Numerická integrace

Mirko Navara
Centrum strojového vnímání
katedra kybernetiky FEL ČVUT
Karlovo náměstí, budova G, místnost 104a
http://cmp.felk.cvut.cz/~navara/nm

2. ledna 2019

Úloha: Odhadnout

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

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

Pokud se aproximace φ na intervalu $\langle a, b\rangle$ liší od f nejvýše o ε, pak

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

Příklad:

$$\int_a^b \sin^{100} t\,\mathrm{d}t$$

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

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

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

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

Zjednodušení: Funkci f aproximujeme interpolačním polynomem.

$\langle a, b\rangle$ rozdělíme na k intervalů

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

kde $a_0 = a$, $a_k = b$. V dílčích intervalech použijeme náhradu polynomem nízkého stupně, vedoucí na tzv. **jednoduchý vzorec**, tj. odhad A_j integrálu

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

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

$$A = \sum_{j<k} A_j$$

integrálu

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

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

$$u = \frac{t - a_j}{H}, \qquad t = a_j + H\,u,$$

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(t)\,\mathrm{d}t = \int_0^1 H\,f(a_j + H\,u)\,\mathrm{d}u = \int_0^1 g_j(u)\,\mathrm{d}u,$$

$$\begin{aligned} g_j(u) &= H\,f(a_j + H\,u), \\ g_j^{(m)}(u) &= H^{m+1}\,f^{(m)}(a_j + H\,u). \end{aligned}$$

1 Newtonovy-Cotesovy vzorce

Uzlové body ekvidistantní

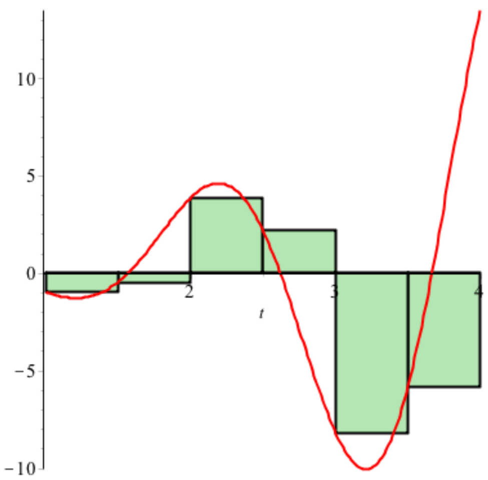
1.1 Metoda levého odhadu

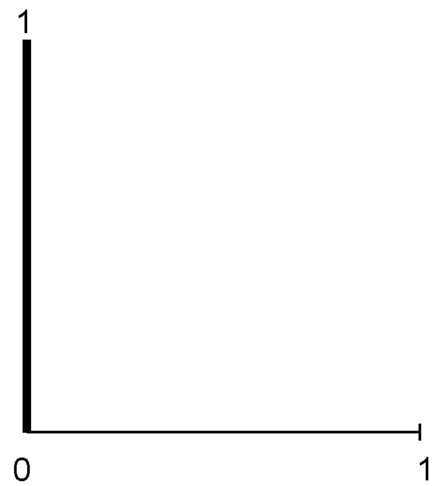
Jediný uzlový bod v krajním bodě intervalu, $u_0 = 0$; g_j nahradíme konstantou $g_j(u_0) = g_j(0)$. Jednoduchý vzorec:

$$L_j = \int_0^1 g_j(0)\,\mathrm{d}t = g_j(0) = H\,f(a_j)$$

Složený vzorec:

$$L = \sum_{j<k} L_j = H \sum_{j<k} f(a_j) = H \sum_{j<k} f(a + j\,H).$$





Rovnocenný je odhad pro volbu $u_0 = 1$, **metoda pravého odhadu**

1.2 Obdélníková metoda

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

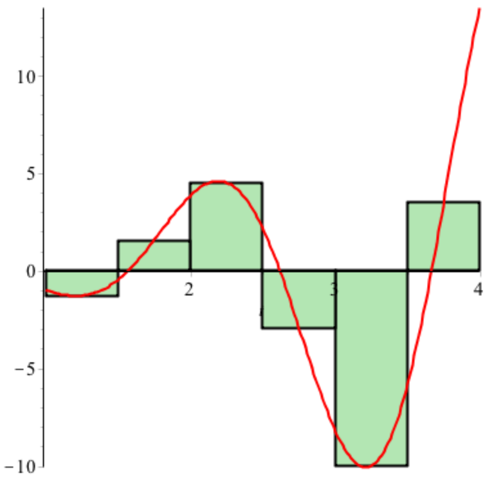
Proložíme konstantu $g_j(u_0) = g_j(1/2)$. Jednoduchý vzorec:

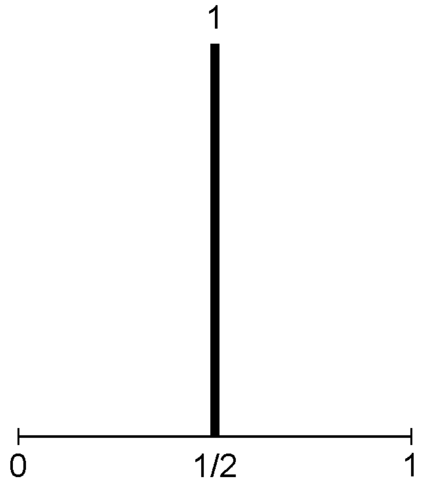
$$R_j = \int_0^1 g_j(1/2)\,\mathrm{d}t = g_j(1/2) = H\,f(a_j + H/2)$$

Složený vzorec:

$$R = \sum_{j<k} R_j = H \sum_{j<k} f(a_j + H/2) = H \sum_{j<k} f(a_{1/2} + j\,H),$$

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





1.3 Lichoběžníková metoda

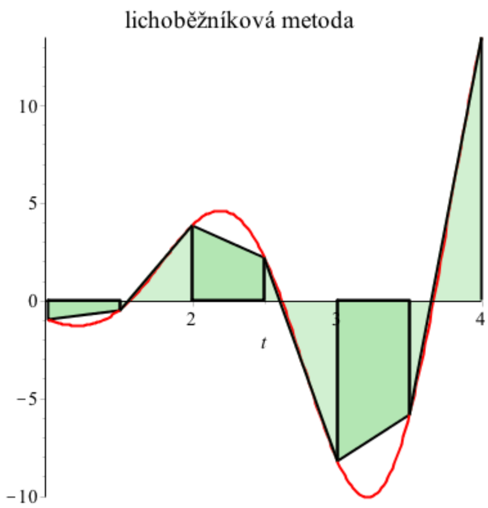
Dva uzlové body na krajích intervalu, $u_0 = 0$, $u_1 = 1$

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

$$T_j = \frac{g_j(u_0) + g_j(u_1)}{2} = \frac{g_j(0) + g_j(1)}{2} = H\,\frac{f(a_j) + f(a_{j+1})}{2}$$

Složený vzorec:

$$T = \sum_{j<k} T_j = H \sum_{j<k} \frac{f(a_j) + f(a_{j+1})}{2} = H \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{j=1}^{k-1} f(a + j\,H) \right) .$$



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:

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

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

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

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

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

Jednoduchý vzorec:

$$\begin{aligned} S_j &= \int_0^1 g_j(1/2) \, \mathrm{d}t = \frac{1}{6} \, g_j(0) + \frac{2}{3} \, g_j(1/2) + \frac{1}{6} \, g_j(1) \\ &= \frac{H}{6} \, \left(f(a_j) + 4 \, f(a_j + H/2) + f(a_{j+1})\right) \end{aligned}$$

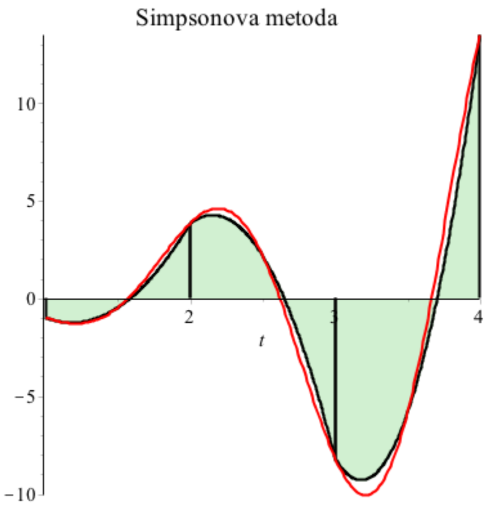
Složený vzorec:

