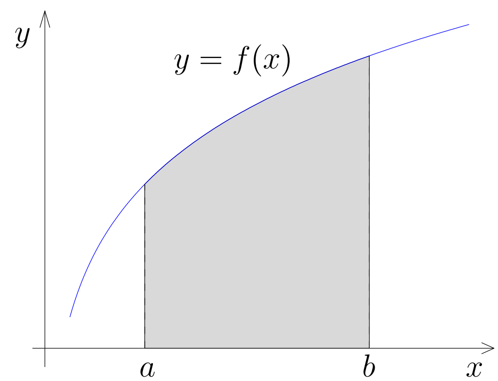
URČITÝ INTEGRÁL FUNKCE

Formulace: Naším cílem je určit přibližnou hodnotu určitého integrálu

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx,$$

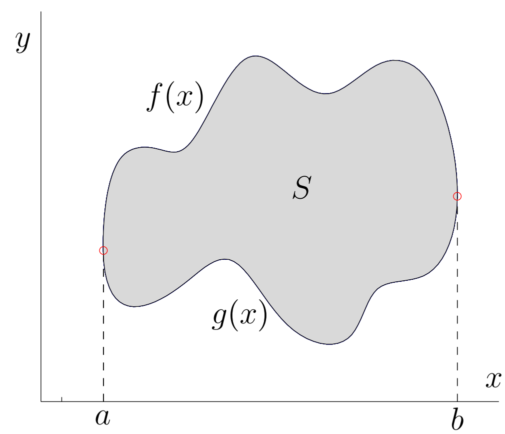
kde předpokládáme, že funkce f je na intervalu $\langle a, b\rangle$ integrovatelná.

Poznámka: Geometrický význam integrálu $I(f)$ (viz obrázek) je obsah plochy mezi grafem funkce f a osou x na intervalu $\langle a, b\rangle$.



Numerické metody výpočtu integrálu užíváme zejména tehdy, když $I(f)$ není možno spočítat analyticky (velmi častý případ) nebo je sice analytické řešení možné, ale je velmi pracné. V případě že máme zadánu funkci f tabulkou, není ani jiný přístup možný.

Příklad: Chceme-li určit obsah plohy mezi grafy funkcí f a g, užijeme určitý integrál.



Pro obsah potom platí $$S = \int_a^b f(x) - g(x)\,dx$$

Přirozený princip numerických metod pro výpočet integrálu vychází z aproximace funkce. Danou funkci f nahradíme její vhodnou aproximací φ a jako aproximaci integrálu $I(f)$ prohlásíme hodnotu integrálu $I(\varphi)$, tj.

$$I(f) \approx I(\varphi) = \int_a^b \varphi(x)\,dx.$$

Poznámka: Narozdíl od výpočtu derivace je výpočet integrálu stabilní, protože je-li φ dobrou aproximací funkce f na intervalu $\langle a, b\rangle$, je integrál $I(\varphi)$ dobrou aproximací $I(f)$.

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b \varphi(x)\,dx\right| \le \int_a^b |f(x) - \varphi(x)|\;dx \le (b-a)\underbrace{\sup_{x\in\langle a,b\rangle} |f(x)-\varphi(x)|}_{\varepsilon}.$$

Princip většiny metod na výpočet určitého integrálu $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ je založen na tom, že interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na N podintervalů $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ tak, že

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots\ldots < x_{N-1} < x_N = b.$$

Na těchto podintervalech nahradíme funkci f polynomem a integrujeme tento polynom. Vzorce pro výpočet integrálu (tzv. **kvadraturní vzorce**) na intervalech $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ budeme nazývat **základní** a vzorec pro výpočet hodnoty integrálu přes celý interval $\langle a, b\rangle$ budeme nazývat **složený** (složený kvadraturní vzorec je dán součtem základních kvadraturních vzorců).

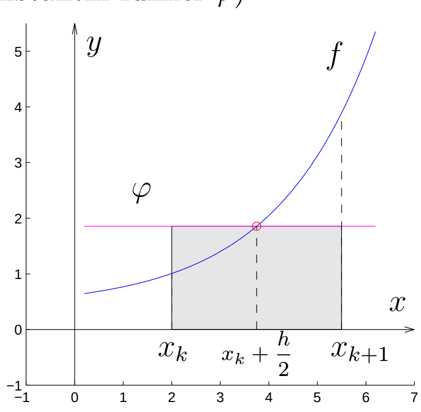
Pro jednoduchost budeme předpokládat, že jsou všechny podintervaly $\langle x_k, x_{k+1}\rangle$ stejně velké, tj. máme tzv. ekvidistantní uzly, které můžeme vyjádřit jako $x_k = x_0 + kh$, kde $k = 0, 1, \ldots, N-1$ a $h = \dfrac{b-a}{N}$.

