

Numerické metody — numerická integrace

Mirko Navara

<http://cmp.felk.cvut.cz/~navara/>

katedra kybernetiky FEL ČVUT

Karlovo náměstí, budova G, místnost 104a

<https://moodle.fel.cvut.cz/courses/B4B01NUM>

20. listopadu 2023

Obsah

1	APROXIMACE FUNKCÍ	11
1.1	Typické úlohy	11
1.1.1	Aproximace funkcí v ekonomii	11
1.1.2	Aproximace funkcí v teorii pravděpodobnosti a matematické analýze	11
1.1.3	Aproximace funkcí v elektrotechnice	11
1.1.4	Základní úloha aproximace	12
1.2	Interpolace	13
1.2.1	Prostá interpolace	13
1.3	Interpolace polynomem	14
1.3.1	Lagrangeova konstrukce interpolačního polynomu	15
1.3.2	Newtonova konstrukce interpolačního polynomu	17
1.3.3	Nevillův algoritmus	18
1.3.4	Chyba aproximace interpolačním polynomem	19
1.3.5	Čebyševovy polynomy	22
1.3.6	Příklad použití interpolačního polynomu na reálných datech	24
1.3.7	Hermitův interpolační polynom	26
1.3.8	Aproximace Taylorovou řadou	27
1.4	Interpolace spliny	29
1.4.1	Kubický spline	29
1.4.2	Příklad použití splinu na reálných datech	32
1.5	Metoda nejmenších čtverců	34
1.5.1	Řešení aproximace podle kritéria nejmenších čtverců	35
1.5.2	Ortogonalizace	37
1.5.3	Aproximace goniometrickým polynomem	39
1.5.4	Čebyševova aproximace polynomem	40
2	NUMERICKÁ DERIVACE A RICHARDSONOVA EXTRAPOLACE	43
2.1	Formulace problému	43
2.2	Chyba metody u numerické derivace	44
2.2.1	Řád metod numerické derivace	44
2.3	Odhady chyb metody u numerické derivace	45
2.4	Doporučená délka kroku	46
2.5	Obecný princip Richardsonovy extrapolace	47
2.6	Využití Richardsonovy extrapolace v numerické derivaci	48
2.7	Odhad derivace z reálných dat	49

3	NUMERICKÁ INTEGRACE	60
3.1	Newtonovy-Cotesovy vzorce	61
3.1.1	Metoda levých obdélníků	62
3.1.2	Obdélníková metoda	62
3.1.3	Lichoběžníková metoda	63
3.1.4	Simpsonova metoda	63
3.1.5	Obecné Newtonovy-Cotesovy vzorce	64
3.2	Odhad chyby numerické integrace	64
3.3	Řád metod integrace	65
3.4	Numerická integrace reálných dat	66
3.5	Gaussova metoda integrace	67
3.6	Richardsonova extrapolace při integraci	68
3.6.1	Rombergova metoda	70
3.7	Praktické stanovení počtu intervalů	71
3.8	Řešení obtížnějších úloh úpravou zadání	72
3.8.1	Integrace přes nekonečný interval	72
3.8.2	Omezení intervalu	73
3.8.3	Pomalu konvergentní integrály	73
4	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC	75
4.1	Formulace problému	75
4.2	Metoda půlení intervalu neboli bisekce	75
4.3	Metoda regula falsi	75
4.4	Univerzální odhad chyby	76
4.5	Metoda sečen	77
4.6	Newtonova metoda (metoda tečen)	77
4.6.1	Odhad chyby Newtonovy metody	78
4.6.2	Konvergence Newtonovy metody	79
4.6.3	Náhrada derivace numerickým odhadem	79
4.7	Rychlost konvergence (řád metody)	80
4.7.1	Řád Newtonovy metody	82
4.7.2	Řád metody regula falsi	82
4.8	Kombinace startovacích a zpřesňujících metod	84
4.9	Metoda prosté iterace (MPI)	85
4.9.1	Kontraktivní funkce	86
4.9.2	Věta o pevném bodě	86
4.9.3	Optimalizace MPI	86
4.9.4	Řád metody prosté iterace	87
4.9.5	Kritéria pro výběr metody řešení rovnic	88
4.10	Podobné úlohy	88
4.10.1	Hledání násobných kořenů	88
4.10.2	Řešení algebraických rovnic neboli hledání kořenů polynomů	89
4.10.3	Řešení rovnic v komplexním oboru	89
4.10.4	Řešení soustav rovnic	89
5	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ROVNIC	91
5.1	Formulace úlohy a její obtíže	91
5.1.1	Druhy problémů	91
5.1.2	Špatná podmíněnost	91
5.1.3	Zdroje chyb	92
5.2	Přímé metody	92
5.2.1	Gaussova eliminace (GEM)	92
5.2.2	Výběr hlavního prvku	92
5.2.3	Gaussova-Jordanova redukce	93
5.2.4	LU-rozklad	93
5.2.5	Výpočet inverzní matice	94
5.2.6	Výpočet determinantu	94

5.2.7	Zpřesnění výsledků pomocí rezidua	95
5.3	Iterační metody	95
5.3.1	Normy vektorů a matic	95
5.3.2	Vlastní čísla a spektrální poloměr	99
5.3.3	Výpočet vlastních čísel	99
5.3.4	Maticové iterační metody	100
5.3.5	Jacobiova iterační metoda (JIM)	101
5.3.6	Gaussova-Seidelova iterační metoda (GSM)	101
5.3.7	Superrelaxační metoda (SOR – Successive OverRelaxation method)	102
5.4	Jaký postup volit?	103

3 NUMERICKÁ INTEGRACE

Úloha: Odhadnout

$$I = \int_a^b f(t) dt$$

na základě hodnot funkce f v konečně mnoha uzlových bodech x_0, \dots, x_{n-1} .

Používá se někdy i v případech, kdy existuje analytické řešení.

Příklad:

$$\int_a^b \sin^{100} t dt$$

je náročnou úlohou pro počítačové algebraické systémy, ale z numerického hlediska není nijak zvlášť obtížný.

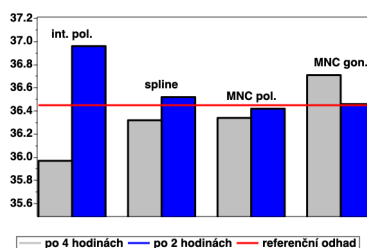
Nápad 1: Funkci f nahradíme aproximací φ , kterou umíme integrovat. Pokud je $|f - \varphi| \leq \varepsilon$,

$$\begin{aligned} \left| I - \int_a^b \varphi(t) dt \right| &= \left| \int_a^b (f(t) - \varphi(t)) dt \right| \\ &\leq \int_a^b |f(t) - \varphi(t)| dt \leq (b - a) \varepsilon. \end{aligned}$$

Příklad: Vyjdeme z motivační úlohy (teplota pacienta).

