Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

Numerický výpočet integrálu

Mějme integrabilní funkci $f :< a, b >\to \mathbb{R}$. Bude nás zajímat aproximace

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x)dx.$$

Numerické vztahy pro aproximaci $I(f)$ se nazývají:

- vzroce pro numerickou integraci – *numerical integration formulae*
- kvadraturní vzorce – *quadrature formulae*

Nejčastěji aproximujeme funkci f funkcí f_n, pro kterou lze integrál spočítat přesně a snadno.

Newtonovy-Cotesovy formule

- opět je možné využít Lagrangeovu interpolaci, tj.

$$I_n(f) = \int_a^b L_n(x)dx$$

- mluvíme pak o tzv. *Newtonových-Cotesových formulích*
- budeme opět předpokládat ekvidistantní rozložení uzlů $x_0, \ldots, x_n$ s krokem h
- rozlišujeme *uzavřené* a *otevřené* formule
  - pro uzavřené platí

$$x_0 = a, x_n = b, h = \frac{b-a}{n}$$

  - pro otevřené platí

$$x_0 = a + h, x_n = b - h, h = \frac{b-a}{n+2}$$

Newtonovy-Cotesovy formule

- na uzlech $x_0, \ldots, x_n$ zkonstruujeme polynom $L_n(x)$
- pak lze aproximovat integrál jako

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx \approx I_n(f) &= \int_a^b L_n(x)dx \\
&= \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x)dx \\
&= \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx
\end{aligned}
$$

- výpočet integrálu $\int_a^b l_i(x)dx$ je již snadný
- nelibí se nám ale závislost na intervalu (a, b)

Newtonovy-Cotesovy formule

- provedem substituci $x = x_0 + th$ a tedy

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{t - j}{i - j} = \varphi(t)$$

- dále zavedeme značení $\pi_n(t) = t(t-1)\ldots(t-n)$.

Newtonovy-Cotesovy formule

- pro uzavřené formule dostáváme

$$\int_a^b l_i(x)dx = h\int_0^n \varphi(t)dt$$

- a tedy

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n f(x_i) h \underbrace{\int_0^n \varphi(t)dt}_{w_i} = h\sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

Newtonovy-Cotesovy formule

- pro otevřené formule dostáváme

$$\int_a^b l_i(x)dx = h\int_{-1}^{n+1}\varphi(t)dt$$

- a tedy

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\underbrace{h\int_{-1}^{n+1}\varphi(t)dt}_{w_i} = h\sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

Newtonovy-Cotesovy formule

- právě váhy w_i definují jednotlivé formule
- pochopitelně nás zajímá chyba aproximace
- snadno vidíme, že

$$E_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b L_n(x)dx = \int_a^b R_n(x)dx$$
$$= \int_a^b f[x_0, \ldots, x_n, x]\omega_n(x)dx$$

kde jsme použili vztah $R_n(x) = f[x_0, \ldots, x_n, x]\omega_n(x)$

Newtonovy-Cotesovy formule

Definition 1

Řád přesnosti kvadraturní formule je maximální r takové, že

$$I_n(f) = \int_a^b f(x)dx \text{ pro } \forall f \in P_r,$$

kde P_r značí množinu všech polynomů stupně r.

Newtonovy-Cotesovy formule

- v následující části budeme upravovat právě integrál

$$\int_a^b f[x_0, \ldots, x_n, x]\omega_n(x)dx$$

- je to náročnější než v případě derivace
- nejprve dokážeme několik pomocných vět a tvrzení

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 2

Věta o střední hodnotě integrálu: *Nechť f je spojitá funkce na $\langle a, b\rangle$, g je integrovatelná na $\langle a, b\rangle$ a je zde nezáporná. Pak existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že platí*

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx.$$

Důkaz.

