

Numerické metody

Doc. RNDr. Libor Čermák, CSc. RNDr. Rudolf Hlavička, CSc.

Ústav matematiky
Fakulta strojního inženýrství
Vysoké učení technické v Brně

24. března 2006

Obsah

4 Numerický výpočet derivace a integrálu

- Úvod
- Numerické derivování
- Richardsonova extrapolace
- Numerické integrování
 - Základní formule
 - Složené formule
 - Doplňující poznatky
- Literatura

Společným východiskem obou postupů je náhrada funkce $f(x)$ vhodnou aproximací $\varphi(x)$, která je pak derivována nebo integrována. Jsou-li hodnoty $y_i \approx f(x_i)$ získány měřením, je vhodné data nejdříve vyrovnat, tj. φ získáme pomocí metody nejmenších čtverců. Pokud je funkce $f(x)$ zadána přesnými hodnotami $y_i = f(x_i)$ ve velkém počtu uzlů x_i , pak je účelné určit φ jako po částech polynomický interpolant. Když je uzlů jen pár, lze jako φ použít Lagrangeův popř. Hermitův polynom nevysokého stupně.

Obsah

4 Numerický výpočet derivace a integrálu

- Úvod
- **Numerické derivování**
- Richardsonova extrapolace
- Numerické integrování
 - Základní formule
 - Složené formule
 - Doplnující poznatky
- Literatura

Přibližný výpočet derivace $f'(x)$ má smysl například tehdy, když

- a) pro dané x můžeme získat odpovídající hodnotu $y = f(x)$, avšak explicitní vyjádření funkce $f(x)$ k dispozici nemáme a proto vzorec pro $f'(x)$ neumíme napsat;
- b) funkce $f(x)$ je tak složitá, že výpočet její derivace je příliš pracný;
- c) hodnoty funkce $f(x)$ známe jen v několika tabulkových bodech.

V takových případech je účelné nahradit funkci $f(x)$ vhodnou aproximací $\varphi(x)$ a hodnotu derivace $\varphi'(x)$ považovat za přibližnou hodnotu derivace $f'(x)$. Podobně postupujeme, když potřebujeme přibližně určit vyšší derivace: $f^{(k)}(x)$ nahradíme pomocí $\varphi^{(k)}(x)$.

V dalším si uvedeme několik často používaných formulí založených na derivování Lagrangeova interpolačního polynomu $P_n(x)$, tj. když $f'(x)$ aproximujeme pomocí $P'_n(x)$.

V dalším si uvedeme několik často používaných formulí založených na derivování Lagrangeova interpolačního polynomu $P_n(x)$, tj. když $f'(x)$ aproximujeme pomocí $P_n'(x)$.

Chyba aproximace v uzlovém bodě. Necht' $f \in C^{n+1}(a, b)$, kde a je nejmenší a b je největší z uzlů interpolace. Pak pro chybu $f'(x_s) - P_n'(x_s)$ v některém z uzlů x_s platí

$$f'(x_s) - P_n'(x_s) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_s)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_s), \quad (4.1)$$

kde $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ a ξ_s je nějaký bod z intervalu (a, b) .

Přehled užitečných vzorců. Uvažme případ, kdy uzly x_i jsou **ekvidistantní** s krokem h , tj. $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, 2, \dots, n$. Abychom docílili jednotného zápisu, označíme uzel x_s , v němž počítáme přibližnou hodnotu derivace, vždy jako x . Také ostatní uzly nečíslujeme, ale vyjadřujeme je pomocí x jako $x + h$, $x - h$ apod. Příslušný vzorec je platný jen pro funkce, které mají potřebný počet spojitých derivací. Bod ξ leží vždy mezi nejmenším a největším uzlem použitým ve vzorci. Pomocí vztahu (4.1) tak dostaneme:

$$n = 1: \quad f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}hf''(\xi), \quad (4.2a)$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{1}{2}hf''(\xi), \quad (4.2b)$$

$$n = 2: \quad f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + \frac{1}{3}h^2f'''(\xi), \quad (4.3a)$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6}h^2f'''(\xi), \quad (4.3b)$$

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \frac{1}{3}h^2f'''(\xi). \quad (4.3c)$$

Uved' me ještě nejznámější formuli $f''(x_1) \doteq P_2''(x_1)$ pro výpočet druhé derivace. Rovnost

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2 f^{(4)}(\xi). \quad (4.4)$$

ověříme užitím Taylorova rozvoje $f(x \pm h)$ okolo x .

Formule ze vzorce (4.2a) je známa jako **první diference vpřed (dopředná diference)** a formule ze vzorce (4.2b) jako **první diference vzad (zpětná diference)**. Formule ze vzorce (4.3b) bývá označována jako **první centrální diference** a formule ze vzorce (4.4) jako **druhá centrální diference**.

Numerický výpočet parciální derivace nepředstavuje žádný nový problém: derivujeme-li podle proměnné x_i , ostatních proměnných $x_j \neq x_i$ si nevíšimáme a některou z výše uvedených formulí aplikujeme jen na x_i . Tak třeba pomocí dopředné diference (4.2a) dostaneme

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} \approx \frac{f(x_1, x_2 + h) - f(x_1, x_2)}{h}.$$

Podmíněnost numerického výpočtu derivace. Ve vzorcích (4.2)–(4.4) jsme uvedli vždy formuli (jako první sčítanec na pravé straně) a její **diskretizační chybu** (jako druhý sčítanec). Při numerickém výpočtu derivace hrají významnou roli také zaokrouhlovací chyby, a to jak v hodnotách funkce f (tj. ve vstupních datech), tak při vyhodnocení formule (tj. při výpočtu). Ukážeme si to pro formuli ze vzorce (4.2a).

Ve skutečnosti za přibližnou hodnotu derivace $f'(x)$ považujeme výraz

$$\begin{aligned}\tilde{f}'(x) &:= \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} = \\ &= \frac{[f(x+h) + \varepsilon_1] - [f(x) + \varepsilon_0]}{h} = f'(x) + \frac{1}{2}hf''(\xi) + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}{h},\end{aligned}$$

kde ε_1 resp. ε_0 je zaokrouhlovací chyba, které se dopustíme při výpočtu $f(x+h)$ resp. $f(x)$. Tedy

$$f'(x) = \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} + E_d + E_r,$$

kde $E_d := -\frac{1}{2}hf''(\xi)$ je **diskretizační chyba** a $E_r := -(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)/h$ je **chyba zaokrouhlovací**. Chování obou chyb je pro $h \rightarrow 0$ diametrálně odlišné: zatímco $|E_d| \rightarrow 0$, $|E_r| \rightarrow \infty$. Pro malá h se tedy zřejmě jedná o špatně podmíněnou úlohu: malé změny $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ ve vstupních datech vyvolají velkou změnu E_r a následně také výsledku $\tilde{f}'(x)$.