Přesný výsledek neznáme, ale za jeho dobrý odhad můžeme považovat aritmetický průměr všech dat, 36.45.

metoda	krok	počet údajů	odhad integrálu
interpolační polynom	4 hodiny	7	35.97
interpolační polynom	2 hodiny	13	36.96
spline	4 hodiny	7	36.32
spline	2 hodiny	13	36.52
MNČ pol. (6 param.)	4 hodiny	6	36.34
MNČ pol. (6 param.)	2 hodiny	6	36.42
MNČ gon. (6 param.)	4 hodiny	12	36.71
MNČ gon. (6 param.)	2 hodiny	12	36.46
referenční odhad	1 minuta	1440	36.45



Složitost dle použité metody.

Nápad 2: Pokud X je náhodná veličina s rovnoměrným rozdělením na $\langle a, b \rangle$, tj. s hustotou $f_X(t) = \frac{1}{b-a}$ na $\langle a, b \rangle$ (neplést f s f_X), pak je vzorec pro střední hodnotu

$$Ef(X) = \int_a^b f(t) f_X(t) dt = \int_a^b f(t) \frac{1}{b-a} dt = \frac{I}{b-a}.$$

Přibližný výsledek můžeme dostat simulací, kdy vybíráme t s rovnoměrným rozdělením na $\langle a, b \rangle$ a použijeme výběrový průměr z funkčních hodnot $f(t)$ (metoda Monte Carlo).

Spojitě rovnoměrné rozdělení ale neumíme doopravdy simulovat, takže ho aproximujeme diskrétním.

Riskujeme, že mohou být vybrány hodnoty jen z malé části intervalu $\langle a, b \rangle$ a výsledek může být hodně nepřesný.

Proto $\langle a, b \rangle$ rozdělíme na k intervalů, nejlépe stejné délky,

$$\langle a_j, a_{j+1} \rangle, \quad j = 0, \dots, k-1,$$

kde $a_0 = a$, $a_k = b$, $a_{j+1} - a_j = h = \frac{b-a}{k}$, z každého vezmeme stejný počet vzorků. Dostaneme **jednoduchý vzorec**, tj. odhad I_j^A integrálu

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(t) dt.$$

Sečtením dostaneme **složený vzorec**, tj. odhad

$$I^A = \sum_{j < k} I_j^A$$

integrálu

$$I = \sum_{j < k} I_j = \int_a^b f(t) dt.$$

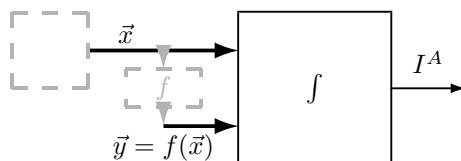
Nápad 3: Místo integrandu zintegrujeme jeho aproximaci interpolačním polynomem.

Místo náhrady v celém intervalu $\langle a, b \rangle$ použijeme v dílčích intervalech náhradu polynomem nízkého stupně, vedoucí na *jednoduchý vzorec*.

Linearita: Integrál závisí na integrandu lineárně, proto odhad integrálu závisí lineárně na $f(x_0), \dots, f(x_{n-1})$:

$$I^A = \sum_{i < n} w_i f(x_i),$$

Můžeme volit pouze uzlové body x_0, \dots, x_{n-1} a jejich váhy w_0, \dots, w_{n-1} .



3.1 Newtonovy-Cotesovy vzorce

Zjednodušení: Všechny dílčí intervaly mají stejnou délku

$$h = \frac{b-a}{k} = a_{j+1} - a_j.$$

Každý dílčí interval lze lineární substitucí převést na jednotkový interval $\langle 0, 1 \rangle$. Obecný případ dostaneme lineární substitucí

$$u = \frac{t - a_j}{h}, \quad t = a_j + h u,$$

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(t) dt = \int_0^1 h f(a_j + h u) du = \int_0^1 g_j(u) du,$$

$$g_j(u) = h f(a_j + h u),$$

Budeme potřebovat její m -tou derivaci

$$g_j^{(m)}(u) = h^{m+1} f^{(m)}(a_j + h u).$$

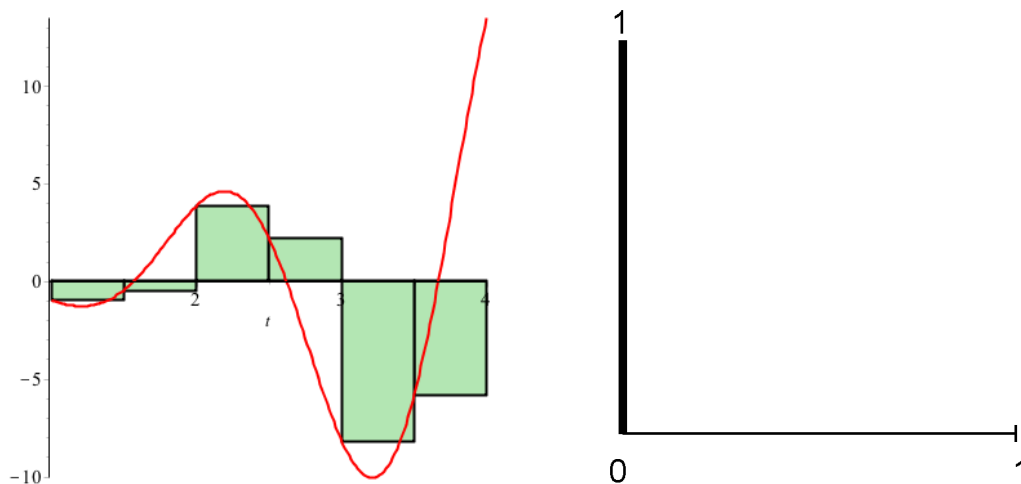
3.1.1 Metoda levých obdélníků

Jediný uzlový bod v krajním bodě intervalu, $u_0 = 0$; g_j nahradíme konstantou $g_j(u_0) = g_j(0)$.
Jednoduchý vzorec:

$$I_j^L = \int_0^1 g_j(0) dt = g_j(0) = h f(a_j).$$

Složený vzorec:

$$I^L = \sum_{j < k} I_j^L = h \sum_{j < k} f(a_j) = h \sum_{j < k} f(a + j h).$$



Rovnocenný je odhad pro volbu $u_0 = 1$, **metoda pravých obdélníků**.

3.1.2 Obdélníková metoda

Uzlový bod ve středu intervalu, $u_0 = 1/2$.

Proložíme konstantu $g_j(u_0) = g_j(1/2)$.

