FAKULTA MECHATRONIKY,
INFORMATIKY A MEZIOBOROVÝCH
STUDIÍ TUL

Numerický výpočet integrálu

SEM2 – LS 2023/2024

Pavel Exner, Petr Rálek
NTI, FM TUL

pavel.exner@tul.cz, petr.ralek@tul.cz

[edit: 17. dubna 2024]

Numerický výpočet určitého integrálu I

Budeme se zabývat způsoby, jak lze spočítat určitý integrál

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

Numerický výpočet použijeme pokud

- nelze spočítat analyticky,
- analytický výpočet integrálu je velmi obtížný,
- funkce není zadána předpisem (ale např. tabulkou hodnot).

Numerický výpočet určitého integrálu II

Principem numerických metod pro výpočet integrálu je nahrazení integrované funkce f vhodnou aproximací φ.

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

- funkce φ je volena tak, aby se velmi snadno integrovala (např. polynom)
- integrál $I(\varphi)$ je dán analytickým předpisem, tzv. kvadraturní formulí

$$I(\varphi) = \sum_{i=0}^{N} w_i f_i,$$

kde $w_i \geq 0$ nazýváme *kvadraturní váhy*, $f_i := f(x_i)$ a x_i jsou *kvadraturní body*

Numerický výpočet určitého integrálu III

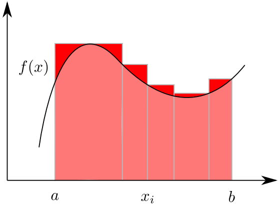
- předpokládáme, že body x_i jsou uspořádány vzestupně a platí

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b.$$

- kvadratury (konkrétní hodnoty w_i, x_i) jsou konstruovány tak, aby vždy integrovaly zcela přesně určité třídy funkcí (např. polynomy do určitého řádu)
- konkrétní hodnoty w_i, x_i hledáme tak, že funkci f nahradíme nějakou její interpolantou

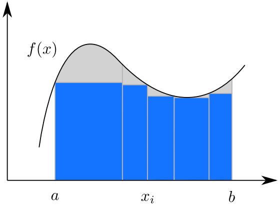
Riemannův integrál I

Jako motivaci připomeňme definici Riemannova integrálu.



horní součet

$$S = \sum_{i=1}^{N} \sup_{x \in [x_{i-1} x_i]} \left[f(x)(x_i - x_{i-1}) \right]$$



dolní součet

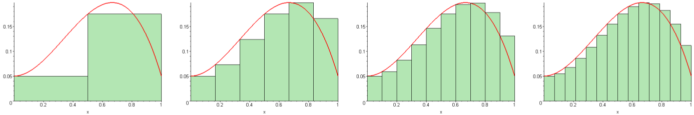
$$S = \sum_{i=1}^{N} \sup_{x \in [x_{i-1} x_i]} \left[f(x)(x_i - x_{i-1}) \right]$$

Pokud existují takové dělení intervalu $D(a, b)$, že platí $\sup_D s(D) = \inf_D S(D)$, potom jsou tyto rovny integrálu $I(f)$.

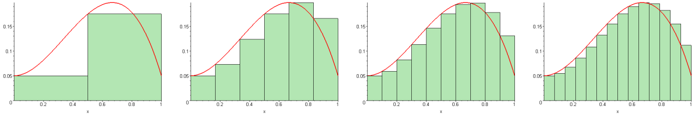
Tip: https://www.geogebra.org/m/T5cPPUs5

Riemannův integrál II

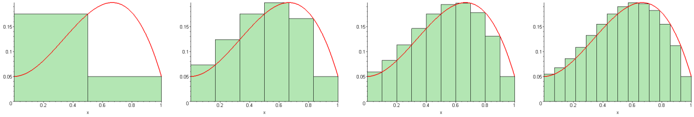
- vhodně zvolené dělení intervalu D může být první jednoduchou kvadraturní formuli, kde funkci f nahrazujeme konstantou
- funkční hodnoty můžeme brát v začátku/středu/konci jednotlivých intervalů $[x_{i-1}, x_i]$
- váhy $w_i = x_i - x_{i-1}$ pak odpovídají jejich délce
- získáme tak tzv. levou/střední/pravou Riemannovu sumu