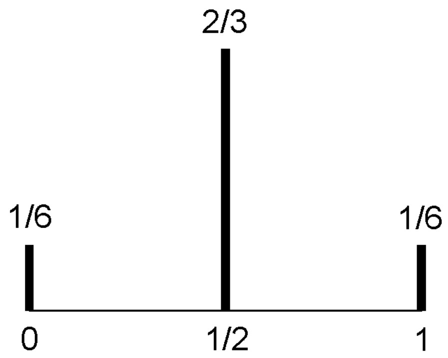
$$\begin{aligned} S &= \sum_{j<k} S_j \\ &= \frac{H}{6} \left(f(a_0) + f(a_k) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} f(a_j) + 4 \sum_{j=0}^{k-1} f(a_j + H/2) \right) \\ &= \frac{H}{6} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} f(a + j \, H) + 4 \sum_{j=0}^{k-1} f(a_{1/2} + j \, H) \right) , \end{aligned}$$

kde $a_{1/2} = a + H/2$ (*pozor na meze sum!*).

$$S = \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4 \, f(x_1) + 2 \, f(x_2) + 4 \, f(x_3) + \ldots + 4 \, f(x_{2\,k-1}) + f(x_{2\,k}) \right) ,$$

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





1.5 Obecné Newtonovy-Cotesovy vzorce

- **otevřené** (obdélníková metoda)
- **uzavřené** (lichoběžníková a Simpsonova metoda)
- **polootevřené** (metoda levého odhadu)

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

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

$$\begin{aligned}
|T_j - I_j| &= \left|\int_0^1 \varphi_j(u)\,\mathrm{d}u - \int_0^1 g_j(u)\,\mathrm{d}u\right| \le \int_0^1 |\varphi_j(u)-g_j(u)|\,\mathrm{d}u \\
&\le \frac{\max\limits_{v\in\langle 0,1\rangle} |g_j''(v)|}{2} \int_0^1 (u-u^2)\,\mathrm{d}u = \frac{\max\limits_{v\in\langle 0,1\rangle} |g_j''(v)|}{2} \left(\frac{1}{2}-\frac{1}{3}\right) \\
&= \frac{1}{12} \max_{v\in\langle 0,1\rangle} |g_j''(v)| = \frac{1}{12}\, H^3 \max_{t\in\langle a_j,a_{j+1}\rangle} |f''(t)|\,.
\end{aligned}$$

Vyjádříme pomocí

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

$$|T_j - I_j| \le \frac{1}{12}\, H^3\, M_2\,,$$

složený vzorec

$$|T - I| \le \frac{k}{12}\, H^3\, M_2\,,$$

po náhradě konstantního součinu $k\,H = b-a$

$$|T - I| \le \frac{(b-a)\,M_2}{12}\, H^2\,.$$

2.1 Řád metod integrace

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

$$\lim_{H\to 0} \frac{\ln |A(H)-I|}{\ln H}\,,$$

nazývá se řád metody.

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

Poznámka. *Často se řád metody integrace zavádí jako exponent u H v nejnižším obecně nenulovém členu Taylorova rozvoje chyby metody podle H v okolí bodu 0.*

Věta. *Nechť funkce 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 A spojitou p-tou derivaci v 0, pak p je řád metody ve smyslu Definice 2.1.*

Důkaz. Taylorův rozvoj se zbytkem v Lagrangeově tvaru lze psát

$$A(H) = I + \frac{H^p}{p!}\, A^{(p)}(\xi_H)\,,$$

kde $\xi_H \in \langle 0,H\rangle$, takže

$$\lim_{H\to 0} \xi_H = A^{(p)}(0)\,.$$

$$
\begin{aligned}
\lim_{H\to 0} \frac{\ln|A(H)-I|}{\ln H} &= \lim_{H\to 0} \frac{\ln \dfrac{H^p}{p!}\,|A^{(p)}(\xi_H)|}{\ln H} = \\
&= \lim_{H\to 0} \frac{p\,\ln H - \ln p! + \ln|A^{(p)}(\xi_H)|}{\ln H} = \\
&= p + \lim_{H\to 0} \frac{-\ln p! + \ln|A^{(p)}(\xi_H)|}{\ln H}\,.
\end{aligned}
$$

Čitatel posledního zlomku konverguje k $-\ln p! + \ln|A^{(p)}(0)|$, jmenovatel k $-\infty$, celý zlomek k 0. □