1. ročník. $\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 3

Diskrétní věta o střední hodnotě integrálu: *Nechť f je spojitá funkce na $\langle a, b\rangle$, $\alpha_0, \ldots, \alpha_n$ jsou nezáporná čísla. Pak pro každou množinu uzlů $x_0, x_1, \ldots, x_n \in \langle a, b\rangle$ existuje $\xi \in \langle a, b\rangle$ takové, že*

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) = f(\xi) \sum_{i=0}^{n} \alpha_i.$$

Důkaz.

Video na Youtube $\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Lemma 4

Nechť $x_{\frac{n}{2}} = x_0 + \frac{n}{2}h$. *Pak platí*

$$\omega_n(x_{\frac{n}{2}} + x) = (-1)^{n+1}\omega(x_{\frac{n}{2}} - x),$$

pro $x > 0$, *tj. funkce* ω_n *je symetrická/antisymetrická kolem středu* $x_{\frac{n}{2}}$ *pro n liché/sudé.*

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Lemma 5

Nechť $x_{\frac{n}{2}} = x_0 + \frac{n}{2}h$ *a buď* x *takové, že* $x \notin \{x_0, \ldots, x_n\}$.

1. *Je-li* $a < x + h \leq x_{\frac{n}{2}}$, *potom platí*

$$|\omega_n(x+h)| < |\omega_n(x)| .$$

2. *Je-li* $x_{\frac{n}{2}} < x + h < b$, *potom platí*

$$|\omega_n(x)| < |\omega_n(x+h)| .$$

Důkaz.

Video na Youtube

□

Newtonovy-Cotesovy formule

Lemma 6

Definujme funkci $\Omega_n(x)$ na intervalu $\langle a, b\rangle$ pro $x_0 = a, x_n = b$ (případ uzavřených formulí) jako

$$\Omega_n(x) = \int_a^x \omega_n(\xi) d\xi.$$

Je-li n sudé, potom platí:

1. $\Omega_n(a) = \Omega_n(b) = 0,$
2. $\Omega_n(x) > 0$ *na intervalu* (a, b).

Důkaz.

Video na Youtube

□

Newtonovy-Cotesovy formule

Lemma 7

Definujme funkci $J_n(x)$ na intervalu $\langle a, b\rangle$ pro $x_0 = a + h, x_n = b - h$ (případ otevřených formulí) jako

$$J_n(x) = \int_a^x \omega_n(\xi) d\xi.$$

Je-li n sudé, potom platí:

1. $J_n(a) = J_n(b) = 0,$
2. $J_n(x) < 0$ *na intervalu* (a, b).

Důkaz.

Video na Youtube

□

Newtonovy-Cotesovy formule

Lemma 8

Pro poměrné diference k-tého řádu platí

$$f[x_i, \ldots, x_{i+k}] = \sum_{j=i}^{i+k} \frac{f(x_j)}{\prod_{m=i, m \neq j}^{i+k} (x_j - x_m)}.$$

To mimo jiné znamená, že poměrné diference jsou symetrické vůči libovolné permutaci svých argumentů.

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Dále rozšíříme poměrné diference o možnost opakujících se argumentů:

$$
\begin{aligned}
f[x_0,\dots,x_n,x,x] &= lim_{y\to x} f[x,x_0,\dots,x_n,y] \\
&= lim_{y\to x} \frac{f[x_0,\dots,x_n,y]-f[x,x_0,\dots,x_n]}{y-x} \\
&= lim_{y\to x} \frac{f[x_0,\dots,x_n,y]-f[x_0,\dots,x_n,x]}{y-x} \\
&= \frac{d}{dx} f[x_0,\dots,x_n,x].
\end{aligned}
$$

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 9

Buď n sudé a nechť $f \in C^{n+2}\langle a, b\rangle$, potom existuje $\xi \in (a, b)$ takové, že chybu uzavřených Newtonových-Cotesových formulí lze vyjádřit jako

$$E_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_a^b x\omega_n(x)dx}_{<0}$$

$$= h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_0^n t\pi_n(t)dt}_{<0}.$$

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 10

Buď n liché a nechť $f \in C^{n+1}\langle a, b\rangle$, potom existuje $\xi \in (a, b)$ takové, že chybu uzavřených Newtonových-Cotesových formulí lze vyjádřit jako

$$E_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_a^b \omega_n(x)dx}_{<0}$$

$$= h^{n+2} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_0^n \pi_n(t)dt}_{<0}.$$

Důkaz.

