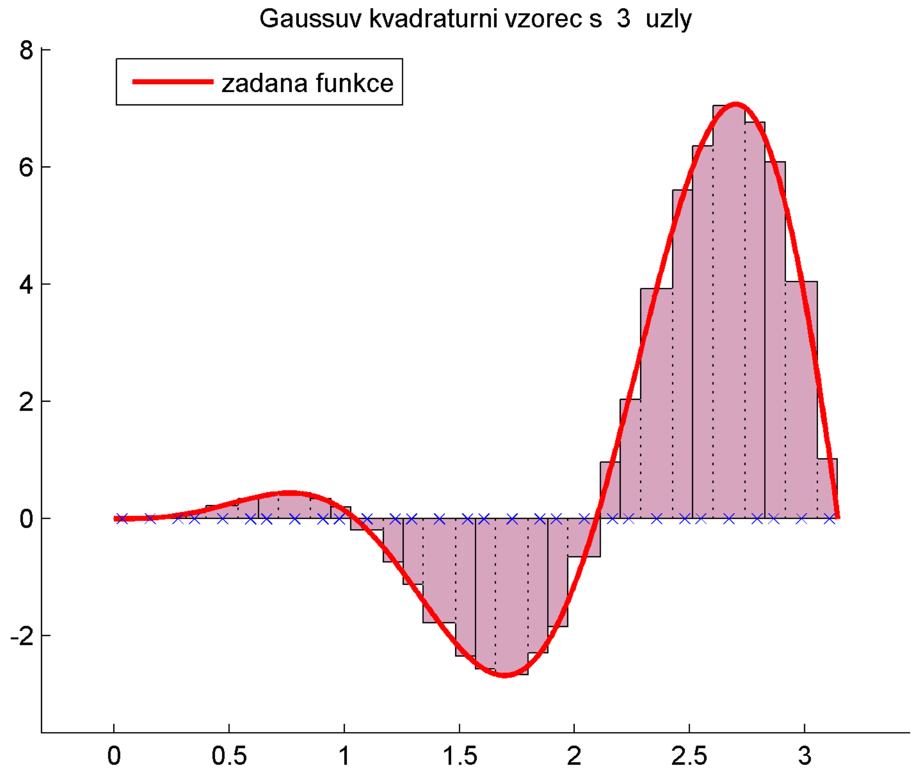
```
  ------------------------------------------------------------------
    Numericky vypocet urciteho integralu funkce f(x)=x^2*sin(3*x)
    na intervalu <0.000000,3.141593> s poctem deleni N=10
  ------------------------------------------------------------------


   Presna hodnota integralu je  3.141720

   Priblizna hodnota integralu                                  chyba
       - pomoci Gausova vzorce s 1 uzlem       3.266250       0.124530
       - pomoci Gausova vzorce s 2 uzly        3.141191      -0.000529
       - pomoci Gausova vzorce s 3 uzly        3.141721       0.000001
```

TRIAL


Gaussuv kvadraturni vzorec s 1 uzlem
zadana funkce
8
6
4
2
0
-2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3


Gaussuv kvadraturni vzorec s 2 uzly
zadana funkce
8
6
4
2
0
-2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