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

$$\int_0^1 W(u)\,\mathrm{d}u = 0\,.$$

Příklad 1:

$$I = \int_0^2 \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t$$

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

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

Pro $k = 20$

$$
\begin{aligned}
L &\doteq 0.9311046\,,\\
R &\doteq 0.8821118\,,\\
T &\doteq 0.8820204\,,\\
S &\doteq 0.8820813\,,\\
\int_0^2 \exp(-t^2)\,\mathrm{d}t &\doteq 0.882\,081\,390\,.
\end{aligned}
$$

3 Gaussova metoda integrace

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

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

dostaneme uzlové body $u_0,\ldots,u_{s-1} \in \langle 0,1\rangle$. Uzlové body a jejich váhy $w_0,\ldots,w_{s-1}$ 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:

$$G_{s,j} = \sum_{i<s} w_i\, g_j(u_i) = H \sum_{i<s} w_i\, f(a_j + H\, u_i)$$

složený vzorec:

$$G_s = \sum_{j<k} G_{s,j} = H \sum_{j<k} \sum_{i<s} w_i\, f(a_j + H\, u_i) = H \sum_{i<s} \left(w_i \sum_{j<k} f(d_i + j\, H) \right),$$

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

$$|G_s - I| \le \frac{(b-a)\,(s!)^4\, M_{2s}}{(2s+1)\,((2s)!)^3}\, H^{2s},$$

kde

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

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):

$$I = \int_0^2 \mathrm{e}^{-t^2}\, \mathrm{d}t$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$.

A	M_p	horní odhad H	p. kroků
L	$\sqrt{\frac{2}{\mathrm{e}}} \doteq 0.86$	$\frac{2\cdot 10^{-6}}{2\cdot 0.86} \doteq 1.16 \cdot 10^{-6}$	1 720 000
T	2	$\sqrt{\frac{12\cdot 10^{-6}}{2\cdot 2}} \doteq 1.7 \cdot 10^{-3}$	1155
R	2	$\sqrt{\frac{24\cdot 10^{-6}}{2\cdot 2}} \doteq 2.45 \cdot 10^{-3}$	817
S	12	$\sqrt[4]{\frac{2880\cdot 10^{-6}}{2\cdot 12}} \doteq 0.1$	20
G_2	12	$\sqrt[4]{\frac{4320\cdot 10^{-6}}{2\cdot 12}} \doteq 0.115$	18
G_4	1680	$\sqrt[8]{\frac{1\ 778\ 112\ 000\cdot 10^{-6}}{2\cdot 1680}} \doteq 0.92$	3

4 Richardsonova extrapolace

Úloha: Správný výsledek nějakého výpočtu je $A(0) = \lim_{H\to 0} A(H)$. Předpokládáme, že A má v okolí bodu 0 Taylorův rozvoj

$$A(H) = A(0) + \frac{H^p}{p!} A^{(p)}(0) + \frac{H^r}{r!} A^{(r)}(0) + \dots,$$

kde p (řád metody) známe a $r > p$. Z hodnot funkce A v konečně mnoha nenulových bodech máme odhadnout $A(0)$.

Řešení: Zanedbáme členy řádů vyšších než p a aproximujeme A polynomem $\varphi(H) = s + c\,H^p$, $\quad s, c \in \mathbb{R}$. Ke stanovení s, c zvolíme 2 uzlové body H, H/q, kde $q \neq 1$:

$$\begin{aligned} \varphi(H) = s + c\,H^p &= A(H), \\ \varphi\left(\tfrac{H}{q}\right) = s + c\,\frac{H^p}{q^p} &= A\left(\tfrac{H}{q}\right). \end{aligned}$$

To je regulární soustava dvou lineárních rovnic pro dvě neznámé s, c, z nichž nás zajímá pouze $s = \varphi(0)$:

$$(q^p - 1)\,s = q^p\,A\left(\tfrac{H}{q}\right) - A(H),$$

$$s = \frac{q^p\,A\left(\frac{H}{q}\right) - A(H)}{q^p - 1}.$$

Odhad s hodnoty $A(0)$ je zatížen pouze chybami vyšších řádů než p (zde řádu r).