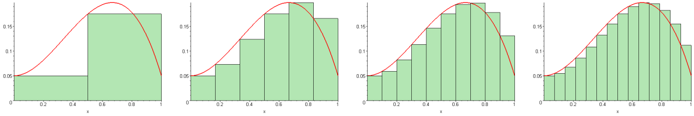
Obrázek: Levá Riemannova suma



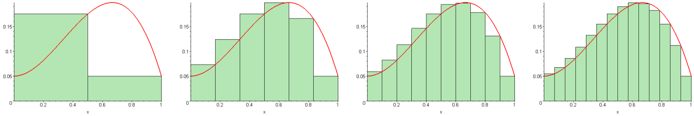
Obrázek: Levá Riemannova suma



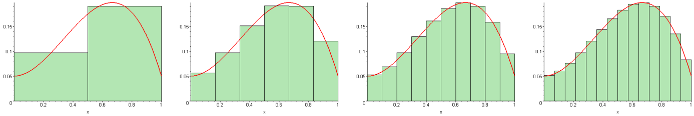
Obrázek: Pravá Riemannova suma



Obrázek: Levá Riemannova suma



Obrázek: Pravá Riemannova suma



Obrázek: Střední Riemannova suma

Kvadraturní vzorce I

Uveďme nyní několik základních kvadraturních vzorců

$$I(f) \approx I(\varphi) = Q = \sum_{i=0}^{N} w_i f_i$$

založených na interpolaci polynomy, tedy $\varphi \in P_k(a, b)$.

Pro numerickou kvadraturu definujeme chybu

$$E(f) = \left| I(f) - \sum_{i=0}^{N} w_i f(x_i) \right| .$$

Zřejmě platí, že kvadratura je přesná, pokud $E = 0$. Řekneme, že kvadratura má **řád přesnosti** k, jestliže je přesná pro každý polynom stupně nejvýše k.

Kvadraturní vzorce II

Kvadraturní vzorce dělíme na:

- **uzavřené:** $w_0 > 0$, $w_N > 0$
- **otevřené:** $w_0 = w_N = 0$

Zmíníme zde 2 typy kvadratur:

1. **Newton-Cotesovy vzorce** používají rovnoměrné dělení intervalu:

$$x_i = a + ih, \qquad h = (a - b)/N,$$

   případně body $x_{i+\frac{1}{2}} := x_i + \frac{h}{2}$.

2. **Gaussovy kvadratury** při daném počtu kvadraturních bodů dávají přesný výsledek pro polynomy nejvyššího možného stupně

Kvadraturní vzorce III

Kvadratury lze kombinovat a skládat, tedy nejprve rozdělit interval $[a, b]$ na menší intervaly, na nichž použijeme kvadraturu a výsledky sečteme
$\rightarrow$ **složené** kvadraturní vzorce.

Newton-Cotesovy vzorce I

Předpokládejme spojité funkce f, pro odhad chyby také spojitost f''.

Obdélníkové pravidlo (Midpoint rule) je nejjednodušší kvadratura, která nahrazuje funkci f její konstantní interpolantou: $N = 1$, $w_0 = 0$, $w_{1/2} = h$, $w_1 = 0$. Tedy

$$Q_M \approx hf_{\frac{1}{2}}.$$

Z Taylorova rozvoje lze odvodit odhad chyby:

$$E_{Q_M} \leq \frac{h^3}{24} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| =: O\big(h^3 f''\big).$$

Protože každý polynom stupně 1 splňuje $f'' \equiv 0$, má obdélníkové pravidlo řád přesnosti 1.