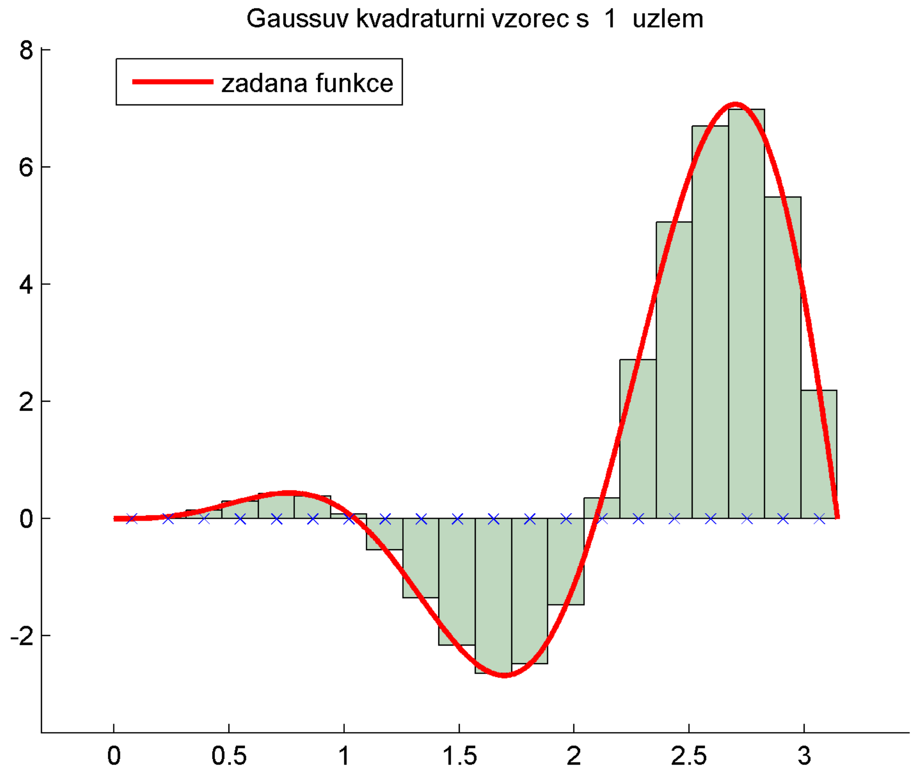
TRIAL

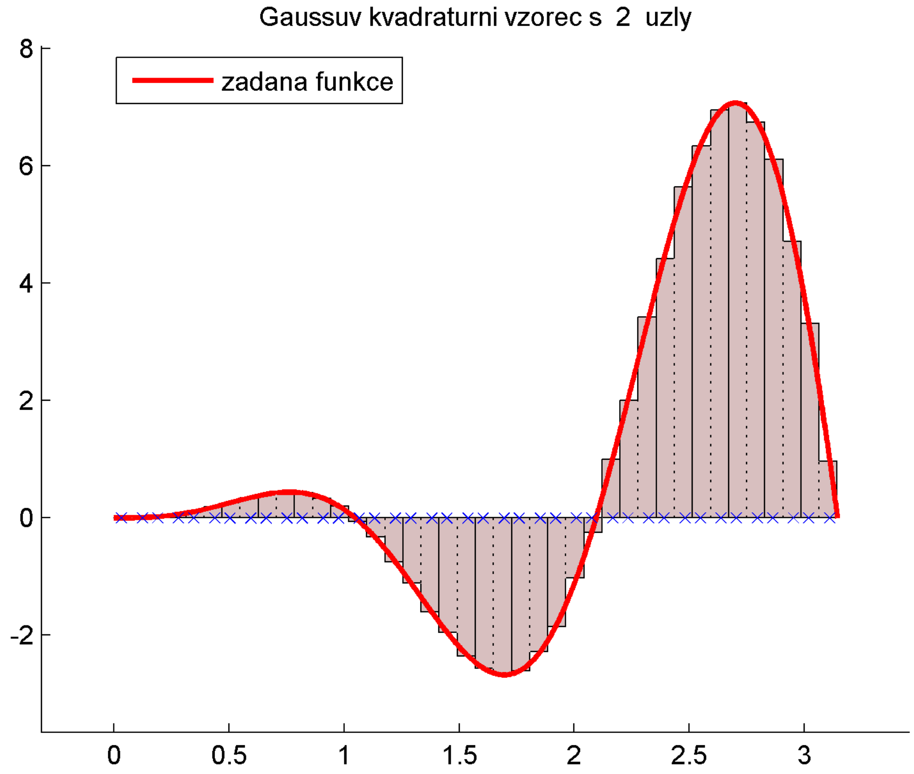


výsledky v MATLABu

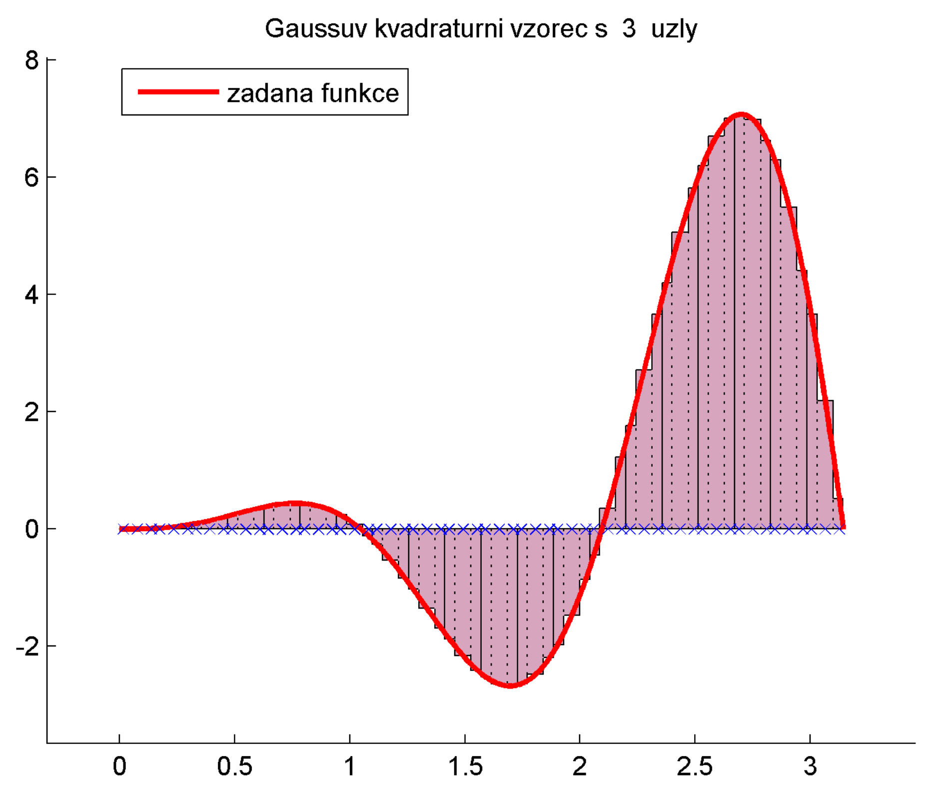
```
 ------------------------------------------------------------------
   Numericky vypocet urciteho integralu funkce f(x)=x^2*sin(3*x)
   na intervalu <0.000000,3.141593> s poctem deleni N=20
 ------------------------------------------------------------------


  Presna hodnota integralu je  3.141720

  Priblizna hodnota integralu                                  chyba
      - pomoci Gausova vzorce s 1 uzlem       3.172331       0.030612
      - pomoci Gausova vzorce s 2 uzly        3.141687      -0.000033
      - pomoci Gausova vzorce s 3 uzly        3.141720       0.000000
```

TRIAL


Gaussuv kvadraturni vzorec s 1 uzlem
zadana funkce
8
6
4
2
0
-2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3


Gaussuv kvadraturni vzorec s 2 uzly
zadana funkce
8
6
4
2
0
-2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

TRIAL



Integrování periodické funkce přes periodu

Pro lichoběžníkové pravidlo platí:

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

(tzv. **Eulerův - Maclaurinův vzorec**)

Souvislost s rozvojem chyby:

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

Pro kladnou 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 $\int\limits_a^b f(x)\,dx$, protože zbytek má tvar