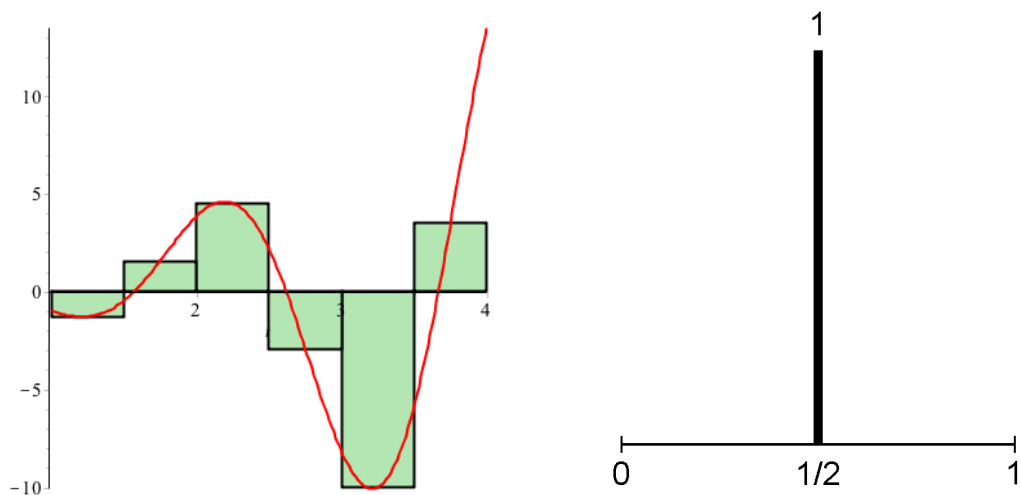
Jednoduchý vzorec:

$$I_j^R = \int_0^1 g_j(1/2) dt = g_j(1/2) = h f(a_j + h/2).$$

Složený vzorec:

$$I^R = \sum_{j < k} I_j^R = h \sum_{j < k} f(a_j + h/2) = h \sum_{j < k} f(a_{1/2} + j h),$$

kde $a_{1/2} = a + h/2$.



3.1.3 Lichoběžníková metoda

Dva uzlové body na krajích intervalu, $u_0 = 0$, $u_1 = 1$.

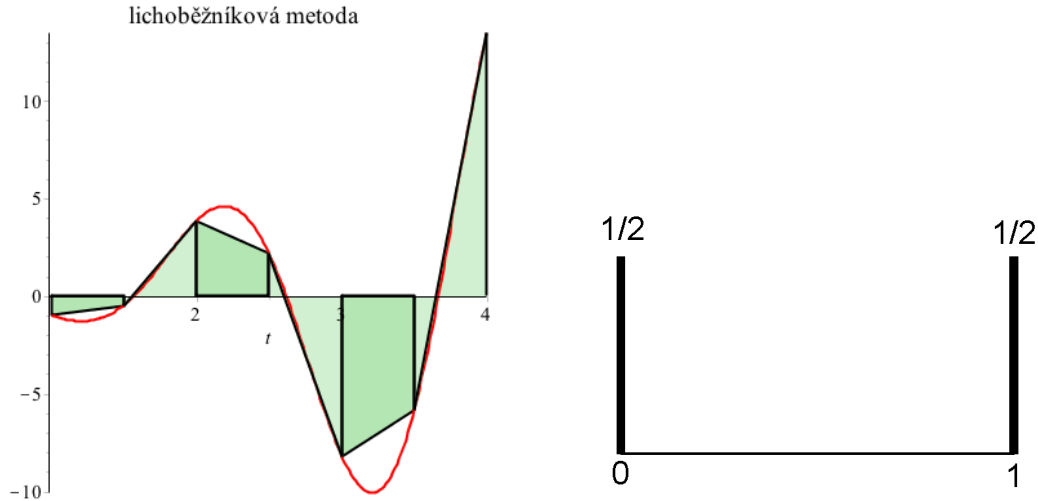
Proložíme lineární funkci, výsledkem bude plocha pod přímkou, neboli obsah lichoběžníka.

Jednoduchý vzorec:

$$I_j^T = \frac{g_j(u_0) + g_j(u_1)}{2} = \frac{g_j(0) + g_j(1)}{2} = h \frac{f(a_j) + f(a_{j+1})}{2}.$$

Složený vzorec:

$$I^T = \sum_{j < k} I_j^T = h \sum_{j < k} \frac{f(a_j) + f(a_{j+1})}{2} = h \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{j=1}^{k-1} f(a + jh) \right).$$



Ekvivalentní výklad je, že funkci g_j nahrazujeme

- v levé polovině intervalu, $\langle 0, 1/2 \rangle$ hodnotou v levém krajním bodě, $g_j(0)$,
- v pravé polovině intervalu, $(1/2, 1]$ hodnotou v pravém krajním bodě, $g_j(1)$.

3.1.4 Simpsonova metoda

Tři uzlové body; dva na krajích intervalu, jeden uprostřed, $u_0 = 0$, $u_1 = 1/2$, $u_2 = 1$. Proložíme kvadratický polynom a zintegrujeme.

Jednoduchý vzorec:

$$\begin{aligned} I_j^S &= w_0 g_j(u_0) + w_1 g_j(u_1) + w_2 g_j(u_2) \\ &= w_0 g_j(0) + w_1 g_j(1/2) + w_2 g_j(1). \end{aligned}$$

Vzorec bude přesný, bude-li g_j libovolný kvadratický polynom. Speciálně pro $g_j(u) \in \{1, u, u^2\}$:

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 + w_2 &= \int_0^1 1 \, du = 1, \\ \frac{1}{2} w_1 + w_2 &= \int_0^1 u \, du = \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{4} w_1 + w_2 &= \int_0^1 u^2 \, du = \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

To je soustava 3 lineárních rovnic pro 3 neznámé w_0 , w_1 , w_2 , řešení:

$$w_0 = \frac{1}{6}, \quad w_1 = \frac{2}{3}, \quad w_2 = \frac{1}{6}.$$

Ekvivalentní výklad je, že funkci g_j nahrazujeme

- na intervalu $\langle 0, 1/6 \rangle$ hodnotou v levém krajním bodě, $g_j(0)$,
- na intervalu $\langle 1/6, 5/6 \rangle$ hodnotou ve středu, $g_j(1/2)$,
- na intervalu $\langle 5/6, 1 \rangle$ hodnotou v pravém krajním bodě, $g_j(1)$.

Jednoduchý vzorec:

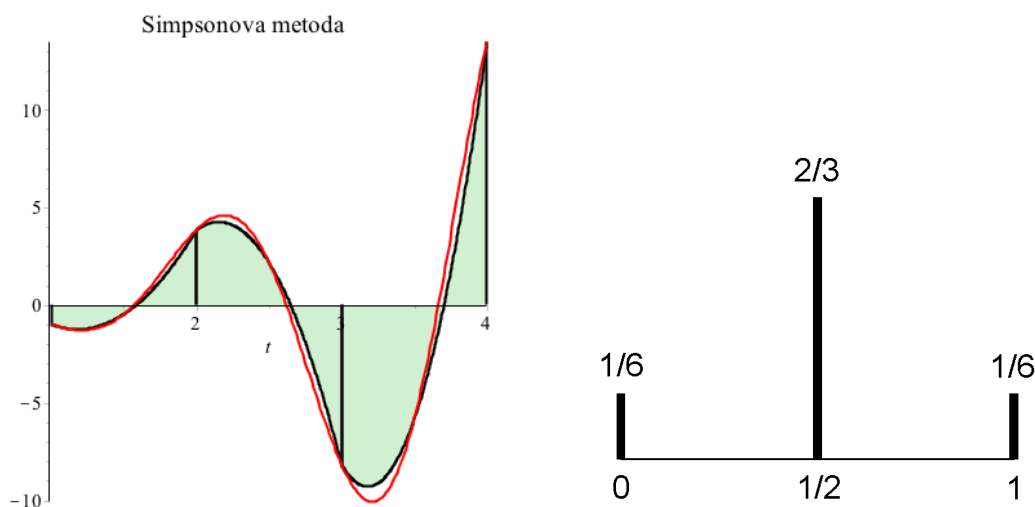
$$\begin{aligned} I_j^S &= \int_0^1 g_j(1/2) dt = \frac{1}{6} g_j(0) + \frac{2}{3} g_j(1/2) + \frac{1}{6} g_j(1) \\ &= \frac{h}{6} (f(a_j) + 4 f(a_j + h/2) + f(a_{j+1})) . \end{aligned}$$