Často $q = 2$, pak

$$s = \frac{2^p A\left(\frac{H}{2}\right) - A(H)}{2^p - 1}.$$

5 Richardsonova extrapolace při integraci

Richardsonovou extrapolací dostaneme nový odhad

$$B(H) = \frac{q^p\,A(\frac{H}{q}) - A(H)}{q^p - 1} = A(\tfrac{H}{q}) + \frac{A(\frac{H}{q}) - A(H)}{q^p - 1}.$$

Výraz

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

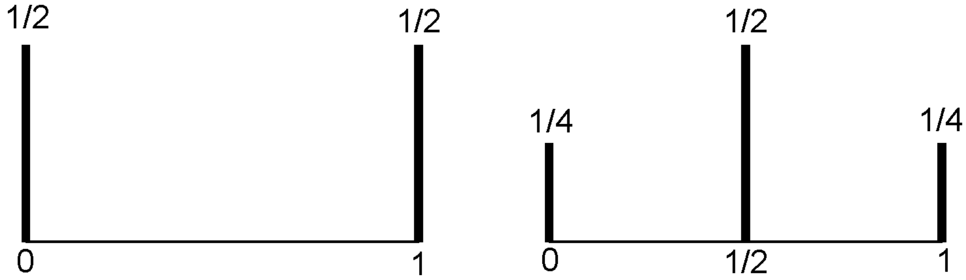
můžeme rovněž považovat za odhad chyby výsledku $A(\frac{H}{q})$.

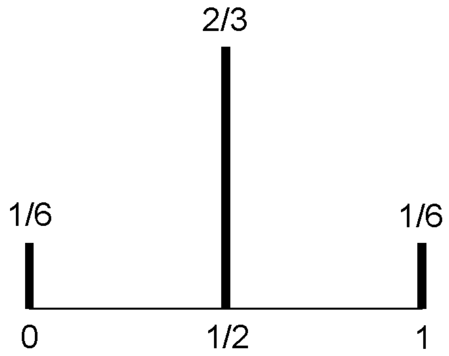
Speciálně pro $q = 2$ (**metoda polovičního kroku**):

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

$$I - A(\tfrac{H}{2}) \doteq \frac{A(\frac{H}{2}) - A(H)}{2^p - 1}$$

Pro lichoběžníkovou metodu lze doporučit $q = 2$





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

$$T(\tfrac{H}{2}) + \frac{T(\frac{H}{2}) - T(H)}{3} = \frac{2\,R(H) + T(H)}{3}\,,$$

shodný se Simpsonovou metodou.

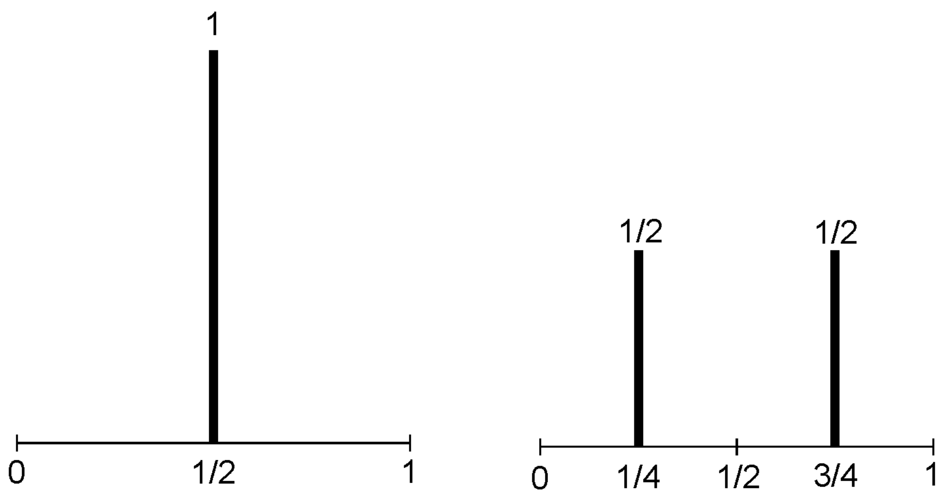
Richardsonovou extrapolací lze zpřesnit i Simpsonovu metodu, dostaneme odhad 6. řádu

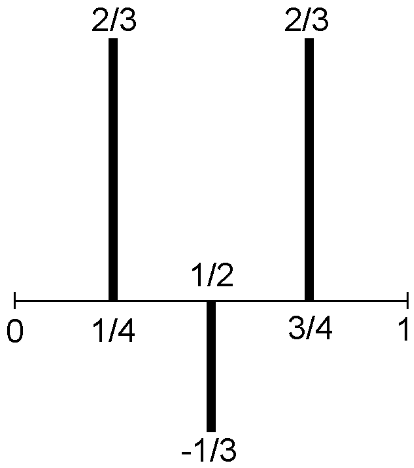
$$S(\tfrac{H}{2}) + \frac{S(\frac{H}{2}) - S(H)}{15}$$