Když pro jednoduchost zanedbáme zaokrouhlovací chyby vznikající při vyčíslení formule $[\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)]/h$, dostáváme pro celkovou chybu $E = E_d + E_r$ odhad

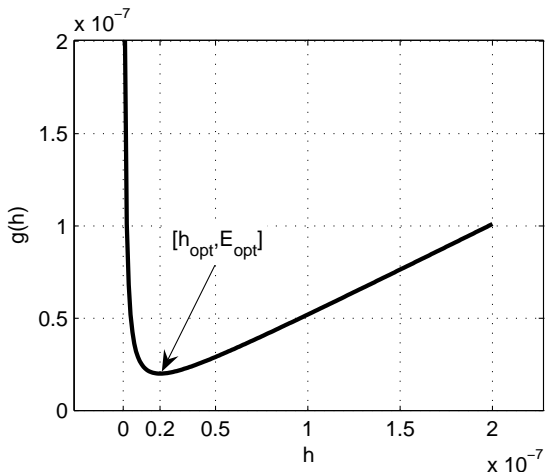
$$|E| \leq |E_d| + |E_r| \leq \frac{1}{2}hM_2 + 2\frac{\varepsilon}{h} \equiv g(h),$$

kde $M_2 \geq |f''(\xi)|$ a $\varepsilon \geq \max(|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|)$. Minimalizací funkce $g(h)$ obdržíme optimální délku kroku

$$h_{opt} = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M_2}}, \quad \text{pro kterou} \quad |E_{opt}| = g(h_{opt}) = 2\sqrt{\varepsilon M_2}.$$

Předpokládejme, že hodnoty $f(x)$ i $f(x+h)$ dokážeme vypočítat s relativní chybou rovnou přibližně číslu δ , takže $\varepsilon \approx M_0\delta$, kde $M_0 \approx \max(|f(x_0)|, |f(x_0+h)|)$. Pro $M_0 \approx M_2$ je $h_{opt} \approx 2\sqrt{\delta}$ a $|E_{opt}| \approx 2M_0\sqrt{\delta}$. Počítáme-li tedy např. ve dvojnásobné přesnosti, tj. když $\delta \approx 10^{-16}$, pak $h_{opt} \approx 2 \cdot 10^{-8}$. Jestliže navíc $|f'(x)| \approx M_0$, pak $|E_{opt}| \approx 2|f'(x)|\sqrt{\delta}$, a to znamená, že relativní chyba derivace $\tilde{f}'(x)$ je řádově rovna druhé odmocnině relativní chyby funkčních hodnot. To nás opravňuje k tvrzení: **při přibližném výpočtu derivace formulí dopředné (nebo zpětné) diference dochází při optimální volbě kroku ke ztrátě přibližně poloviny platných cifer.**

Podobné chování vykazují i ostatní formule numerického derivování, tj. **pro krok h blízký h_{opt} je numerický výpočet derivace špatně podmíněná úloha**: nepatrné zmenšení kroku vyvolá značný nárůst chyby, viz obr. 4.1.



Obr. 4.1: Chyba numerické derivace: pro $g(h) = \frac{1}{2}h + 2 \cdot 10^{-16}/h$ je $h_{opt} = 2 \cdot 10^{-8} = E_{opt}$

Obsah

4 Numerický výpočet derivace a integrálu

- Úvod
- Numerické derivování
- **Richardsonova extrapolace**
- Numerické integrování
 - Základní formule
 - Složené formule
 - Doplňující poznatky
- Literatura

Přibližný výpočet derivace lze efektivně zpřesnit technikou známou jako **Richardsonova extrapolace**. Je to univerzální postup umožňující pomocí základní metody nižší přesnosti vytvářet metody vyšší přesnosti. Ukažme si, jak se to dělá. Předpokládejme, že základní metoda je reprezentována funkcí $F(h)$ parametru h . Metodou F umíme vypočítat hodnotu $F(h)$ pro malá $h > 0$. Naším cílem je co nejpřesněji aproximovat hodnotu $F(0)$, kterou však přímo z formule F určit neumíme.

Předpokládejme, že funkce $F(h)$ může být zapsána ve tvaru mocninného rozvoje

$$F(h) = a_0 + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \dots \quad (4.5)$$

Pro malé h je $F(h)$ jistě dobrou aproximací $F(0) = a_0$. Pokusíme se najít lepší aproximaci a_0 . Začneme tím, že vypočteme $F(\frac{h}{2})$. Podle (4.5) platí

$$F\left(\frac{h}{2}\right) = a_0 + a_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + a_3 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \dots \quad (4.6)$$

Největší chybu ve výrazu $a_0 - F(h)$ i $a_0 - F(\frac{h}{2})$ představuje člen obsahující druhou mocninu h . Zbavíme se ho tak, že od čtyřnásobku rovnice (4.6) odečteme rovnici (4.5) a výsledek dělíme třema. Tak dostaneme

$$F_2(h) := \frac{4F(\frac{h}{2}) - F(h)}{3} = a_0 + a_2^{(2)} h^4 + a_3^{(2)} h^6 + \dots \quad (4.7)$$

Konkrétní hodnoty koeficientů u mocnin h nás nezajímají, takže se spokojíme s tím, že je označíme pomocí horního indexu jako $a_2^{(2)}$, $a_3^{(2)}$, ... Není však bez zajímavosti, že $|a_s^{(2)}| < |a_s|$. $F_2(h)$ je proto lepší aproximace a_0 než $F(h)$, a pro dosti malé h je také lepší aproximace než $F(\frac{h}{2})$, neboť $a_0 - F_2(h)$ začíná až čtvrtou mocninou h . Dostali jsme tedy metodu F_2 , která je (pro dosti malá h) lepší než původní metoda F . Protože $F_2(h) \approx F(0)$ je spočtena pomocí hodnot funkce F pro h a $\frac{h}{2}$, představuje $F_2(h)$ **extrapolaci funkce F do nuly** (ověřte, že $F_2(h) = P_1(0)$, kde $P_1(t)$ je lineární interpolační polynom procházející body $[(\frac{h}{2})^2, F(\frac{h}{2})]$ a $[h^2, F(h)]$).

Podobným postupem odstraníme z $F_2(h)$ člen obsahující čtvrtou mocninou h a získáme ještě lepší aproximaci $F(0)$. Nejprve vypočteme $F_2(\frac{h}{2})$. Podle (4.7) platí

$$F_2\left(\frac{h}{2}\right) = a_0 + a_2^{(2)}\left(\frac{h}{2}\right)^4 + a_3^{(2)}\left(\frac{h}{2}\right)^6 + \dots \quad (4.8)$$

Rovnici (4.8) násobíme 16, odečteme (4.7) a výsledek dělíme 15. Tak dostaneme metodu F_3 , která je pro zvolené h definována předpisem

$$F_3(h) := \frac{16F_2(\frac{h}{2}) - F_2(h)}{15} = a_0 + a_3^{(3)}h^6 + \dots \quad (4.9)$$

Všimněte si, abychom mohli vypočítat $F_2(\frac{h}{2})$, musíme nejdříve určit $F(\frac{h}{4})$.