Složený vzorec (kde $a_{1/2} = a + h/2$; **pozor na meze sum!**):

$$\begin{aligned} I^S = \sum_{j < k} I_j^S &= \frac{h}{6} \left(f(a_0) + f(a_k) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} f(a_j) + 4 \sum_{j=0}^{k-1} f(a_j + h/2) \right) \\ &= \frac{h}{6} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} f(a + j h) + 4 \sum_{j=0}^{k-1} f(a_{1/2} + j h) \right) . \end{aligned}$$

$$I^S = \frac{h_2}{3} (f(x_0) + 4 f(x_1) + 2 f(x_2) + 4 f(x_3) + \dots + 4 f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})) ,$$

kde $x_i = a + i h_2$ jsou uzlové body (pro funkci f , nikoli g_j) a $h_2 = h/2$ je vzdálenost mezi sousedními uzlovými body. Počet intervalů délky h_2 musí být sudý!



3.1.5 Obecné Newtonovy-Cotesovy vzorce

- **otevřené** (obdélníková metoda)
- **uzavřené** (lichoběžníková a Simpsonova metoda)
- **polootvřené** (metoda levých obdélníků)

3.2 Odhad chyby numerické integrace

Zjednodušení: pro lichoběžníkovou metodu.

Předpokládejme, že g_j má na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ spojitou druhou derivaci. Funkci g_j nahrazujeme lineárním polynomem φ_j ; chyba interpolace v bodě u je

$$|g_j(u) - \varphi_j(u)| \leq \frac{\max_{v \in \langle 0, 1 \rangle} |g_j''(v)|}{2} |(u-0)(u-1)| ,$$

$$\begin{aligned}
|I_j^T - I_j| &= \left| \int_0^1 \varphi_j(u) \, du - \int_0^1 g_j(u) \, du \right| \leq \int_0^1 |\varphi_j(u) - g_j(u)| \, du \\
&\leq \frac{\max_{v \in \langle 0,1 \rangle} |g_j''(v)|}{2} \int_0^1 (u - u^2) \, du = \frac{\max_{v \in \langle 0,1 \rangle} |g_j''(v)|}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) \\
&= \frac{1}{12} \max_{v \in \langle 0,1 \rangle} |g_j''(v)| = \frac{1}{12} h^3 \max_{t \in \langle a_j, a_{j+1} \rangle} |f''(t)|.
\end{aligned}$$

Vyjádříme pomocí

$$M_2 \geq \max_{t \in \langle a, b \rangle} |f''(t)|,$$

$$|I_j^T - I_j| \leq \frac{1}{12} h^3 M_2,$$

složený vzorec

$$|I^T - I| \leq \frac{k}{12} h^3 M_2,$$

po náhradě konstantního součinu $k h = b - a$

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

3.3 Řád metod integrace

Definice 3.1 *Nechť funkce I^A vyjadřuje výsledek integrační metody v závislosti na délce kroku, I je správný výsledek. Pokud existuje*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\ln |I^A(h) - I|}{\ln h},$$

*nazývá se **řád metody**.*

Poznámka 3.1 *V logaritmických souřadnicích má řád metody význam směrnice asymptoty v $(-\infty, -\infty)$.*

Platí analogie věty 2.1:

Věta 3.1 *Nechť funkce I^A vyjadřuje výsledek integrační metody v závislosti na délce kroku, I je správný výsledek. Nechť p je exponent u h v nejnižším nenulovém členu Taylorova rozvoje chyby metody podle h v okolí bodu 0. Pokud má I^A spojitou p -tou derivaci v 0, pak p je řád metody ve smyslu Definice 3.1.*

metoda	horní odhad chyby	řád
levých obdélníků	$\frac{(b-a) M_1}{2} h$	1
lichoběžníková	$\frac{(b-a) M_2}{12} h^2$	2
obdélníková	$\frac{(b-a) M_2}{24} h^2$	2
Simpsonova	$\frac{(b-a) M_4}{2880} h^4 = \frac{(b-a) M_4}{180} h_2^4$	4

Simpsonova metoda dává chybu nikoli třetího, ale čtvrtého řádu. Je-li f , a tedy i g_j , polynom stupně nejvýše 3, pak chyba interpolace kvadratickým polynomem je úměrná

$$W(u) = (u-0)(u-1/2)(u-1).$$

Na hodnotě integrálu se to neprojeví, neboť

$$\int_0^1 W(u) \, du = 0.$$

Příklad 1:

$$I = \int_0^2 e^{-t^2} dt$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$. Stanovte postačující počet kroků pro jednotlivé metody.

met.	M_p	horní odhad h	počet kroků
I^L	$\sqrt{\frac{2}{e}} \doteq 0.86$	$\frac{2 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 0.86} \doteq 1.16 \cdot 10^{-6}$	1 720 000
I^T	2	$\sqrt{\frac{12 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 2}} \doteq 1.7 \cdot 10^{-3}$	1155
I^R	2	$\sqrt{\frac{24 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 2}} \doteq 2.45 \cdot 10^{-3}$	817
I^S	12	$\sqrt[4]{\frac{2880 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 12}} \doteq 0.1$	20

Pro $k = 20$

$$I^L \doteq 0.9311046,$$

$$I^R \doteq 0.8821118,$$

$$I^T \doteq 0.8820204,$$

$$I^S \doteq 0.8820813,$$

$$\int_0^2 \exp(-t^2) dt \doteq 0.882081390.$$

3.4 Numerická integrace reálných dat

Vyjdeme z motivační úlohy (teplota pacienta).

Přesný výsledek neznáme, ale za jeho dobrý odhad můžeme považovat aritmetický průměr všech dat, 36.45.

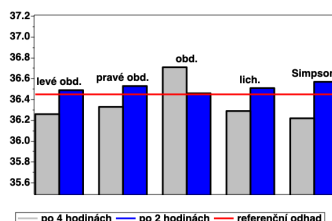
Zkusíme ho odhadnout z podstatně menšího počtu dat.

To bude pohodlnější pro pacienta i pro personál.

Obrázky by zde moc nového neřekly.

metoda	krok	interval měření	počet údajů	odhad integrálu
levých obdélníků	4 hodiny	4 hodiny	6	36.26
levých obdélníků	2 hodiny	2 hodiny	12	36.49
pravých obdélníků	4 hodiny	4 hodiny	6	36.33
pravých obdélníků	2 hodiny	2 hodiny	12	36.53
obdélníková	4 hodiny	4 hodiny	6	36.71
obdélníková	2 hodiny	2 hodiny	12	36.46
lichoběžníková	4 hodiny	4 hodiny	7	36.29
lichoběžníková	2 hodiny	2 hodiny	13	36.51
Simpsonova	8 hodin	4 hodiny	7	36.22
Simpsonova	4 hodiny	2 hodiny	13	36.57
referenční odhad	1 minuta	1 minuta	1440	36.45

Zde se výhoda Simpsonovy metody moc neuplatnila; přesnost jejího výsledku se opírala o $2 \times$ více dat.