Richardsonovou extrapolací pro obdélníkovou metodu s polovičním krokem dostaneme odhad

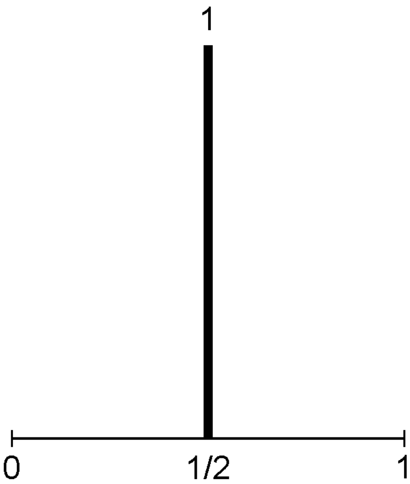
$$R(\tfrac{H}{2}) + \frac{R(\frac{H}{2}) - R(H)}{3}\,,$$

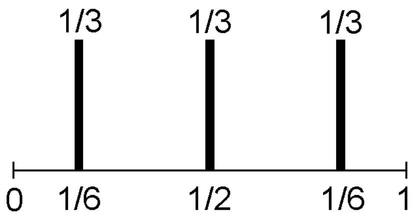
který se však nehodí:

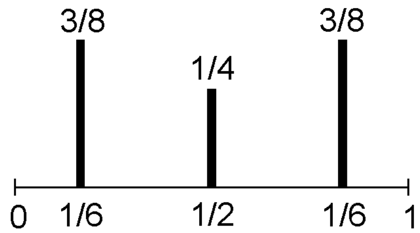




Vhodnější je třetinový krok, $q = 3$, $\qquad R(\frac{H}{3}) + \dfrac{R(\frac{H}{3}) - R(H)}{8}$.







6 Rombergova metoda

Vychází z více odhadů získaných lichoběžníkovou metodou pro kroky $H, H/2, H/4, \ldots$.
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	$T(\frac{H}{k})$		$S(\frac{2H}{k})$				
k_0	$T(H) = T_{0,0}$						
		$\searrow$					
$2\,k_0$	$T(\frac{H}{2}) = T_{1,0}$	$\rightarrow$	$T_{1,1}$				
		$\searrow$		$\searrow$			
$4\,k_0$	$T(\frac{H}{4}) = T_{2,0}$	$\rightarrow$	$T_{2,1}$	$\rightarrow$	$T_{2,2}$		
		$\searrow$		$\searrow$		$\searrow$	
$8\,k_0$	$T(\frac{H}{8}) = T_{3,0}$	$\rightarrow$	$T_{3,1}$	$\rightarrow$	$T_{3,2}$	$\rightarrow$	$T_{3,3}$
$\dots$	$\dots$		$\dots$		$\dots$		$\dots$ $\ddots$

Obecně ve sloupci $j+1$:

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

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

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

řád	2	4	6	8
k	$T(\frac{H}{k})$	$S(\frac{2H}{k})$		
4	0.88061			
8	0.88170	0.8820655		
16	0.88170	0.8820803	*0.88208139*	
32	0.88205	*0.8820813*	*0.88208138*	*0.88208138*

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

Příklad 2: Výsledky Rombergovy metody pro $\displaystyle\int_0^\pi \sin^4 t\,\mathrm{d}t$, s počáteční volbou 1 intervalu dělení:

řád	2	4	6	8	10
k	$T(\frac{H}{k})$	$S(\frac{2H}{k})$			
1	0				
2	1.57080	2.09440			
4	*1.17810*	1.0472	0.97738		
8	*1.17810*	*1.17810*	1.18683	1.19015	
16	*1.17809*	*1.17809*	*1.17809*	*1.17795*	*1.17790*

S platnými ciframi *1.178* se shodují výsledky vyznačené kurzívou.