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

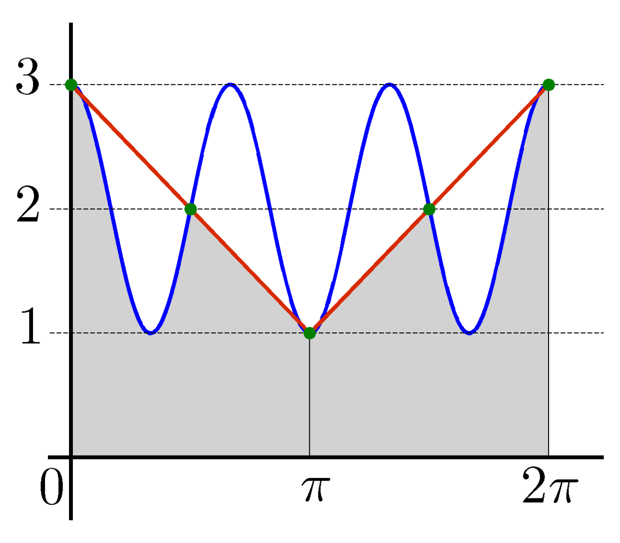
Platí však, že chyba je velikosti $O(h^{2m})$ pro libovolné m takové, že f má spojitou $2m$-tou derivaci. Proto není nutné používat Rombergovu metodu.

TRIAL

Příklad: Vypočtěte složeným lichoběžníkovým pravidlem

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

(Přesná hodnota je 4π.)



Zvolíme krok $h = \pi$, tj. $N = 2$:

$$T(f, \pi) = \frac{\pi}{2}\Big[f(0) + 2f(\pi) + f(2\pi)\Big] = \frac{\pi}{2}(3 + 2 \cdot 1 + 3) = 4\pi.$$

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

Nevlastní integrály

Při výpočtu integrálu

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, dx}$$

lze většinou předpokládat, že hodnoty funkce f a nižší derivace f jsou vně nějakého intervalu $\langle -R, R\rangle$ dostatečně malé. Proto je vhodné použít lichoběžníkové pravidlo pro integrál

$$\boxed{\int_{-R}^{R} f(x)\, dx}.$$

Příklad

Vypočtěte integrál $I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\, dx$.

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:

$$T(f, 1) = 1{,}772636$$

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

TRIAL

Přesná hodnota

$$I = \sqrt{\pi} \doteq 1{,}7724538$$

Poznamenejme, že

$$\left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\,dx - \int\limits_{-4}^{4} \mathrm{e}^{-x^2}\,dx \right| < 10^{-7}.$$

Při výpočtu integrálu $\boxed{\int_0^\infty f(x)\,dx}$ můžeme použít transformaci $x = p(t)$.

a) $\underline{x = -\ln t}$, $\quad dx = -\dfrac{dt}{t}$, $\quad \begin{array}{c||c|c} x & 0 & \infty \\ \hline t & 1 & 0 \end{array}$

$$\int\limits_0^\infty f(x)\,dx = -\int\limits_1^0 f\left(-\ln t\right)\frac{dt}{t} = \int\limits_0^1 \frac{f\left(-\ln t\right)}{t}\,dt$$

b) $\underline{x = \dfrac{t}{1-t}}$, $\quad dx = (1-t)^{-2}\,dt$, $\quad \begin{array}{c||c|c} x & 0 & \infty \\ \hline t & 0 & 1 \end{array}$

$$\int\limits_0^\infty f(x)\,dx = \int\limits_0^1 f\left(\frac{t}{1-t}\right)\frac{dt}{(1-t)^2}$$