To jsme dosáhli s **lineární** složitostí.

Pro **průběh** integrálu by bylo lépe použít aproximaci v celém rozsahu.

3.5 Gaussova metoda integrace

Na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ volíme za uzlové body kořeny $z_0, \dots, z_{s-1} \in \langle -1, 1 \rangle$ tzv. **Legendreových polynomů**. Lineární transformací

$$u = \frac{z+1}{2}, \quad z = 2u - 1$$

dostaneme uzlové body $u_0, \dots, u_{s-1} \in \langle 0, 1 \rangle$. Uzlové body a jejich váhy w_0, \dots, w_{s-1} jsou tabelovány nebo raději počítány algoritmem. Volíme pouze jejich počet s , a tím i řád metody.

s	uzlové body	váhy
1	0	2
2	$\pm \frac{1}{\sqrt{3}} \doteq \pm 0.577350$	1
3	$\pm \sqrt{\frac{3}{5}} \doteq \pm 0.774597$	$\frac{5}{9}$
	0	$\frac{8}{9}$
4	$\pm \sqrt{\frac{30+4\sqrt{30}}{70}} \doteq \pm 0.861136$	0.347855
	$\pm \sqrt{\frac{30-4\sqrt{30}}{70}} \doteq \pm 0.339981$	0.652145
5	$\pm \sqrt{\frac{70+4\sqrt{70}}{126}} \doteq \pm 0.906180$	0.236927
	$\pm \sqrt{\frac{70-4\sqrt{70}}{126}} \doteq \pm 0.538469$	0.478629
	0	0.568889

Jednoduchý vzorec:

$$I_j^{G(s)} = \sum_{i < s} w_i g_j(u_i) = h \sum_{i < s} w_i f(a_j + h u_i).$$

Složený vzorec:

$$I^{G(s)} = \sum_{j < k} I_j^{G(s)} = h \sum_{j < k} \sum_{i < s} w_i f(a_j + h u_i) = h \sum_{i < s} \left(w_i \sum_{j < k} f(d_i + j h) \right),$$

kde $d_i = a + h u_i \in \langle a_0, a_1 \rangle$. Horní odhad chyby

$$|I^{G(s)} - I| \leq \frac{(b-a)(s!)^4 M_{2s}}{(2s+1)((2s)!)^3} h^{2s},$$

kde

$$M_{2s} \geq \max_{v \in \langle a, b \rangle} |f^{(2s)}(v)|.$$

Chyba metody je řádu $2s$, díky volbě s uzlových bodů a s vah, tj. $2s$ parametrů. V Newtonových-Cotesových vzorcích jsme volbou s vah (při daných uzlových bodech) dostali metody řádu s nebo $s+1$.

počet uzlových bodů	horní odhad chyby	řád
1	$\frac{(b-a) M_2}{24} h^2$	2
2	$\frac{(b-a) M_4}{4320} h^4$	4
3	$\frac{(b-a) M_6}{2\,016\,000} h^6$	6
4	$\frac{(b-a) M_8}{1\,778\,112\,000} h^8$	8
5	$\frac{(b-a) M_{10}}{2\,534\,876\,467\,200} h^{10}$	10

Příklad 1 (pokračování):

$$I = \int_0^2 e^{-t^2} dt$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$.

I^A	M_p	horní odhad h	p. kroků
I^L	$\sqrt{\frac{2}{e}} \doteq 0.86$	$\frac{2 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 0.86} \doteq 1.16 \cdot 10^{-6}$	1 720 000
I^T	2	$\sqrt{\frac{12 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 2}} \doteq 1.7 \cdot 10^{-3}$	1155
I^R	2	$\sqrt{\frac{24 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 2}} \doteq 2.45 \cdot 10^{-3}$	817
I^S	12	$\sqrt[4]{\frac{2880 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 12}} \doteq 0.1$	20
$I^{G(2)}$	12	$\sqrt[4]{\frac{4320 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 12}} \doteq 0.115$	18
$I^{G(4)}$	1680	$\sqrt[8]{\frac{1\,778\,112\,000 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 1680}} \doteq 0.92$	3

3.6 Richardsonova extrapolace při integraci

Richardsonovou extrapolací dostaneme nový odhad

$$I^B(h) = \frac{q^p I^A(\frac{h}{q}) - I^A(h)}{q^p - 1} = I^A(\frac{h}{q}) + \frac{I^A(\frac{h}{q}) - I^A(h)}{q^p - 1}.$$

Výraz

$$\frac{I^A(\frac{h}{q}) - I^A(h)}{q^p - 1} \doteq I - I^A(\frac{h}{q})$$

můžeme rovněž považovat za odhad chyby výsledku $I^A(\frac{h}{q})$.

Speciálně pro $q = 2$ (**metoda polovičního kroku**):

$$I^B(h) = \frac{2^p I^A(\frac{h}{2}) - I^A(h)}{2^p - 1} = I^A(\frac{h}{2}) + \frac{I^A(\frac{h}{2}) - I^A(h)}{2^p - 1},$$

$$I - I^A(\frac{h}{2}) \doteq \frac{I^A(\frac{h}{2}) - I^A(h)}{2^p - 1}.$$

Extrapolaci nemusíme provádět až ve výsledném (složeném) vzorci, že ji přenést do jednoduchého vzorce a dokonce až do jeho vah. Jednoduché vzorce pro kroky h a h/q (kde q je celé číslo > 1) a výsledek Richardsonovy extrapolace lze napsat ve tvaru

$$I_j^A(h) = \sum_i w_i g_j(u_i),$$

$$I_j^A(h/q) = \sum_i \bar{w}_i g_j(u_i),$$

$$I_j^B(h) = \sum_i \bar{\bar{w}}_i g_j(u_i),$$

kde u_i označují všechny uzlové body potřebné pro obě délky kroků (nejsou-li některé uzlové body použity, odpovídající váhy jsou nulové). Index j označuje pořadí intervalu při kroku h , ostatní výsledky jsou tomu přizpůsobeny.