Video na Youtube

□

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 11

Buď n sudé a nechť $f \in C^{n+2}\langle a, b\rangle$, potom existuje $\xi \in (a, b)$ takové, že chybu otevřených Newtonových-Cotesových formulí lze vyjádřit jako

$$E_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_a^b x\omega_n(x)dx}_{>0}$$

$$= h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_{-1}^{n+1} t\pi_n(t)dt}_{>0} .$$

Důkaz.

Stejný jako u věty (9), ale místo $\Omega_n(x)$ se použije $J_n(x)$, které má na (a, b) akorát opačné znaménko, tj. i integrály v tvrzení věty mají opačné znaménko. $\square$

Newtonovy-Cotesovy formule

Theorem 12

Buď n liché a nechť $f \in C^{n+1}\langle a, b\rangle$, potom existuje $\xi \in (a, b)$ takové, že chybu otevřených Newtonových-Cotesových formulí lze vyjádřit jako

$$E_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_a^b \omega_n(x)dx}_{>0}$$

$$= h^{n+2}\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_{-1}^{n+1} \pi_n(t)dt}_{>0}.$$

Důkaz.

Stejný jako u věty (10), ale místo $\Omega_n(x)$ se použije $J_n(x)$, které má na (a, b) akorát opačné znaménko, tj. i integrály v tvrzení věty mají opačné znaménko.

Newtonovy-Cotesovy formule

	uzavřené	otevřené
sudé	$f \in C^{n+2}$ $h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_0^n t\pi_n(t)dt}_{<0}$	$f \in C^{n+2}$ $h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \underbrace{\int_{-1}^{n+1} t\pi_n(t)dt}_{>0}$
liché	$f \in C^{n+1}$ $h^{n+2} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_0^n \pi_n(t)dt}_{<0}$	$f \in C^{n+1}$ $h^{n+2} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{\int_{-1}^{n+1} \pi_n(t)dt}_{>0}$

Vidíme tedy, že se vyplatí používat formule se sudým n, tj. s **lichým počtem uzlů.**

Příklady integračních formulí

- ukážeme si příklady některých nejčastějších formulí
- u některých si ukážeme, jak chybu integrace odvodit také z Taylorova polynomu

Obdélníková formule

Theorem 13

Buď $f \in C^{(2)}(a,b)$, $x_0 = \frac{a+b}{2}$ *a* $h = \frac{b-a}{2}$, *pak* ***obdélníková*** *formule tvaru*

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_0(f) = 2hf(x_0),$$

je ***otevřená*** *formule pro n* ***sudé*** *a tedy*

$$E_0(f) = h^3 \frac{f^{(2)}(\xi)}{2} \int_{-1}^{1} \underbrace{t\pi_n(t)}_{=t^2} dt$$

jde o aproximaci s přesností ***třetího*** *řádu.*

Obdélníková formule

- odvodíme tvar formule z Lagrangeova polynomu

$$L_0(x) = f(x_0)$$

- a provedeme integraci

$$\int_a^b L_0(x)dx = \int_a^b f(x_0)dx = 2hf(x_0)$$

Obdélníková formule

- řád aproximace lze odvodit také z Taylorova polynomu

$$
\begin{aligned}
E_0(f) &= \int_a^b f(x) - L_0(x) dx = \\
&= \int_a^b \underbrace{f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi)(x-x_0)^2}_{=f(x)} - \underbrace{f(x_0)}_{=L_0(x)} dx = \\
&= f'(x_0) \int_a^b (x_0 - x) dx + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \int_a^b (x-x_0)^2 = \\
&= f'(x_0) \underbrace{\int_{-h}^h t dt}_{=0} + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \int_{-h}^h t^2 dt = \\
&= \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \left[\frac{h^3}{3} \right]_{-h}^h = h^3 \frac{1}{3} f^{(2)}(\xi).
\end{aligned}
$$