Takto můžeme pokračovat a získávat stále lepší metody, pro které

$$F_{i+1}(h) = \frac{4^i F_i(\frac{h}{2}) - F_i(h)}{4^i - 1} = a_0 + a_{i+1}^{(i+1)} h^{2i+2} + \dots, \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.10)$$

a kde $F_1(h) = F(h)$. Protože $F_i(h) - F(0) = a_i^{(i)} h^{2i} + \dots$, řekneme, že $F_i(h)$ je aproximace $F(0)$ řádu h^{2i} . Výpočet lze přehledně uspořádat do tabulky

$F_1(h)$					T_{00}						
$F_1(\frac{h}{2})$	$F_2(h)$				T_{10}	T_{11}					
$F_1(\frac{h}{4})$	$F_2(\frac{h}{2})$	$F_3(h)$			T_{20}	T_{21}	T_{22}				
$F_1(\frac{h}{8})$	$F_2(\frac{h}{4})$	$F_3(\frac{h}{2})$	$F_4(h)$	\iff		T_{30}	T_{31}	T_{32}	T_{33}		
$F_1(\frac{h}{16})$	$F_2(\frac{h}{8})$	$F_3(\frac{h}{4})$	$F_4(\frac{h}{2})$	$F_5(h)$			T_{40}	T_{41}	T_{42}	T_{43}	T_{44}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Tab. 4.1 Richardsonova extrapolace

Tabulku vyplňujeme po řádcích. Prvky tabulky označíme jako T_{si} , kde $s = 0, 1, \dots$ je řádkový index a $i = 0, 1, \dots, s$ je index sloupcový. Prvek T_{s0} v prvním sloupci tabulky vypočteme pomocí základní metody $F = F_1$,

$$T_{s0} = F(h/2^s), \quad s = 0, 1, \dots, \quad (4.11)$$

a další prvky v tomto řádku počítáme ve shodě s (4.10) podle předpisu

$$T_{si} := \frac{4^i T_{s,i-1} - T_{s-1,i-1}}{4^i - 1} = T_{s,i-1} + \frac{T_{s,i-1} - T_{s-1,i-1}}{4^i - 1}, \quad i = 1, 2, \dots, s. \quad (4.12)$$

Výpočet ukončíme a T_{si} považujeme za dostatečně přesnou aproximaci $F(0)$, pokud

$$|T_{s,i} - T_{s,i-1}| < \max(\varepsilon_r |T_{si}|, \varepsilon_a), \quad (4.13)$$

kde ε_r je požadovaná relativní přesnost a ε_a požadovaná přesnost absolutní.

Příklad 4.1. Richardsonovu extrapolaci použijeme pro zpřesnění výpočtu derivace podle formule (4.3b). Jestliže má funkce f dostatečný počet spojitých derivací, pak

$$F(h) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{1}{3!} h^2 f^{(3)}(x) + \frac{1}{5!} h^4 f^{(5)}(x) + \dots, \quad (4.14)$$

takže $F(h)$ je tvaru (4.5).

Počítejme derivaci funkce $f(x) = \cos x$ pro $x = 1$. Zvolíme např. $h = 0,8$ a výpočet ukončíme, když bude splněna podmínka (4.13) pro $\varepsilon_r = \varepsilon_a = 10^{-5}$. V následující tabulce značíme $h_s = h/2^s$, prvky T_{s0} počítáme ze vztahu

$$T_{s0} = \frac{\cos(1+h_s) - \cos(1-h_s)}{2h_s},$$

prvky T_{s1} a T_{s2} v dalších sloupcích počítáme podle (4.12). Čísla v tabulce jsou zaokrouhlena na 6 cifer. Protože $|T_{32} - T_{31}| < 10^{-5}$, považujeme $T_{32} = -0,841471$ za přibližnou hodnotu $f'(1)$. Přesná hodnota $f'(1) = -\sin(1) \doteq -0,84147098$, takže T_{32} má

s	h_s	T_{s0}	T_{s1}	T_{s2}
0	0,8	-0,754543		
1	0,4	-0,819211	-0,840766	
2	0,2	-0,835872	-0,841426	-0,841470
3	0,1	-0,840069	-0,841468	-0,841471

všechny cifry platné.

Poznámka. Richardsonovu extrapolaci lze aplikovat na základní metodu F také v případě, když má funkce $F(h)$ obecný rozvoj

$$F(h) = a_0 + a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + a_3 h^{p_3} + \dots \quad (4.5')$$

kde $1 \leq p_1 < p_2 < p_3 < \dots$ jsou přirozená čísla. Přesnější metodu F_{i+1} v tom případě definujeme předpisem

$$F_{i+1}(h) = \frac{2^{p_i} F_i\left(\frac{h}{2}\right) - F_i(h)}{2^{p_i} - 1} = a_0 + a_{i+1}^{(i+1)} h^{p_{i+1}} + \dots, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (4.10')$$

a T_{si} počítáme podle

$$T_{si} := \frac{2^{p_i} T_{s,i-1} - T_{s-1,i-1}}{2^{p_i} - 1} = T_{s,i-1} + \frac{T_{s,i-1} - T_{s-1,i-1}}{2^{p_i} - 1}, \quad i = 1, 2, \dots, s. \quad (4.12')$$

Protože $F_i(h) - F(0) = a_i^{(i)} h^{p_i} + \dots$, řekneme, že $F_i(h)$ je aproximace $F(0)$ řádu h^{p_i} . Pro $p_i = 2i$ dostaneme dříve uvažovaný případ, viz (4.5), (4.10)

a (4.12). \square

Příklad 4.2. Richardsonovou extrapolací zpřesníme výpočet derivace podle formule (4.2a). Z Taylorovy věty dostaneme

$$F(h) := \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{1}{2!}hf^{(2)}(x) + \frac{1}{3!}h^2f^{(3)}(x) + \dots, \quad (4.15)$$

což odpovídá (4.5') pro $p_i = i$. Počítat budeme stejnou úlohu jako v příkladu 4.1. Tentokrát požadovanou přesnost dosáhneme až pro T_{54} .

s	h_s	T_{s0}	T_{s1}	T_{s2}	T_{s3}	T_{s4}
0	0,8	-0,959381				
1	0,4	-0,925838	-0,892295			
2	0,2	-0,889723	-0,853608	-0,840712		
3	0,1	-0,867062	-0,844401	-0,841332	-0,841421	
4	0,05	-0,854625	-0,842188	-0,841451	-0,841468	-0,841471
5	0,025	-0,848137	-0,841648	-0,841468	-0,841471	-0,841471

Richardsonova extrapolace je méně účinná: zatímco pro formuli (4.3b) je T_{32} aproximace řádu h^6 , pro formuli (4.2a) je T_{54} aproximace řádu h^5 a k dosažení požadované přesnosti bylo třeba zvolit menší h_5 . \square

Obsah

4 Numerický výpočet derivace a integrálu

- Úvod
- Numerické derivování
- Richardsonova extrapolace
- Numerické integrování
 - Základní formule
 - Složené formule
 - Doplnující poznatky
- Literatura

Cílem tohoto odstavce je přibližný výpočet integrálu $I(f) := \int_a^b f(x) dx$. Existuje několik důvodů, proč tento integrál nepočítáme přesně, například

- a) integrál $I(f)$ neumíme spočítat analytickými metodami;
- b) analytický výpočet je příliš pracný;
- c) funkce $f(x)$ je dána jen tabulkou.