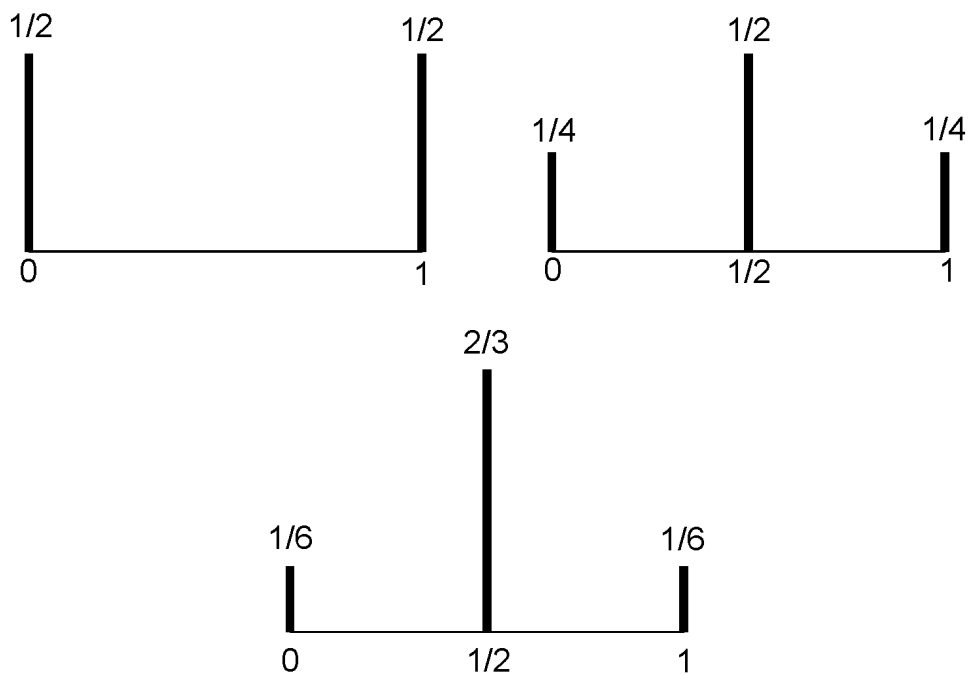
$$I_j^B(h) = \frac{q^p I_j^A(\frac{h}{q}) - I_j^A(h)}{q^p - 1} = \frac{q^p \sum_i \bar{w}_i g_j(u_i) - \sum_i w_i g_j(u_i)}{q^p - 1}$$

$$= \sum_i \frac{q^p \bar{w}_i - w_i}{q^p - 1} g_j(u_i) = \sum_i \bar{\bar{w}}_i g_j(u_i),$$

$$\bar{\bar{w}}_i = \frac{q^p \bar{w}_i - w_i}{q^p - 1},$$

což odpovídá Richardsonově extrapolaci uplatněné na váhy.

Pro lichoběžníkovou metodu lze doporučit $q = 2$



Polovina nových uzlových bodů (pro krok $h/2$) se kryje se starými (pro krok h); dostaneme odhad

$$I^T\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^T\left(\frac{h}{2}\right) - I^T(h)}{3} = \frac{2 I^R(h) + I^T(h)}{3},$$

shodný se Simpsonovou metodou.

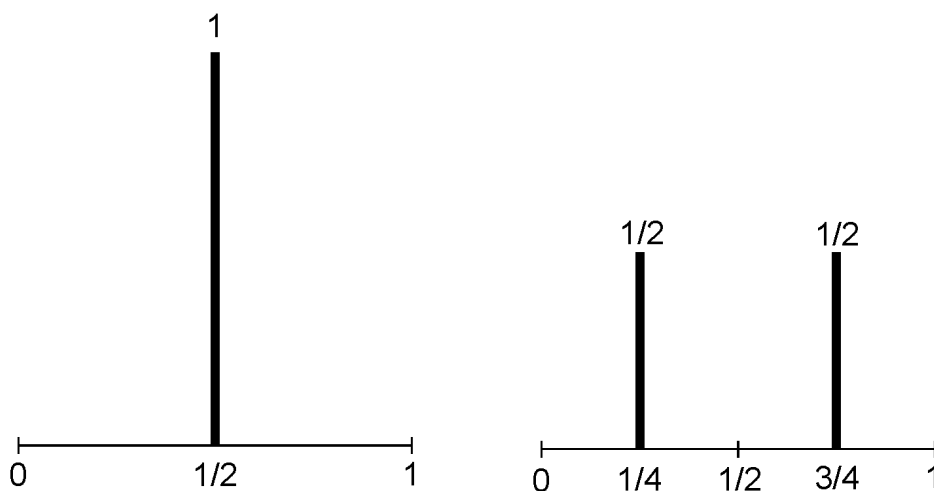
Richardsonovou extrapolací lze zpřesnit i Simpsonovu metodu, dostaneme odhad 6. řádu

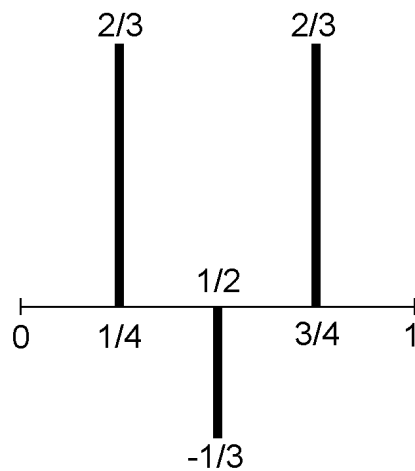
$$I^S\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^S\left(\frac{h}{2}\right) - I^S(h)}{15}.$$

Richardsonovou extrapolací pro obdélníkovou metodu s polovičním krokem dostaneme odhad

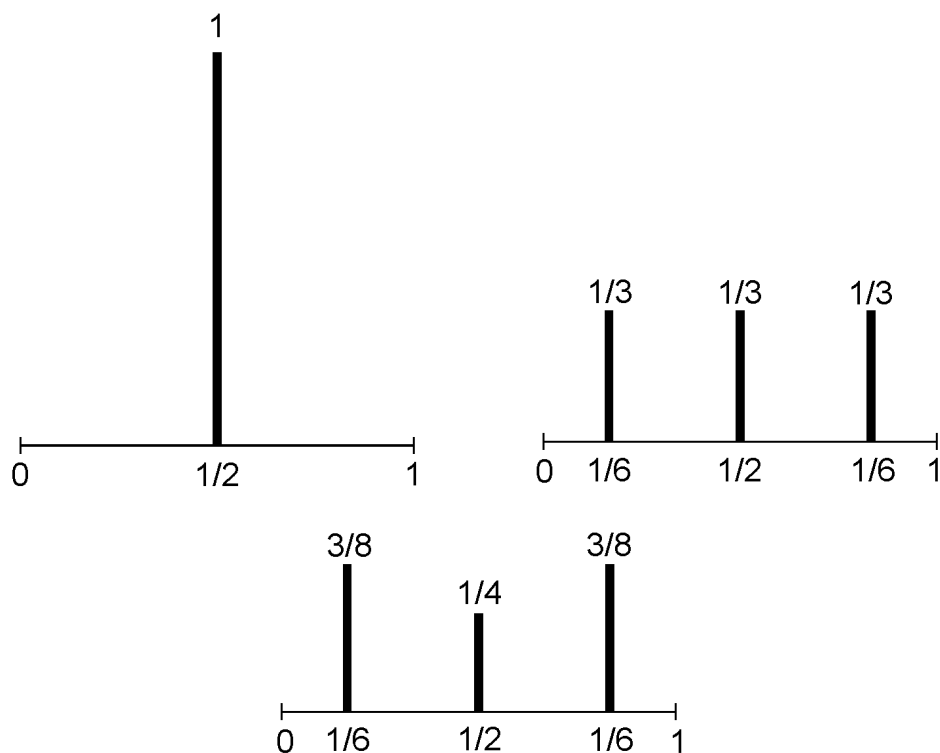
$$I^R\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^R\left(\frac{h}{2}\right) - I^R(h)}{3},$$

který se však nehodí:





Vhodnější je třetinový krok, $q = 3$,
$$I^R(\frac{h}{3}) + \frac{I^R(\frac{h}{3}) - I^R(h)}{8}.$$



3.6.1 Rombergova metoda

Vychází z více odhadů získaných lichoběžníkovou metodou pro kroky $h, h/2, h/4, \dots$

Taylorův rozvoj chyby lichoběžníkové metody má nenulové pouze členy sudého řádu. Proto se každou Richardsonovou extrapolací zvýší řád o dvě.