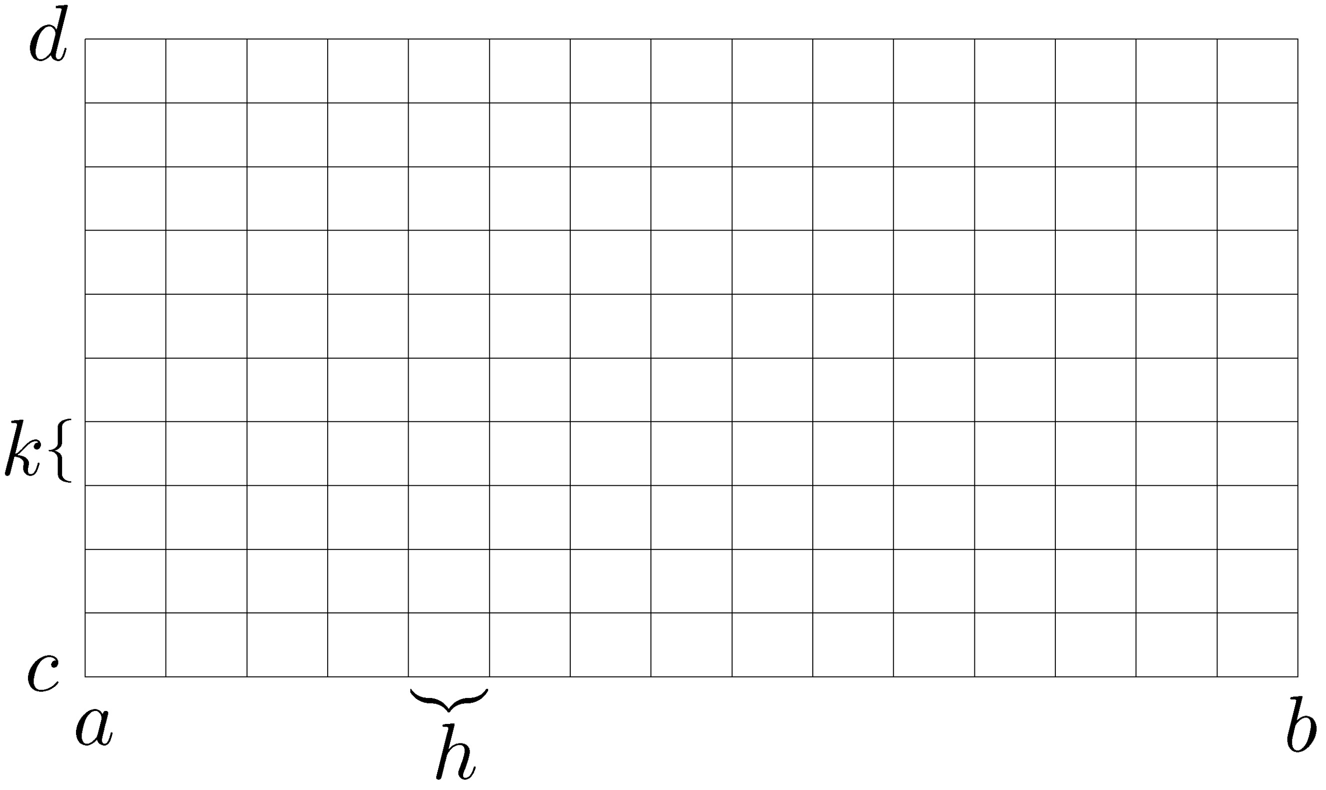
Integrování funkce 2 proměnných

Odvoďte obdélníkové a lichoběžníkové pravidlo pro integrování funkce 2 proměnných na obdélníku $\langle a, b\rangle \times \langle c, d\rangle$, tj.