Za přibližnou hodnotu integrálu $I(f)$ považujeme integrál $Q(f) := I(\varphi)$, kde $\varphi(x)$ je vhodná aproximace funkce $f(x)$. Předpis $Q(f)$ pro přibližný výpočet integrálu se nazývá **kvadrurní formule**. Rozdíl $I(f) - Q(f)$ označíme $R(f)$ a nazveme **(diskretizační) chybou kvadrurní formule**, tedy

$$I(f) = Q(f) + R(f).$$

Řekneme, že kvadrurní formule je **řádu r** , když integruje přesně polynomy stupně r a polynomy stupně $r + 1$ už přesně neintegruje, tj. když $R(x^k) = 0$ pro $k = 0, 1, \dots, r$, a $R(x^{r+1}) \neq 0$.

Řád formule stačí ověřit na intervalu $\langle a, b \rangle = \langle 0, 1 \rangle$. Skutečně, pomocí transformace $x = a + t(b - a)$ dostaneme $\int_a^b x^k dx = (b - a) \int_0^1 g(t) dt$, kde $g(t) = (a + t(b - a))^k$ je polynom stupně k v proměnné t . Proto když formule integruje přesně polynomy stupně $k \leq r$ na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, integruje přesně také polynomy stupně r na intervalu $\langle a, b \rangle$.

Základní formule

dostaneme integrací interpolačního polynomu.

Obdélníková formule. Když $P_0(x) = f(\frac{1}{2}(a + b))$ je polynom stupně 0, tj. konstanta rovná hodnotě funkce f ve středu $\frac{1}{2}(a + b)$ intervalu $\langle a, b \rangle$, pak odpovídající formule

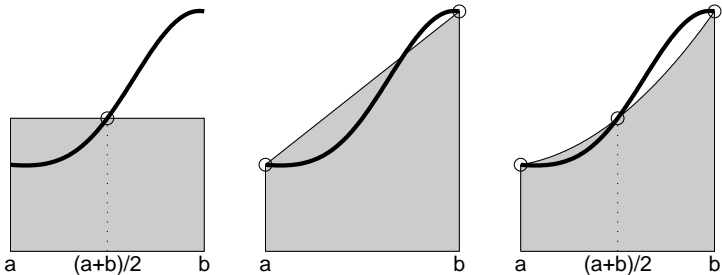
$$Q_M(f) := \int_a^b P_0(x) dx = (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right). \quad (4.16)$$

Název formule vyjadřuje skutečnost, že pro $f(\frac{1}{2}(a + b)) > 0$ je $Q_M(f)$ obsah obdélníka o stranách délky $b - a$ a $f(\frac{1}{2}(a + b))$. Obdélníková formule (4.16) se v anglicky psané literatuře označuje jako „midpoint rule“, odtud index M .

Obdélníková formule je řádu 1: na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ je $Q_M(1) = 1 = I(1)$,
 $Q_M(x) = \frac{1}{2} = I(x)$ a $Q_M(x^2) = \frac{1}{4} \neq \frac{1}{3} = I(x^2)$. Pro chybu $R_M(f)$ obdélníkové
formule lze za předpokladu, že $f \in C^2\langle a, b \rangle$, odvodit

$$R_M(f) = \frac{1}{24} f''(\xi)(b-a)^3, \quad \text{kde } \xi \in (a, b) \quad (4.17)$$

je nějaký (blíže neurčený) bod intervalu (a, b) .



Obr. 4.2: Obdélníková, lichobežníková a Simpsonova formule

Lichoběžníková formule. Jako $P_1(x)$ označíme lineární polynom procházející body $[a, f(a)]$ a $[b, f(b)]$. Integrací $P_1(x)$ na intervalu $\langle a, b \rangle$ obdržíme

$$Q_T(f) := \int_a^b P_1(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]. \quad (4.18)$$

Název formule vyjadřuje skutečnost, že pro $f(a) > 0$, $f(b) > 0$ je $Q_T(f)$ obsah lichoběžníka, jehož rovnoběžné strany mají délky $f(a)$, $f(b)$ a jehož výška je rovna $b - a$. Index T je první písmeno anglického slůvka trapezoid, česky lichoběžník. Lichoběžníková formule je řádu 1: lineární polynom integruje přesně, kvadratický nikoliv. Když $f \in C^2\langle a, b \rangle$, pak pro chybu lichoběžníkové formule platí

$$R_T(f) = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3, \quad \text{kde } \xi \in (a, b). \quad (4.19)$$

Všimněte si:

- a) Pokud se druhá derivace $f''(x)$ funkce $f(x)$ na intervalu $\langle a, b \rangle$ příliš nemění, pak je absolutní hodnota $|R_T(f)|$ chyby lichoběžníkové fomule přibližně dvakrát větší než absolutní hodnota $|R_M(f)|$ chyby formule obdélníkové.
- b) Pokud druhá derivace $f''(x)$ funkce $f(x)$ nemění na intervalu $\langle a, b \rangle$ znaménko, tj. je-li funkce $f(x)$ pořád konvexní nebo konkávní, pak znaménko chyby lichoběžníkové formule je opačné než znaménko chyby formule obdélníkové. Za těchto okolností přesná hodnota $I(f)$ integrálu leží v intervalu, jehož krajní body jsou hodnoty $Q_M(f)$ a $Q_T(f)$.

Simpsonova formule. Integrací kvadratického interpolačního polynomu $P_2(x)$ procházejícího body $[a, f(a)]$, $[\frac{1}{2}(a+b), f(\frac{1}{2}(a+b))]$ a $[b, f(b)]$ dostaneme

$$Q_S(f) = \int_a^b P_2(x) dx = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]. \quad (4.20)$$

Simpsonova formule je řádu 3. Ověřte! (Stačí porovnat $Q_S(x^k)$ a $I(x^k)$ na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ postupně pro $k = 0, 1, 2, 3, 4$.) Když $f \in C^4\langle a, b \rangle$, pro chybu platí

$$R_S(f) = -\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) \left(\frac{b-a}{2}\right)^5, \quad \text{kde } \xi \in (a, b). \quad (4.21)$$

Booleova formule vznikne integrací interpolačního polynomu $P_4(x)$, jehož uzly jsou kromě koncových bodů a , b také střed $\frac{1}{2}(a+b)$ intervalu $\langle a, b \rangle$ a body $a + \frac{1}{4}(b-a)$ a $b - \frac{1}{4}(b-a)$ ležící v jedné čtvrtině a ve třech čtvrtinách intervalu $\langle a, b \rangle$. Booleova formule

$$Q_B(f) = \frac{b-a}{90} \left[7f(a) + 32f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 12f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 32f\left(\frac{a+3b}{4}\right) + 7f(b) \right]$$

je řádu 5 (ověřte!). Pokud $f \in C^6\langle a, b \rangle$, pro chybu platí

$$R_B(f) = -\frac{8}{945} f^{(6)}(\eta_B) \left(\frac{b-a}{4}\right)^7, \quad \text{kde } \xi \in (a, b).$$

Složené formule

Abychom dostali dostatečně přesnou aproximaci integrálu $I(f)$, rozdělíme interval $\langle a, b \rangle$ na kratší podintervaly a na každém z nich použijeme některou ze základních formulí. Omezíme se na případ, kdy základní formule na podintervalech jsou vždy stejné, a to buďto obdélníkové nebo lichoběžníkové nebo Simpsonovy (sestavení složené Booleovy formule ponecháváme čtenáři jako cvičení). Budeme uvažovat **rovnoměrné (= ekvidistantní) dělení**

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \text{ kde } x_i = a + ih, \text{ } h = (b - a)/n \text{ a } i = 0, 1, \dots, n. \quad (4.22)$$

Složenou formuli na dělení (4.22) budeme značit pomocí horního indexu n . Délka h se nazývá **krok dělení**.