7 Praktické stanovení počtu intervalů

- z horního odhadu chyby
- metoda dvojího (nejčastěji polovičního) kroku

Příklad 1 (pokračování):

$$I = \int_0^2 \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t$$

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

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

Odhad chyby medotou polovičního kroku je

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

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

$$\begin{aligned} S(\tfrac{2}{8}) &\doteq 0.882080396576\,, \\ S(\tfrac{2}{16}) &\doteq 0.882081328646\,. \end{aligned}$$

Odhad chyby posledního výsledku je

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

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

$$S(\tfrac{2}{16}) + \frac{S(\frac{2}{16}) - S(\frac{2}{8})}{15} \doteq 0.882081390784\,,$$

Přesnější výsledek je

$$0.88208139076242168 00.$$

Příklad 3:

$$I = \int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t$$

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

$$\begin{aligned} G_5(1) &\doteq 0.621166517\,, \\ G_5(\tfrac{1}{2}) &\doteq 0.620759367\,. \end{aligned}$$

Odhad chyby medotou polovičního kroku je

$$\frac{|G_5(\frac{1}{2}) - G_5(1)|}{2^{10}-1} \doteq 4 \cdot 10^{-7}\,,$$

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

$$\begin{aligned} G_5(\tfrac{1}{2}) &\doteq 0.620759367 \\ G_5(\tfrac{1}{4}) &\doteq 0.620615367\,. \end{aligned}$$

Odhad chyby posledního výsledku je

$$\frac{|G_5(\frac{1}{4}) - G_5(\frac{1}{2})|}{2^{10}-1} \doteq 1.4 \cdot 10^{-7}\,,$$

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

Přesnější výsledek je

$$0.62053660344676220362.$$

8 Řešení obtížnějších úloh úpravou zadání

8.1 Integrace přes nekonečný interval

Příklad 4:

$$I = \int_2^\infty \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t$$

s přesností $\varepsilon = 10^{-6}$.

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

$$I = \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{u^2}}}{u^2}\,\mathrm{d}u\,.$$

Můžeme využít známé určité integrály, např.

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

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

$$\begin{aligned}\int_x^\infty \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t &= \mathrm{e}^{-x^2}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2\,x\,u-u^2}\,\mathrm{d}u \\ &\le \mathrm{e}^{-x^2}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2\,x\,u}\,\mathrm{d}u = \frac{\mathrm{e}^{-x^2}}{2\,x}\,.\end{aligned}$$

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

$$\int_2^{3.85} \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t$$

s přesností $\frac{\varepsilon}{2}$.

8.2 Omezení intervalu

se může hodit, i když obor integrace je konečný:

Příklad 5:

$$\int_2^{1000} \mathrm{e}^{-t^2}\,\mathrm{d}t$$

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

$$0.00414553469.$$

8.3 Pomalu konvergentní integrály

Přičtení známého určitého integrálu může zásadně změnit obtížnost numerického výpočtu:

Příklad 3 (pokračování):

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t$$

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

$$\int_0^1 \sqrt{t}\,\mathrm{d}t = \frac{2}{3}\,t^{\frac{3}{2}}.$$

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

$$\begin{aligned}\int_0^1 \left(\frac{\sin t}{\sqrt{t}} - \sqrt{t}\right)\mathrm{d}t &\doteq \\ G_5(\tfrac{1}{2}) &\doteq -0.046130081752\,, \\ G_5(\tfrac{1}{4}) &\doteq -0.046130064858\,.\end{aligned}$$

Odhad chyby metodou polovičního kroku:

$$\frac{|G_5(\frac{1}{4}) - G_5(\frac{1}{2})|}{2^{10}-1} \doteq 1.7 \cdot 10^{-11} \,.$$

Přesnější výsledek je

$$-0.04613006321990446305$$

Výsledek původního zadání je

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

(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):

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t$$

Substitucí $t = u^2$ dostaneme

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t = \int_0^1 2\,\sin u^2\,\mathrm{d}u \,.$$

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

$$\begin{aligned} G_5(1) &\doteq 0.620536620796 \,, \\ G_5(\tfrac{1}{2}) &\doteq 0.620536603496 \,, \end{aligned}$$

odhad chyby metodou polovičního kroku

$$\frac{|G_5(\frac{1}{2}) - G_5(1)|}{2^{10}-1} \doteq 1.7 \cdot 10^{-11} \,.$$

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:

$$\int_1^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t$$

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

$$\int_{999997}^{1000000} \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t \doteq 0.0019 \,.$$

Hledaný integrál není absolutně konvergentní.

$$\int_0^\infty \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,\mathrm{d}t = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \,.$$

Potřebujeme

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

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

$$0.6327775338746013102.$$