$$\int\limits_a^b \Big(\int\limits_c^d f(x,y)\,dy \Big)\,dx$$

<u>Řešení:</u>

TRIAL

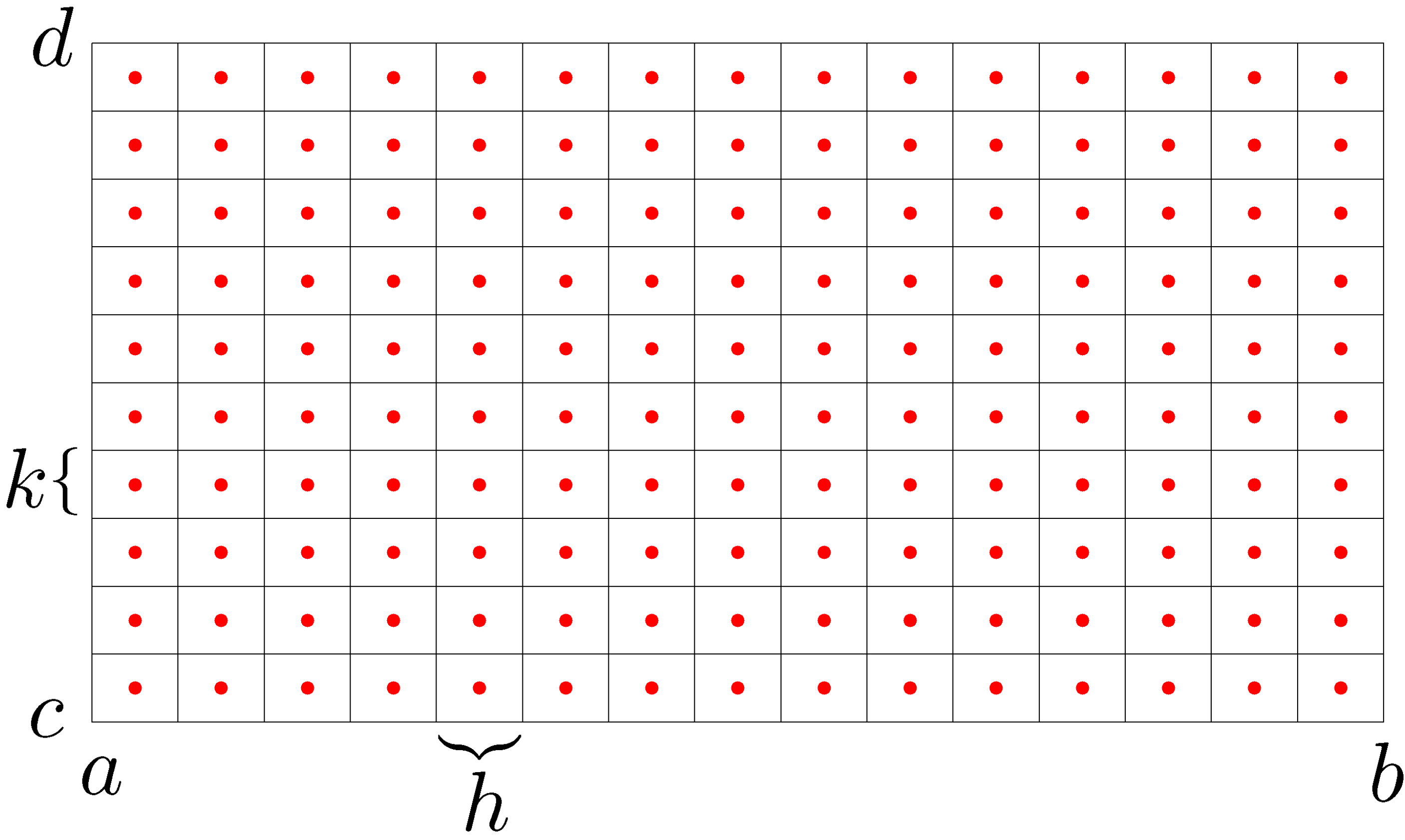


$$h = \frac{b-a}{N}, \quad k = \frac{d-c}{M}, \quad x_i = a + i \cdot h, \quad y_j = c + j \cdot k$$

$$\int\limits_a^b \Big(\int\limits_c^d f(x,y)\, dy \Big)\, dx = \ \ldots$$

- <u>obdélníkové pravidlo:</u>

$$\ldots = h \sum_{i=0}^{N-1} \left(\int\limits_c^d f\left(x_i + \frac{h}{2}, y\right)\, dy \right) = h \sum_{i=0}^{N-1} \left(k \sum_{j=0}^{M-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_j + \frac{k}{2}\right)\right) = \underline{hk \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{M-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_j + \frac{k}{2}\right.}$$