Složenou obdélníkovou formulí dostaneme součtem jednoduchých obdélníkových formulí $hf(x_{i-1} + \frac{1}{2}h)$ na podintervalech $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$. Výsledkem je složená formule

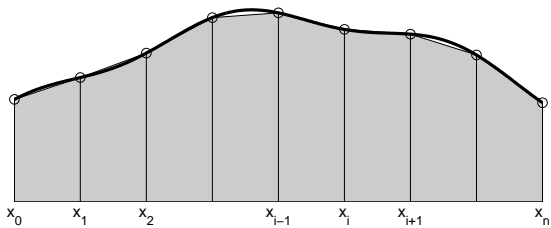
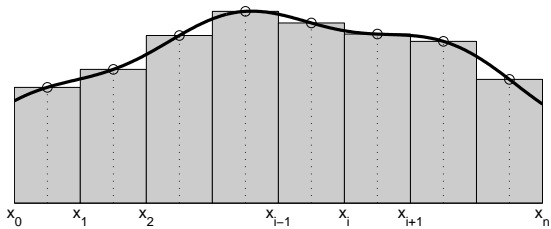
$$Q_M^n(f) := h \left[f \left(x_0 + \frac{1}{2}h \right) + f \left(x_1 + \frac{1}{2}h \right) + \cdots + f \left(x_{n-1} + \frac{1}{2}h \right) \right]. \quad (4.23)$$

Chybu $R_M^n(f)$ dostaneme jako součet dílčích chyb $\frac{1}{24}f''(\xi_i)h^3$ na $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$:

$$\begin{aligned} R_M^n(f) &= \frac{1}{24}h^3f''(\xi_1) + \frac{1}{24}h^3f''(\xi_2) + \cdots + \frac{1}{24}h^3f''(\xi_n) = \\ &= \frac{1}{24}h^2 \frac{b-a}{n} [f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \cdots + f''(\xi_n)]. \end{aligned}$$

Ze spojitosti f'' plyne, že aritmetický průměr $[f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \cdots + f''(\xi_n)]/n$ druhých derivací je roven druhé derivaci $f''(\xi)$ v nějakém bodě $\xi \in (a, b)$. Pro chybu $R_M^n(f)$ složené obdélníkové formule tedy platí

$$R_M^n(f) = \frac{b-a}{24}f''(\xi)h^2, \quad \text{kde } \xi \in (a, b). \quad (4.24)$$



Obr. 4.3: Složená obdélníková a lichobežníková formule

Složená lichoběžníková formule vznikne součtem jednoduchých lichoběžníkových formulí $\frac{1}{2}h[f(x_{i-1}) + f(x_i)]$ na podintervalech $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$. Výsledkem je formule

$$Q_T^n(f) := h \left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n) \right]. \quad (4.25)$$

Chybu $R_T^n(f)$ dostaneme jako součet chyb $-\frac{1}{12}f''(\xi_i)h^3$ na podintervalech $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$. Po jednoduché úpravě obdržíme

$$R_T^n(f) = -\frac{b-a}{12}f''(\xi)h^2, \quad \text{kde } \xi \in (a, b). \quad (4.26)$$

Složenou Simpsonovu formuli dostaneme pro sudý počet n dílků tak, že sečteme jednoduché Simpsonovy formule na intervalech $\langle x_0, x_2 \rangle, \langle x_2, x_4 \rangle, \dots, \langle x_{n-2}, x_n \rangle$ délky $2h$:

$$Q_S^n(f) := \frac{2h}{6} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{2h}{6} [f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \dots \\ + \frac{2h}{6} [f(x_{n-4}) + 4f(x_{n-3}) + f(x_{n-2})] + \frac{2h}{6} [f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)].$$

Odtud tedy

$$Q_S^n(f) := \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]. \quad (4.27)$$

Chyba $R_S^n(f)$ je součtem chyb na podintervalech:

$$R_S^n(f) = -\frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\xi_2) - \frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\xi_4) - \dots - \frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\xi_n) = \\ -\frac{1}{90}h^4\frac{b-a}{2}\left\{\frac{2}{n}\left[f^{(4)}(\xi_2) + f^{(4)}(\xi_4) + \dots + f^{(4)}(\xi_n)\right]\right\}.$$

Když aritmetický průměr čtvrtých derivací (tj. výraz ve složené závorce) nahradíme členem $f^{(4)}(\xi)$, dostaneme

$$R_S^n(f) = -\frac{b-a}{180}f^{(4)}(\xi)h^4, \quad \text{kde } \xi \in (a, b). \quad (4.28)$$

Jak dosáhnout požadované přesnosti. Vyvstává otázka jak zajistit, aby chyba, které se při numerickém výpočtu integrálu dopustíme, byla menší než zadaná tolerance ε . Ve vzorcích (4.24), (4.26) a (4.28) bohužel vystupuje blíže neurčené číslo ξ , o němž víme jen to, že leží někde v intervalu (a, b) . Když označíme

$$M_2 = \max_{x \in \langle a, b \rangle} |f''(x)|, \quad M_4 = \max_{x \in \langle a, b \rangle} |f^{(4)}(x)|,$$

pak chyby můžeme odhadnout podle vztahu

$$|R_M^n(f)| \leq \frac{b-a}{24} M_2 h^2 \quad \text{pro složenou obdélníkovou formuli,} \quad (4.24')$$

$$|R_T^n(f)| \leq \frac{b-a}{12} M_2 h^2 \quad \text{pro složenou lichoběžníkovou formuli,} \quad (4.26')$$

$$|R_S^n(f)| \leq \frac{b-a}{180} M_4 h^4 \quad \text{pro složenou Simpsonovu formuli.} \quad (4.28')$$

Počet dílků $n = (b-a)/h$ pak lze určit tak, aby $|R_M^n(f)| \leq \varepsilon$ popř. $|R_T^n(f)| \leq \varepsilon$ nebo $|R_S^n(f)| \leq \varepsilon$. Takto stanovený počet dílků je však zpravidla přehnaně velký. To je důsledek toho, že jsme v odhadech chyb nahradili derivaci v blíže neurčeném bodě maximem této derivace na celém intervalu $\langle a, b \rangle$.

Příklad 4.3. Určeme počet dílků n tak, abychom vypočítali $\int_0^{\pi/2} e^x \cos x \, dx$ s chybou nejvýše 10^{-4} pomocí složené obdélníkové, lichoběžníkové a Simpsonovy formule. Přesná hodnota $\int_0^{\pi/2} e^x \cos x \, dx = \frac{1}{2} e^x (\cos x + \sin x) \Big|_0^{\pi/2} \doteq 1,905239$. Pro $f(x) = e^x \cos x$ je $f''(x) = -2e^x \sin x$ a tedy $M_2 = 2e^{\pi/2}$. V případě obdélníkové formule pomocí (4.24') odvodíme:

$$|R_M^n(f)| \leq \frac{\pi/2}{24} 2 e^{\pi/2} \left(\frac{\pi/2}{n} \right)^2 \leq 10^{-4} \quad \implies \quad n \geq 125.$$

Provedeme-li výpočet s tímto n podle (4.23), dostaneme $Q_M^{125}(f) \doteq 1,905277$, takže skutečná chyba je asi $3,8 \cdot 10^{-5}$. Cestou pokusů se ukázalo, že pro dosažení požadované tolerance stačí vzít $n = 78$.