řád	2	4	6	8
k	$I^T(\frac{h}{k})$	$I^S(\frac{2h}{k})$		
k_0	$I^T(h) = I_{0,0}^T$			
$2k_0$	$I^T(\frac{h}{2}) = I_{1,0}^T$	$\searrow \rightarrow I_{1,1}^T$		
$4k_0$	$I^T(\frac{h}{4}) = I_{2,0}^T$	$\searrow \rightarrow I_{2,1}^T$	$\searrow \rightarrow I_{2,2}^T$	
$8k_0$	$I^T(\frac{h}{8}) = I_{3,0}^T$	$\searrow \rightarrow I_{3,1}^T$	$\searrow \rightarrow I_{3,2}^T$	$\searrow \rightarrow I_{3,3}^T$
\dots	\dots	\dots	\dots	$\dots \ddots$

Obecně ve sloupci $j+1$:

$$I_{i,j}^T = I_{i,j-1}^T + \frac{I_{i,j-1}^T - I_{i-1,j-1}^T}{4^j - 1}.$$

Za výsledek bereme $I_{i,i}^T$, chyba je řádu 2^i a odhadujeme ji zhruba výrazem $|I_{i,i-1}^T - I_{i-1,i-1}^T|$ nebo $|I_{i,i}^T - I_{i-1,i-1}^T|$.

Příklad 1 (pokračování): Výsledky Rombergovy metody pro $\int_0^2 e^{-t^2} dt$ s počáteční volbou 4 intervalů dělení:

řád	2	4	6	8
k	$I^T(\frac{h}{k})$	$I^S(\frac{2h}{k})$		
4	0.88061			
8	0.88170	0.8820655		
16	0.88170	0.8820803	<i>0.88208139</i>	
32	0.88205	<i>0.8820813</i>	<i>0.88208138</i>	<i>0.88208138</i>

S platnými ciframi *0.882081* se shodují výsledky vyznačené kurzívou.

Zde je výhoda Simpsonovy metody (sloupec s výsledky 4. řádu) zjevná.

Příklad 2: Výsledky Rombergovy metody pro $\int_0^\pi \sin^4 t dt$, s počáteční volbou 1 intervalu dělení:

řád	2	4	6	8	10
k	$I^T(\frac{h}{k})$	$I^S(\frac{2h}{k})$			
1	0				
2	1.57080	2.09440			
4	<i>1.17810</i>	1.0472	0.97738		
8	<i>1.17810</i>	<i>1.17810</i>	1.18683	1.19015	
16	<i>1.17809</i>	<i>1.17809</i>	<i>1.17809</i>	<i>1.17795</i>	<i>1.17790</i>

S platnými ciframi *1.178* se shodují výsledky vyznačené kurzívou. Zde extrapolace nebyla úspěšná, naopak zhoršila výsledky. Důvodem je nevhodně zvolený malý počet intervalů na začátku.

3.7 Praktické stanovení počtu intervalů

- Z horního odhadu chyby.
- Metoda dvojího (nejčastěji polovičního) kroku.

Příklad 1 (pokračování):

$$I = \int_0^2 e^{-t^2} dt$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$. Simpsonova metoda s kroky 2 a 1:

$$\begin{aligned} I^S(2) &\doteq 0.8299444, \\ I^S(1) &\doteq 0.8818124. \end{aligned}$$

Odhad chyby metodou polovičního kroku je

$$\frac{|I^S(1) - I^S(2)|}{15} \doteq 0.0034578,$$

požadovaná chyba je zhruba $3458\times$ menší, což vyžaduje zvýšit počet kroků v poměru alespoň $\sqrt[4]{3458} \doteq 7.7$. Pro $4\times$ a $8\times$ menší krok, tj. pro 8 a 16 intervalů dělení:

$$\begin{aligned} I^S\left(\frac{2}{8}\right) &\doteq 0.882080396576, \\ I^S\left(\frac{2}{16}\right) &\doteq 0.882081328646. \end{aligned}$$

Odhad chyby posledního výsledku je

$$\frac{|I^S(\frac{2}{16}) - I^S(\frac{2}{8})|}{15} \doteq 6.3 \cdot 10^{-8}.$$

(Již víme, že postačuje 20 intervalů dělení.) Richardsonova extrapolace:

$$I^S\left(\frac{2}{16}\right) + \frac{I^S(\frac{2}{16}) - I^S(\frac{2}{8})}{15} \doteq 0.882081390784,$$

Přesnější výsledek je

$$0.8820813907624216800.$$

Příklad 3:

$$I = \int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-8}$. Zkusíme 5-bodovou Gaussovu metodu (10. řádu) s kroky 1 a $\frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} I^{G(5)}(1) &\doteq 0.621166517, \\ I^{G(5)}\left(\frac{1}{2}\right) &\doteq 0.620759367. \end{aligned}$$

Odhad chyby metodou polovičního kroku je

$$\frac{|I^{G(5)}(\frac{1}{2}) - I^{G(5)}(1)|}{2^{10} - 1} \doteq 4 \cdot 10^{-7},$$

požadovaná chyba je zhruba $40\times$ menší, což vyžaduje zvýšit počet kroků v poměru alespoň $\sqrt[10]{40} \doteq 1.5$. Měl by tedy stačit $2\times$ menší krok, tj. 4 intervaly dělení:

$$\begin{aligned} I^{G(5)}\left(\frac{1}{2}\right) &\doteq 0.620759367 \\ I^{G(5)}\left(\frac{1}{4}\right) &\doteq 0.620615367. \end{aligned}$$

Odhad chyby posledního výsledku je

$$\frac{|I^{G(5)}(\frac{1}{4}) - I^{G(5)}(\frac{1}{2})|}{2^{10} - 1} \doteq 1.4 \cdot 10^{-7},$$

tedy jen asi třikrát menší, ač se měl zmenšit v poměru $2^{10} = 1024$.

Přesnější výsledek je

$$0.62053660344676220362.$$

3.8 Řešení obtížnějších úloh úpravou zadání

3.8.1 Integrace přes nekonečný interval

Příklad 4:

$$I = \int_2^\infty e^{-t^2} dt$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$.