Newton-Cotesovy vzorce II

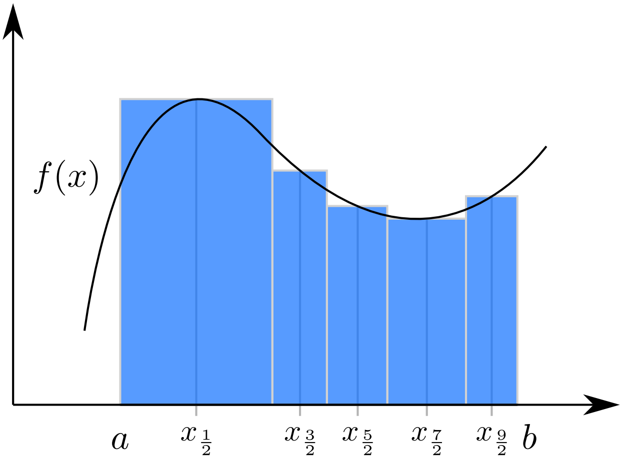
Složené obdélníkové pravidlo (Composed midpoint rule)
vznikne opakovaným použitím předchozího pravidla na intervalech (x_0, x_1), (x_1, x_2), ..., (x_{N-1}, x_N). Dostaneme:

$$Q_{CM} \approx h\big(f_{1/2} + f_{3/2} + \cdots + f_{N-3/2} + f_{N-1/2}\big),$$

$$E_{Q_{CM}} \leq \frac{Nh^3}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = O\big(h^2 f''\big).$$

Odpovídá již zmíněné střední Riemmanově sumě.

Newton-Cotesovy vzorce III



Obrázek: Složené obdélníkové pravidlo

Newton-Cotesovy vzorce IV

Lichoběžníkové pravidlo (Trapezoidal rule) spočívá v nahrazení funkce f lineární interpolantou určenou hodnotami v krajních bodech intervalu: $N = 1$, $w_0 = w_1 = \frac{h}{2}$,

$$Q_T \approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1).$$

Stejně jako u obdélníkového pravidla dostaneme odhad chyby

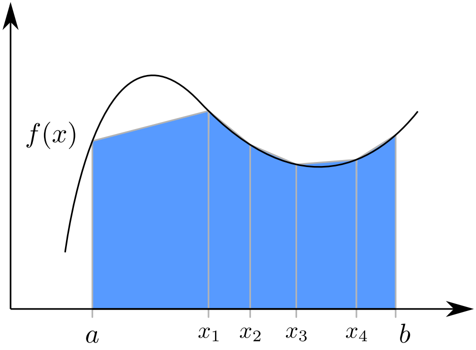
$$E_{Q_T} \leq \frac{h^3}{12} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| =: O(h^3 f'')$$

a pravidlo má řád přesnosti 1.

Newton-Cotesovy vzorce V

Složené lichoběžníkové pravidlo má tvar

$$Q_{CT} \approx h(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-2} + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N), \quad E_{Q_{CT}} = O(h^2 f'').$$



Newton-Cotesovy vzorce VI

Adaptivní lichoběžníkové pravidlo postupně zjemňuje dělení intervalu $[a, b]$, přičemž již spočtené hodnoty se využijí v dalším výpočtu. Vychází z rekurentního vzorce:

$$I_k = \frac{1}{2} I_{k-1} + \frac{b-a}{2^k} \Sigma_k,$$

kde I_k je intergrál spočtený složeným lichoběžníkovým pravidlem s $N = 2^k$ a

$$\Sigma_k := f_1 + f_3 + \cdots + f_{2^k - 1}.$$

Newton-Cotesovy vzorce VII

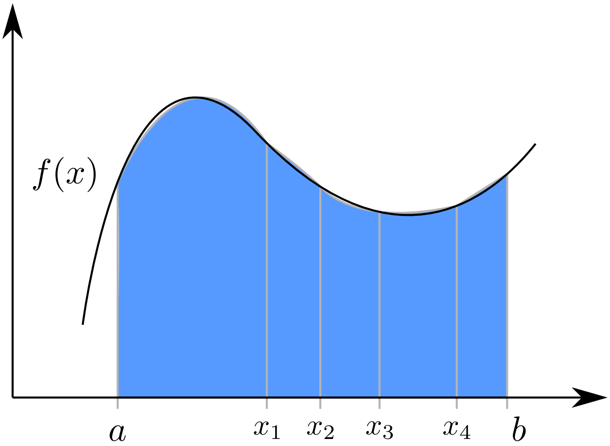
Simpsonovo pravidlo nahrazuje funkci f kvadratickou interpolantou, $N = 2$, $w_0 = w_2 = \frac{h}{3}$, $w_1 = \frac{4}{3}h$:

$$Q_S \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2),$$

$$E_{Q_S} = O(h^5 f^{(4)}),$$

jedná se tedy o pravidlo 3. řádu přesnosti.

Newton-Cotesovy vzorce VIII



Obrázek: Simpsonovo pravidlo

Gaussova kvadratura I

Gaussovy kvadraturní vzorce jsou navrženy tak, aby pro daný počet dělících bodů dosahovaly co nejvyššího řádu přesnosti. Platí, že při použití n kvadraturních bodů je řád Gaussovy kvadratury roven $2n - 1$.

1. nejjednodušší Gaussova kvadratura ($n = 1$) je obdélníkové pravidlo.
2. pro $n = 2$ má Gaussova kvadratura následující tvar:

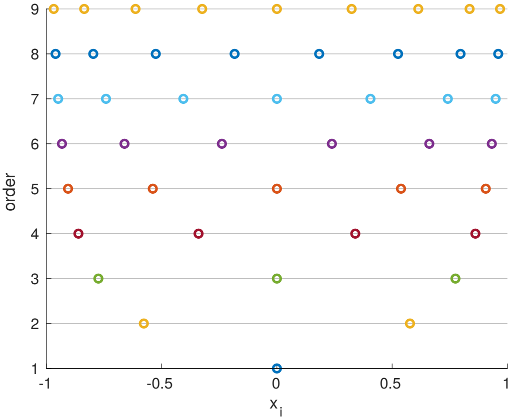
$$x_0 = \frac{b-a}{2}\sqrt{3} + \frac{a+b}{2}, \quad x_1 = \frac{a-b}{2}\sqrt{3} + \frac{a+b}{2}, \quad w_0 = w_1 = \frac{b-a}{2}$$

$$Q_2 \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1).$$

3. pravidla vyšších řádů se dají nalézt v literatuře (tabulka x_i, w_i na referenčním intervalu $[-1, 1]$ např. zde: https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_quadrature)

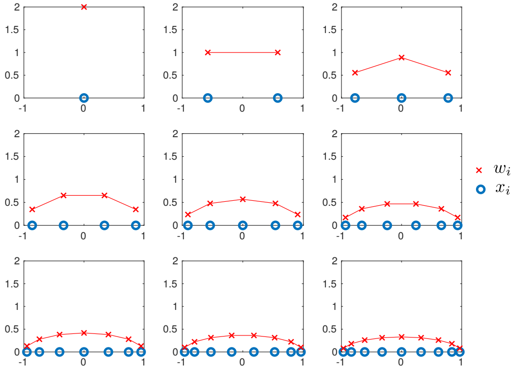
Gaussova kvadratura II

body Gaussovy kvadratury řádu 1-9 na intervalu $[-1, 1]$



Gaussova kvadratura III

body Gaussovy kvadratury řádu 1-9 na intervalu $[-1, 1]$



Pozn: součet vah je konstantní: $\sum_{i=1}^{n} w_i = b - a = 2$