V případě lichoběžníkové formule pomocí (4.26') odvodíme:

$$|R_T^n(f)| \leq \frac{\pi/2}{12} 2 e^{\pi/2} \left(\frac{\pi/2}{n}\right)^2 \leq 10^{-4} \quad \implies \quad n \geq 177.$$

Výpočtem podle (4.25) dostaneme $Q_T^{177}(f) \doteq 1,905201$, tj. skutečná chyba je asi $3,8 \cdot 10^{-5}$. Experimentálně lze ověřit, že požadovanou přesnost lze dosáhnout už při $n = 110$.

Všimněte si, že $Q_T^{177}(f) < I(f) < Q_M^{125}(f)$. To není náhoda. Na $\langle 0, \pi/2 \rangle$ je $f''(x) < 0$, tj. f je konkávní, a proto $Q_T^{n_1}(f) < I(f) < Q_M^{n_2}(f)$ pro libovolné počty n_1, n_2 dílků.

Pro odhad počtu dílků Simpsonovy formule vypočteme $f^{(4)}(x) = -4e^x \cos x$ a určíme $M_4 = 4e^{\pi/2}$. Podle (4.28') tak odvodíme:

$$|R_S^n(f)| \leq \frac{\pi/2}{180} 4 e^{\pi/2} \left(\frac{\pi/2}{n}\right)^4 \leq 10^{-4} \quad \implies \quad n \geq 12.$$

Výpočtem podle (4.27) dostaneme $Q_S^{12}(f) \doteq 1,905226$, tj. skutečná chyba je asi $1,3 \cdot 10^{-5}$. Požadovaná přesnost je ve skutečnosti dosažena už pro $n = 8$. \square

Metoda polovičního kroku. Chybu složené kvadraturní formule je možné odhadnout postupem, kterému se často říká **metoda polovičního kroku**. Název vystihuje podstatu metody: integrál spočteme nejdříve s krokem h , pak s polovičním krokem $h/2$, a vhodnou kombinací obou těchto výsledků obdržíme odhad chyby.

Teď si to vysvětlíme podrobněji. Vyjdeme z toho, že pro složenou formuli s n dílky délky h platí

$$I(f) = Q^n(f) + cf^{(p)}(\xi)h^p,$$

kde c je konstanta, ξ je nějaký bod intervalu (a, b) a $p - 1$ je řád formule, viz (4.24), (4.26) a (4.28). Když použijeme tutéž formuli, ale tentokrát pro dvojnásobný počet $2n$ dílků, pak místo původní délky h dílku budeme pracovat s poloviční délkou $h/2$ a dostaneme

$$I(f) = Q^{2n}(f) + cf^{(p)}(\eta) \left(\frac{h}{2}\right)^p,$$

kde η je nějaký bod z (a, b) . Předpokládejme nyní, že derivace $f^{(p)}(x)$ se na intervalu (a, b) příliš nemění, takže $f^{(p)}(\xi) \approx f^{(p)}(\eta)$. Když označíme $M = cf^{(p)}(\eta) \approx cf^{(p)}(\xi)$, pak

$$I(f) = Q^{2n}(f) + M \left(\frac{h}{2}\right)^p \approx Q^n(f) + Mh^p.$$

Odtud vyjádříme $M \left(\frac{h}{2}\right)^p$ a tak dostaneme odhad $\tilde{R}^{2n}(f)$ chyby

$$R^{2n}(f) = I(f) - Q^{2n}(f):$$

$$\tilde{R}^{2n}(f) := \frac{1}{2^p - 1} [Q^{2n}(f) - Q^n(f)]. \quad (4.29)$$

Výpočet zajišťující dosažení požadované přesnosti ε organizujeme tak, že nejprve vypočteme $Q^{n_0}(f)$ pro počáteční dělení intervalu $\langle a, b \rangle$ na n_0 dílků. Postupně počet dílků zdvojnásobujeme, tj. počítáme $Q^{n_s}(f)$ pro $n_s = 2^s n_0$, kde $s = 1, 2, \dots$. Když pro určité n_s bude $|\tilde{R}^{2n_s}(f)| < \varepsilon$, pak za přibližnou hodnotu $I(f)$ považujeme hodnotu formule $Q^{2n_s}(f)$ zpřesněnou tím, že k ní přičteme odhad chyby $\tilde{R}^{2n_s}(f)$, tj. $I(f)$ aproximujeme pomocí

$$Q(f) := Q^{2n_s}(f) + \tilde{R}^{2n_s}(f). \quad (4.30)$$

Celý postup je vlastně jedním krokem Richardsonovy extrapolace, viz (4.5') a (4.12'): $Q^{n_s}(f)$ odpovídá T_{s0} z prvního sloupce tabulky 4.1 a zpřesněná hodnota odpovídá $T_{s+1,1}$ z druhého sloupce.

Příklad 4.4. Počítejme opět $\int_0^{\pi/2} e^x \cos x \, dx$ s přesností 10^{-4} . Na počátku zvolíme dva dílky a dále pak 4, 8, ... Metodou polovičního kroku zjistíme, že pro obdélníkovou a lichoběžníkovou formuli ($p = 2$) stačí použít 128 dílků a pro Simpsonovu formuli ($p = 4$) postačí 8 dílků. Zpřesněná hodnota (4.30) dosažená pro uvedené počty dílků je výrazně přesnější než požadovaná přesnost 10^{-4} . \square

Rombergova integrace je založena na Richardsonově extrapolaci složené lichoběžníkové formule. Když má totiž funkce f dostatečný počet spojitých derivací, pak je známo, že pro $F(h) := Q_T^n(f)$, kde $h = (b - a)/n$, platí rozvoj (4.5), v němž $a_0 = I(f)$, tj.

$$Q_T^n(f) = I(f) + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \dots$$

Přibližný výpočet integrálu $I(f)$ lze proto provést podle vzorců (4.11)–(4.13). Označíme-li $n_s = 2^s n$ a $h_s = 2^{-s} h$, $s = 0, 1, \dots$, pak $T_{s0} = Q_T^{n_s}(f)$ je složená lichoběžníková formule pro n_s dílků. Při jejím výpočtu s výhodou využijeme hodnot funkce f , které jsme už dříve vypočetli na hrubších děleních. Dá se ukázat, že $T_{s1} = Q_S^{n_s}(f)$ je složená Simpsonova formule a $T_{s2} = Q_B^{n_s}(f)$ je složená Booleova formule. Obecně platí, že T_{si} je kvadraturní formule řádu $2i + 1$ s krokem h_s .