I nekonečný obor integrace lze (nelineární) substitucí převést na konečný $\langle 0, 1 \rangle$, zde např. $t = 1/u$:

$$I = \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-\frac{1}{u^2}}}{u^2} du.$$

Můžeme využít známé určité integrály, např.

$$I = \int_2^\infty e^{-t^2} dt = \underbrace{\int_0^\infty e^{-t^2} dt}_{\sqrt{\pi}/2} - \int_0^2 e^{-t^2} dt,$$

Můžeme se omezit na konečný interval a zbytek zanedbat. V našem případě lze použít odhad (se substitucí $t - x = u$)

$$\begin{aligned} \int_x^\infty e^{-t^2} dt &= e^{-x^2} \int_0^\infty e^{-2xu - u^2} du \\ &\leq e^{-x^2} \int_0^\infty e^{-2xu} du = \frac{e^{-x^2}}{2x}. \end{aligned}$$

Pro $x \geq 3.85$ je tento výraz menší než $\frac{\varepsilon}{2}$, takže stačí vypočítat

$$\int_2^{3.85} e^{-t^2} dt$$

s přesností $\frac{\varepsilon}{2}$.

3.8.2 Omezení intervalu

se může hodit, i když obor integrace je konečný:

Příklad 5:

$$\int_2^{1000} e^{-t^2} dt$$

Simpsonovou metodou s 1000 kroky:

$$0.0043821,$$

4-bodovou Gaussovou metodou se 100 kroky:

$$0.0012304,$$

Dopustíme se chyby menší než $\frac{\varepsilon}{2} = 5 \cdot 10^{-7}$, snížíme-li horní mez na 3.85. Pak stačí Simpsonova metoda s 23 kroky

$$0.00414549.$$

Přesnější výsledek je

$$0.00414553469.$$

3.8.3 Pomalu konvergentní integrály

Přičtení známého určitého integrálu může zásadně změnit obtížnost numerického výpočtu:

Příklad 3 (pokračování):

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$$

Integrand má v okolí nuly neomezenou derivaci. V okolí nuly je $\sin t \approx t$, $\frac{\sin t}{\sqrt{t}} \approx \sqrt{t}$. Derivace je sice nadále neomezená, ale známe

$$\int_0^1 \sqrt{t} dt = \frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}}.$$

Rozdíl $\frac{\sin t}{\sqrt{t}} - \sqrt{t}$ má derivace omezené a jeho integrace nečiní zvláštní potíže. Výpočet 5-bodovou Gaussovu metodu (10. řádu) se dvěma a čtyřmi intervaly dělení dává

$$\begin{aligned} \int_0^1 \left(\frac{\sin t}{\sqrt{t}} - \sqrt{t} \right) dt &\doteq \\ I^{G(5)}\left(\frac{1}{2}\right) &\doteq -0.046130081752, \\ I^{G(5)}\left(\frac{1}{4}\right) &\doteq -0.046130064858. \end{aligned}$$

Odhad chyby metodou polovičního kroku:

$$\frac{|I^{G(5)}(\frac{1}{4}) - I^{G(5)}(\frac{1}{2})|}{2^{10} - 1} \doteq 1.7 \cdot 10^{-11}.$$

Přesnější výsledek je

$$-0.04613006321990446305$$

Výsledek původního zadání je

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt &= \int_0^1 \sqrt{t} dt + \int_0^1 \left(\frac{\sin t}{\sqrt{t}} - \sqrt{t} \right) dt \\ &\doteq \frac{2}{3} - 0.04613006486 \\ &\doteq 0.62053660181 \end{aligned}$$

(přesněji 0.6205366034467622036).

Substituce funkcí, která má v odpovídajícím bodě c nulové derivace dostatečně mnoha řádů, např. $t = c + u^s$, kde exponent s volíme raději vyšší než nižší.

Příklad 3 (pokračování):

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$$

Substitucí $t = u^2$ dostaneme

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt = \int_0^1 2 \sin u^2 du.$$

5-bodová Gaussova metoda (10. řádu) s jedním a dvěma intervaly dělení:

$$\begin{aligned} I^{G(5)}(1) &\doteq 0.620536620796, \\ I^{G(5)}\left(\frac{1}{2}\right) &\doteq 0.620536603496, \end{aligned}$$

odhad chyby metodou polovičního kroku

$$\frac{|I^{G(5)}(\frac{1}{2}) - I^{G(5)}(1)|}{2^{10} - 1} \doteq 1.7 \cdot 10^{-11}.$$

Chtěli bychom, aby se integrand v okolí problémového bodu blížil konstantě; mohli jsme použít též substituci $\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} = u$ s dobrým výsledkem.

Příklad 6:

$$\int_1^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$$

s přesností 10^{-8} . Omezení na konečný obor nepomůže, neboť např.

$$\int_{999997}^{1000000} \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt \doteq 0.0019.$$

Hledaný integrál není absolutně konvergentní, nicméně

$$\int_0^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt = \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^M \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}}.$$

Potřebujeme

$$\begin{aligned} \int_1^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt &= \int_0^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt - \int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt \\ &\doteq \sqrt{\frac{\pi}{2}} - 0.620536601808 \doteq 0.632777535507, \end{aligned}$$

kde ovšem integrál $\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$ byl rovněž problémový; využili jsme řešení příkladu 3. Přesnější výsledek je

$$0.6327775338746013102.$$

Dodatek: Přehled značení

Popis je zjednodušený a nemusí být přesný, podrobnosti jsou v textu. Značení použité jen lokálně zde není uvedeno.

Značení specifické pro tuto kapitolu

$I = \int_a^b f(t) dt$... hledaný integrál

k ... počet kroků numerické integrace

h ... délka kroku numerické integrace

$a_0 = a, a_1, a_2, \dots, a_k = b$... dělicí body intervalu $\langle a, b \rangle$

$h = 2h = \frac{b-a}{k} = a_{j+1} - a_j$... délka kroku numerické integrace

$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(t) dt, j = 1, 2, \dots$... dílčí integrály (výsledky jednoduchých vzorců)

$g_j(u) = h f(a_j + hu)$... integrand po lineární transformaci argumentu $\langle a_j, a_{j+1} \rangle \rightarrow [0, 1]$

$I^A, I^L, I^R, I^T, I^S, I^{G(s)}$... aproximace integrálu jednotlivými metodami (obecná, levých obdélníků, obdélníková, lichoběžníková, Simpsonova, Gaussova s -bodová); s indexem j výsledky jednoduchých vzorců na $\langle a_j, a_{j+1} \rangle$; následuje-li argument v závorce, je to délka kroku

u_0, u_1, \dots ... uzlové body na intervalu $[0, 1]$

w_0, w_1, \dots ... váhy uzlových bodů na intervalu $[0, 1]$

x_0, x_1, \dots ... uzlové body na intervalu $\langle a, b \rangle$

p ... řád metody

Značení používané podobně v celém předmětu

M_j ... horní odhad absolutní hodnoty j -té derivace funkce, $|f^{(j)}| \leq M_j$ na použitém intervalu

Literatura

- [Navara, Němeček] Navara, M., Němeček, A.: *Numerické metody*. ČVUT, Praha, dotisk 2005.
- [Knuth] Knuth, D.E.: *Fundamental Algorithms*. Vol. 1 of *The Art of Computer Programming*, 3rd ed., Addison-Wesley, Reading, MA, 1997.
- [Num. Recipes] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P.: *Numerical Recipes (The Art of Scientific Computing)*. 3rd edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
<http://www.nrbook.com/a/bookcpdf.php>
- [Handbook Lin. Alg.] Hogben, L. (ed.): *Handbook of Linear Algebra*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton/London/New York, 2007.