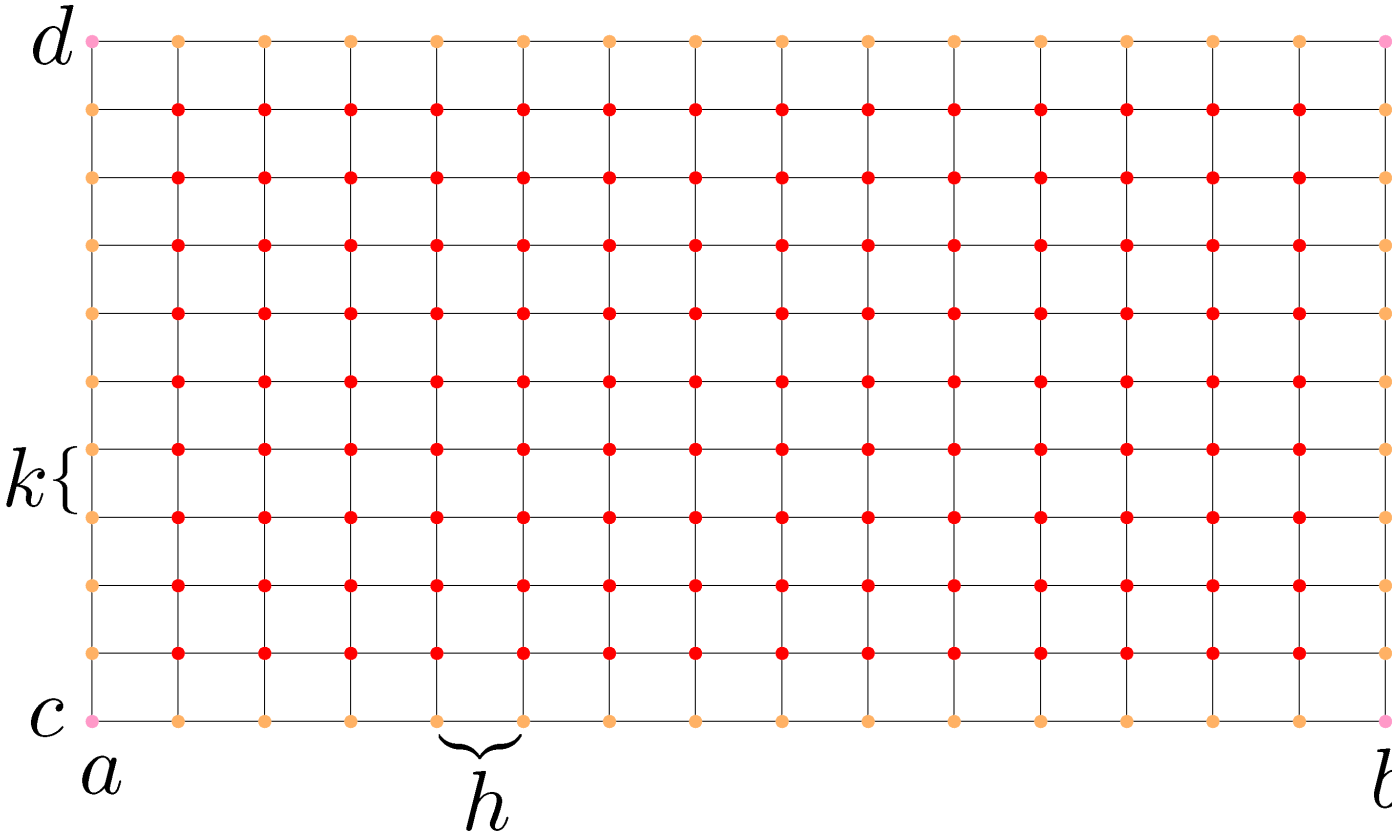


- lichoběžníkové pravidlo:

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

$$= \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{N-1}\left(\frac{k}{2}\sum_{j=0}^{M-1}\left[f(x_i,y_j)+f(x_i,y_{j+1})\right]+\frac{k}{2}\sum_{j=0}^{M-1}\left[f(x_{i+1},y_j)+f(x_{i+1},y_{j+1})\right]\right) =$$

$$= \underline{\frac{h}{2}\frac{k}{2}\sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{M-1}\left[f(x_i,y_j)+f(x_i,y_{j+1})+f(x_{i+1},y_j)+f(x_{i+1},y_{j+1})\right]}$$


d
$k\{$
c
a
h
b