Příklad 4.5. Rombergovou metodou vypočteme $\int_0^{\pi/2} e^x \cos x \, dx$ s přesností 10^{-4} . Výsledek je zaznamenán v následující tabulce. Protože $|I(f) - T_{22}| \doteq 2,7 \cdot 10^{-6}$, $T_{22} = 1,90524$ má

s	n_s	T_{s0}	T_{s1}	T_{s2}
0	2	1,61076		
1	4	1,83082	1,90418	
2	8	1,88659	1,90517	1,90524

všechny cifry platné. \square

Doplňující poznatky

Obecný tvar kvadraturní formule je

$$Q(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n). \quad (4.31)$$

Body x_0, x_1, \dots, x_n se nazývají **uzly** a čísla w_0, w_1, \dots, w_n **koeficienty** (někdy také **váhy**) kvadraturní formule.

Gaussovy kvadraturní formule vybírají uzly a koeficienty tak, aby formule měla maximální řád $r = 2n + 1$ (dá se ukázat, že vyšší řád formule (4.31) mít nemůže). Gaussovy formule se běžně uvádějí pro interval $\langle -1, 1 \rangle$. To však není žádné omezení, neboť substitucí

$$x = \frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2} t$$

lze výpočet integrálu převést z intervalu $\langle a, b \rangle$ na interval $\langle -1, 1 \rangle$. Uzly a koeficienty Gaussových formulí najdeme v každé učebnici numerické matematiky. My zde uvedeme jen první tři formule pro $n = 0, 1, 2$ (pro výpočet integrálu na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$):

$$\begin{aligned} Q_{G0}(f) &= 2f(0), & R_{G0}(f) &= \frac{1}{3}f''(\xi), \\ Q_{G1}(f) &= f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right), & R_{G1}(f) &= \frac{1}{135}f^{(4)}(\xi), \\ Q_{G2}(f) &= \frac{5}{9}f(-\sqrt{0,6}) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f(\sqrt{0,6}), & R_{G2}(f) &= \frac{1}{15\,750}f^{(6)}(\xi). \end{aligned}$$

Ve vzorcích pro chybu je ξ nějaký (blíže neurčený) bod z intervalu $(-1, 1)$, pro každou formuli obecně jiný. Všimněte si, že $Q_{G0}(f)$ je obdélníková formule. Formule $Q_{G1}(f)$ integruje přesně polynomy stupně 3 stejně jako Simpsonova formule. Zatímco Simpsonova formule $Q_S(f)$ je tříbodová, Gaussova formule $Q_{G1}(f)$ je jen dvoubodová. Srovnáním tvaru zbytku $R_S(f)$ Simpsonovy formule a $R_{G1}(f)$ Gaussovy formule lze usuzovat, že Gaussova formule je přibližně o 50% přesnější. Tříbodová formule $Q_{G2}(f)$ integruje přesně polynomy stupně 5. Když má funkce f dostatečný počet spojitých derivací, lze používat Gaussovy formule vysokých řádů (třeba až 19 pro desetibodovou formuli), které jsou velmi přesné.

Adaptivní integrace je založena na nerovnoměrném dělení intervalu integrace $\langle a, b \rangle$: v místech, kde je integrovaná funkce dostatečně hladká a mění se pomalu, použijeme dělení hrubší, a v místech, kde je výpočet integrálu obtížný, použijeme dělení jemnější.

Vysvětleme si, jak se to dá prakticky udělat. Integrál $I(a, b) := \int_a^b f(x) dx$ počítáme dvěma kvadraturními formulemi: základní formulí $Q_1(a, b)$ a přesnější formulí $Q_2(a, b)$. Když si představíme, že formule Q_2 je zcela přesná, můžeme chybu $I(a, b) - Q_1(a, b)$ aproximovat výrazem $Q_2(a, b) - Q_1(a, b)$. Proto, je-li $|Q_2(a, b) - Q_1(a, b)| \leq \varepsilon$, kde ε je zadaná přesnost, považujeme $Q(a, b, \varepsilon) := Q_2(a, b)$ za přibližnou hodnotu integrálu $I(a, b)$. V opačném případě, tj. pro $|Q_2(a, b) - Q_1(a, b)| > \varepsilon$, interval $\langle a, b \rangle$ rozdělíme na dva stejně dlouhé intervaly $\langle a, c \rangle$ a $\langle c, b \rangle$, kde $c = (a + b)/2$, na těchto intervalech spočteme nezávisle na sobě přibližné hodnoty $Q_{ac} := Q(a, c, \hat{\varepsilon})$ a $Q_{cb} := Q(c, b, \hat{\varepsilon})$ integrálů $I(a, c)$ a $I(c, b)$, a nakonec položíme $Q(a, b, \varepsilon) := Q_{ac} + Q_{cb}$. Algoritmus je rekurzivní: výpočet $Q(a, c, \hat{\varepsilon})$ a $Q(c, b, \hat{\varepsilon})$ na „dceřinných“ intervalech $\langle a, c \rangle$ a $\langle c, b \rangle$ probíhá analogicky jako výpočet $Q(a, b, \varepsilon)$ na „mateřském“ intervalu $\langle a, b \rangle$.

Šikovnou implementaci adaptivní integrace dostaneme, když základní formule Q_1 je složená Simpsonova formule Q_S^4 a přesnější formule Q_2 je Booleova formule $Q_B \equiv Q_B^4$. Obě formule používají stejné uzly: krajní body a , b , střed $c = \frac{1}{2}(a + b)$ a body $d = a + \frac{1}{4}(b - a)$ v jedné čtvrtině a $e = b - \frac{1}{4}(b - a)$ ve třech čtvrtinách intervalu $\langle a, b \rangle$. Na dceřinném intervalu proto stačí dopočítat jen dvě hodnoty $f(d)$ a $f(e)$, neboť zbývající tři hodnoty $f(a)$, $f(b)$ a $f(c)$ se převezmou z mateřského intervalu.

Protože délka dceřinného intervalu je rovna polovině délky intervalu mateřského, zdá se přirozené volit $\hat{\varepsilon} = \frac{1}{2}\varepsilon$. Teoretická analýza i praktické zkušenosti však potvrdily, že stačí uvažovat $\hat{\varepsilon} = \varepsilon$. Podrobný popis tohoto algoritmu může čtenář najít např. v [Moler] nebo [Mathews, Fink], viz také funkce `quad` v MATLABu.

Hruhý popis zaznamenává následující

algoritmus ADAPT:

```

function  $Q(f, a, b, \varepsilon)$ ;
   $l_1 := Q_1(f, a, b)$ ;           { Simpsonova formule  $Q_S^4$  }
   $l_2 := Q_2(f, a, b)$ ;           { Booleova formule  $Q_B^4$  }
   $c := (a + b)/2$ ;               { střed intervalu  $\langle a, b \rangle$  }
  if  $\text{abs}(l_2 - l_1) < \varepsilon$  then   { je dosažena požadovaná přesnost ? }
     $Q := l_2$                        { ano, hodnota  $l_2$  se akceptuje }
  else                               { ne, rekurzivní volání funkce  $Q$  na }
     $Q := Q(f, a, c, \varepsilon) + Q(f, c, b, \varepsilon)$  { dceřinných subintervalech  $\langle a, c \rangle$  a  $\langle c, b \rangle$  }

```

Kvůli jednoduchosti jsme do algoritmu ADAPT nezahrnuli přenos funkčních hodnot $f(a)$, $f(d)$, $f(c)$, $f(e)$ a $f(b)$ (používají se při vyhodnocení formulí Q_1 a Q_2) z mateřského intervalu $\langle a, b \rangle$ do dceřinných intervalů $\langle a, c \rangle$ a $\langle c, b \rangle$.