Lichoběžníková formule

Theorem 14

Buď $f \in C^{(2)}(a,b), x_0 = a$, $x_1 = b$ a $h = (b-a)$, pak ***lichoběžníková*** *formule tvaru*

$$I_1(f) = h\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2},$$

je ***uzavřená*** *formule pro n* ***liché*** *a tedy*

$$E_1(f) = h^3\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}\int_0^1 \underbrace{\pi_n(t)}_{=t(t-1)}\, dt$$

jde o aproximaci s přesností ***třetího*** *řádu.*

Lichoběžníková formule

- odvodíme tvar formule z Lagrangeova polynomu

$$
\begin{aligned}
L_1(x) &= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\
&= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}(x - x_0)
\end{aligned}
$$

- provedeme integraci

$$
\begin{aligned}
\int_a^b L_1(x) &= \int_a^b f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}(x - x_0)dx = \\
&= hf(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \int_0^h tdt = \\
&= hf(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \frac{h^2}{2} = \\
&= h\left(f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{2}\right) = \\
&= h\frac{f(x_1) + f(x_0)}{2}
\end{aligned}
$$

Lichoběžníková formule

- řád aproximace opět odvodíme i z Taylorova polynomu

$$
\begin{aligned}
E_1(f) &= \int_a^b f(x) - L_1(x)dx = \\
&= \int_a^b \underbrace{f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi)(x-x_0)^2}_{=f(x)} - \\
&- \underbrace{\left(f(x_0) + \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0) \right)}_{=L_1(x)} dx = \\
&= \int_a^b \left(f'(x_0) - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} \right)(x-x_0) + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi)(x-x_0)^2 dx = \\
&= \left(f'(x_0) - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} \right) \int_0^h t dt + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \int_0^h t^2 dt = \\
&= \left(f'(x_0) - f'(\xi_2) \right) \frac{h^2}{2} + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \frac{h^3}{3} = f^{(2)}(\xi_3) \underbrace{(x_0 - \xi_2)}_{<h} \frac{h^2}{2} + \frac{1}{2} f^{(2)}(\xi) \frac{h^3}{3},
\end{aligned}
$$

kde $\xi_2 \in (x_0, x_1)$, $\xi_3 \in (x_0, \xi_2)$

- můžeme tedy ukázat, že

$$
|E_1(f)| \leq \frac{1}{2} \left| f^{(2)}(\xi) + f^{(2)}(\xi_3) \right| h^3.
$$

Lichoběžníková formule

Remark 15

Vidíme tedy, že obdélníková a lichoběžníková formule mají stejný řád aproximace a to i přesto, že lichoběžníková formule používá aproximaci polynomem vyššího stupně. Je to způsobeno tím, že integrál lineární funkce lze spočítat přesně i s pomocí aproximace konstantou.

Cavalieriho-Simpsonova formule

Theorem 16

Buď $f \in C^{(4)}(a,b)$, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$ a $h = \frac{b-a}{2}$, pak ***Cavalieriho-Simpsonova*** *formule tvaru*

$$I_2(f) = \frac{h}{6}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

je ***uzavřená*** *formule pro n* ***sudé*** *a tedy*

$$E_2(f) = h^5 \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_0^2 t \underbrace{\pi_n(t)}_{t(t-1)(t-2)} dt$$

jde aproximaci s přesností ***pátého*** *řádu.*

Shrnutí

- formule se sudým počtem interpolačních uzlů mají stejnou přesnost jako fomule s o jedna menším počtem interpolačních uzlů
- obdélníková formule
- Cavalieriho-Simpsonova formule
- pro integraci se ale také často využívají numerické metody pro řešení ODR