Podmíněnost numerického výpočtu integrálu. Ukážeme, že výpočet podle kvadrurní formule (4.31) s kladnými koeficienty w_i je dobře podmíněná úloha. Pro jednoduchost se omezíme jen na prozkoumání vlivu nepřesností ve funkčních hodnotách, tj. nebudeme uvažovat zaokrouhlovací chyby vznikající při provádění aritmetických operací v průběhu vyhodnocování formule.

Předpokládejme tedy, že místo přesných hodnot $f(x_i)$ dosadíme do formule přibližné hodnoty $\tilde{f}(x_i) = f(x_i) + \varepsilon_i$. Pak

$$\tilde{Q}(f) := \sum_{i=0}^n w_i \tilde{f}(x_i) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + \sum_{i=0}^n w_i \varepsilon_i = Q(f) + \sum_{i=0}^n w_i \varepsilon_i.$$

V dalším využijeme toho, že každá smysluplná formule integruje přesně konstantní funkci. Pak ale $\sum_{i=0}^n w_i = Q(1) = \int_a^b 1 \, dx = b - a$. Když označíme $\varepsilon = \max_i |\varepsilon_i|$ velikost maximální chyby ve funkčních hodnotách, dostaneme pro chybu kvadrurní formule odhad

$$|\tilde{Q}(f) - Q(f)| = \left| \sum_{i=0}^n w_i \varepsilon_i \right| \leq \sum_{i=0}^n w_i |\varepsilon_i| \leq \varepsilon \sum_{i=0}^n w_i = (b - a)\varepsilon.$$

Odtud je vidět, že když jsou chyby ε_i malé, je chyba kvadrurní formule také malá.

Numerický výpočet integrálu funkce dvou proměnných. V odstavci věnovaném interpolaci funkcí více proměnných jsme uvedli dva příklady, jak funkci f v oblasti Ω aproximovat interpolantem S . Integrací funkce S přes oblast Ω pak dostaneme složenou kvadraturní formuli $Q(f) = \int_{\Omega} S(x, y) dx dy$ aproximující $I(f) = \int_{\Omega} f(x, y) dx dy$.

V případě po částech lineární interpolace

$$Q(f) = \int_{\Omega} S(x, y) dx dy = \sum_{k=1}^m \int_{T_k} S_k(x, y) dx dy,$$

kde S_k je lineární polynom jednoznačně určený hodnotami funkce f ve vrcholech trojúhelníka T_k a $\Omega = T_1 \cup T_2 \cup \dots \cup T_m$. Snadným výpočtem dostaneme

$$\int_{T_k} S_k(x, y) dx dy = \frac{1}{3} |T_k| \cdot [f(A_k) + f(B_k) + f(C_k)],$$

kde $|T_k|$ je obsah trojúhelníka T_k a $f(A_k)$, $f(B_k)$, $f(C_k)$ jsou hodnoty funkce f ve vrcholech A_k , B_k , C_k trojúhelníka T_k . Pro $f \in C^2(\Omega)$ je $|I(f) - R(f)| \leq Ch^2$, kde h je nejdelší strana trojúhelníků T_k a C je konstanta nezávislá na h . Vidíme tedy, že chyba je libovolně malá, když zvolíme dostatečně jemnou triangulaci oblasti Ω .

V případě bilineární interpolace postupujeme podobně:

$$Q(f) = \int_{\Omega} S(x, y) \, dx dy = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \int_{R_{ij}} S_{ij}(x, y) \, dx dy,$$

kde S_{ij} je bilineární polynom jednoznačně určený hodnotami funkce f ve vrcholech čtyřúhelníka R_{ij} a $\Omega = R_{11} \cup R_{12} \cup \dots \cup R_{nm}$. Na obdélníku R_{ij} pak snadno odvodíme










$$\int_{R_{ij}} S_{ij}(x, y) \, dx dy = \frac{1}{4} |R_{ij}| \cdot (f_{i-1, j-1} + f_{i, j-1} + f_{i-1, j} + f_{ij}),$$









kde $|R_{ij}| = (x_i - x_{i-1})(y_j - y_{j-1})$ je obsah obdélníka R_{ij} . Pokud $f \in C^2(\Omega)$, pak pro chybu platí $|I(f) - R(f)| \leq C(h^2 + k^2)$, kde $h = \max_i(x_i - x_{i-1})$, $k = \max_j(y_j - y_{j-1})$ a kde C je konstanta nezávislá na h, k . Chybu zřejmě opět učiníme libovolně malou, pokud obdélník Ω rozdělíme dostatečně jemně.







Obsah

4 Numerický výpočet derivace a integrálu

- Úvod
- Numerické derivování
- Richardsonova extrapolace
- Numerické integrování
 - Základní formule
 - Složené formule
 - Doplňující poznatky
- Literatura

-  I.S. Berezin, N.P. Židkov: *Číslennyje metody I,II*, Nauka, Moskva, 1962.
-  G. Dahlquist, G. Å Björk: *Numerical Methods*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1974.
-  M. Fiedler: *Speciální matice a jejich použití v numerické matematice*, SNTL, Praha, 1981.
-  D. Hanselman, B. Littlefield: *Mastering MATLAB 7*, Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2005.
-  G. Hämmerlin, K. H. Hoffmann: *Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
-  M. T. Heath: *Scientific Computing. An Introductory Survey*, McGraw-Hill, New York, 2002.
-  I. Horová, J. Zelinka: *Numerické metody*, učební text Masarykovy univerzity, Brno, 2004.
-  J. Kobza: *Splajny*, učební text Palackého univerzity, Olomouc, 1993.
-  J. Klapka, J. Dvořák, P. Popela: *Metody operačního výzkumu*, učební text, FSI VUT Brno, 2001.

-  J. H. Mathews, K. D. Fink: *Numerical Methods Using MATLAB*, Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2004.
-  MATLAB: *Mathematics*, Version 7, The MathWorks, Inc., Natick, 2004.
-  G. Meurant: *Computer Solution of Large Linear Systems*, Elsevier, Amsterdam, 1999.
-  S. Míka: *Numerické metody algebry*, SNTL, Praha, 1985..
-  C. B. Moler: *Numerical Computing with MATLAB*, Siam, Philadelphia, 2004.
<http://www.mathworks.com/moler>.
-  J. Nocedal, S. J. Wright: *Numerical Optimization, Springer Series in Operations Research*, Springer, Berlin, 1999.
-  A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri: *Numerical Mathematics*, Springer, Berlin, 2000.
-  W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: *Numerical Recipes in Pascal, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.

-  P. Přikryl: *Numerické metody matematické analýzy*, SNTL, Praha, 1985.
-  A. R. Ralston: *Základy numerické matematiky*, Academia, Praha, 1973.
-  K. Rektorys: *Přehled užité matematiky I,II*, Prometheus, Praha, 1995.
-  J. Stoer, R. Bulirsch: *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York, 1993.
-  E. Vitásek: *Numerické metody*, SNTL, Praha, 1987.
-  W. Y. Yang, W. Cao, T. S. Chung, J. Morris: *Applied Numerical Methods Using Matlab*, John Willey & Sons, New Jersey, 2005.