Uveďme si nyní tři nejjednodušší základní kvadraturní vzorce, které patří mezi tzv. **Newtonovy-Cotesovy kvadraturní vzorce**.

1) Obdélníkové pravidlo (funkci f nahrazujeme konstantní funkcí φ)

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

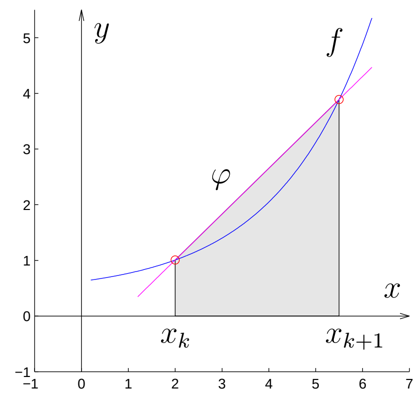
$$\approx h\cdot f(x_k + \frac{h}{2}) \equiv R_Z(f, h)$$



2) Lichoběžníkové pravidlo (funkci f nahrazujeme lineární funkcí φ)

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

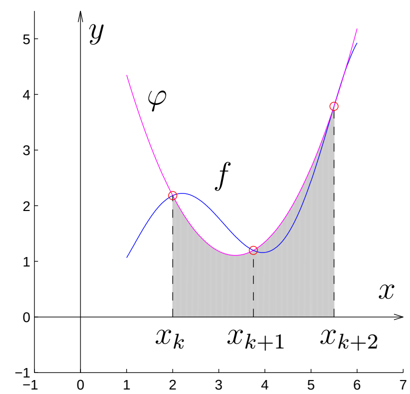
$$\approx \frac{h}{2}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right] \equiv T_Z(f,h)$$



3) Simpsonovo pravidlo (funkci f nahrazujeme kvadratickou funkcí φ)

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

$$\approx \frac{h}{3}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] \equiv S_Z(f,h)$$



Příklad k procvičení: Odvoďte základní vzorec pro Simpsonovo pravidlo.

Poznámka: Základní vzorce v předchozím textu jsme odvodili na základě geometrické interpretace. V případě, že bychom chtěli vyjádřit současně i vztahy pro chyby těchto vzorců, museli bychom použít k odvození Taylorův rozvoj. Získali bychom tyto vztahy:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = R_Z(f,h) + \frac{h^3}{24} f''(\xi)$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = T_Z(f,h) - \frac{h^3}{12} f''(\xi)$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)\,dx = S_Z(f,h) - \frac{h^5}{90} f^{(IV)}(\xi)$$

Příklad: Pomocí výše uvedených Newtonových-Cotesových vzorců vypočtěte integrál

$$\int_1^{1,2} e^x \, dx.$$

Řešení: (Přesné řešení je $[e^x]_1^{1,2} = e^{1,2} - e^1 \doteq 0{,}601835$.)

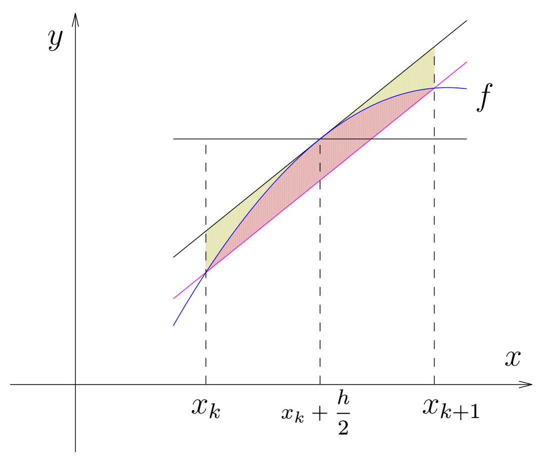
$$R_Z(e^x;\, 0,2) = 0,2e^{1,1} \doteq 0{,}600833 \qquad \text{chyba: } 0{,}001002$$

$$T_Z(e^x;\, 0,2) = \frac{0,2}{2}(e^{1,0} + e^{1,2}) \doteq 0{,}603839 \qquad \text{chyba: } 0{,}002003$$

$$S_Z(e^x;\, 0,1) = \frac{0,1}{3}(e + 4e^{1,1} + e^{1,2}) \doteq 0{,}601835 \qquad \text{chyba: } 0{,}000000$$

□

Poznámka: Všimněme si chyb. U obdélníkového pravidla vyšla chyba menší než u lichoběžníkového, přestože u lichoběžníkového pravidla jsme funkci f aproximovali „lepší“ funkcí φ (lineární). Chyba u Simpsonova pravidla vyšla menší než u ostatních. Tyto výsledky potvrzují vztahy pro chyby jednotlivých vzorců na minulé straně. Fakt, že obdélníkové pravidlo je přesnější než lichoběžníkové můžeme demonstrovat na obrázku:



Chceme-li získat složené kvadraturní vzorce, je třeba sečíst základní kvadraturní vzorce. Pro uvedené základní Newtonovy-Cotesovy dostaneme tyto složené kvadraturní vzorce:

$$\begin{aligned}
R(f,h) &\equiv h\cdot \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k + \frac{h}{2}) \\
T(f,h) &\equiv \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)\right] = \\
&= h\cdot \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + \frac{1}{2}f(x_N)\right] \\
S(f,h) &\equiv \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \right. \\
&\quad \left. + \ldots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\right]
\end{aligned}$$

Pro chyby složených vzorců potom platí:

$$
\begin{aligned}
I &= R(f,h) + (b-a)\frac{h^2}{24}f''(\xi) \\
I &= T(f,h) - (b-a)\frac{h^2}{12}f''(\xi) \\
I &= S(f,h) - (b-a)\frac{h^4}{180}f^{(IV)}(\xi)
\end{aligned}
$$

Pro zpřesňování výsledků nám, stejně jako u numerického výpočtu derivace, poslouží **Richardsonova extrapolace**. Někdy se tato metoda také nazývá Rungeova metoda nebo metoda polovičního kroku. Ukažme si nyní ještě jednou, jak se vztah pro zpřesnění odvodí:

Předpokládejme, že výraz pro chybu má tvar $e(f) = h^k M, \quad h = \dfrac{b-a}{N}$.
Přesná hodnota integrálu je potom

$$I = K(h) + h^k M \tag{5}$$

Integrál vypočteme stejným vzorcem, ale s krokem $\dfrac{h}{2}$.
Dostaneme

$$I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \underbrace{\left(\frac{h}{2}\right)^k M_1}_{\text{ozn. } \varepsilon} \qquad \Rightarrow \qquad h^k = \frac{\varepsilon\, 2^k}{M_1} \tag{6}$$

Dosadíme-li h^k do (5), získáme

$$I = K(h) + \frac{\varepsilon\, 2^k\, M}{M_1} \tag{5'}$$

Předpokládáme-li, že se hodnota derivace ve výrazu $e(f)$ pro chybu příliš nemění (tj. $M \approx M_1$), potom $\dfrac{M}{M_1} \approx 1$ a pro (5′) a (6) musí platit

$$K\left(\frac{h}{2}\right) + \varepsilon \approx K(h) + 2^k \varepsilon$$

Odtud plyne odhad chyby ε

$$\varepsilon \approx \frac{1}{2^k - 1}\left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h)\right]$$

a přesnější hodnota integrálu je potom

$$I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^k - 1}\left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h)\right].$$

Příklad: Pomocí lichoběžníkového pravidla vypočtěte $\int_1^5 \ln x \, dx$. Ke zpřesnění použijte Richardsonovu extrapolaci.

Řešení: Pro rozvoj chyby lichoběžníkového pravidla platí

$$I = T(f,h) + \underbrace{a_1 h^2}_{\text{tab. k=2}} + \underbrace{a_2 h^4}_{\text{tab. k=4}} + a_3 h^6 + \dots$$

Výsledky opět zapíšeme do tabulky

h	$T(f,h)$	1. zpřesnění ($k=2$)	2. zpřesnění ($k=4$)
4	$\frac{4}{2}(\ln 1 + \ln 5) = 3,2188$		
2	$\frac{2}{2}(\ln 1 + 2\ln 3 + \ln 5 =$ $= 3,8066$	$\frac{3,8066 - 3,2188}{3} +$ $+ 3,8066 = \underline{4,0025}$	
1	$\frac{1}{2}(\ln 1 + 2\ln 2 + 2\ln 3 +$ $+ 2\ln 4 + \ln 5) = 3,9827$	$\frac{3,9827 - 3,8066}{3} +$ $+ 3,9827 = \underline{4,0414}$	$\frac{4,0414 - 4,0025}{15} +$ $+ 4,0414 = \underline{\underline{4,04399}}$

Pro kontrolu uveďme přesnou hodnotu integrálu:

$$\int_1^5 \ln x \, \mathrm{d}x = \left| \begin{array}{ll} u = \ln x & v' = 1 \\ u' = \frac{1}{x} & v = x \end{array} \right| = [x \ln x]_1^5 - \int_1^5 \mathrm{d}x = 5\ln 5 - 4 \doteq \underline{\underline{4,04719}}$$

□

Poznámka: Newtonovy-Cotesovy vzorce používají $(m+1)$ ekvidistantních uzlů a integrují přesně polynomy až do m-tého stupně (máme na mysli základní vzorce na intervalu $\langle x_k, x_{k+m}\rangle$). Pro zvýšení přesnosti by se mohlo zdát výhodné použít více uzlů a funkci f aproximovat polynomem vyššího řádu. Ze zkušeností z aproximace funkce polynomem ovšem víme, že limitní případ polynomu stupně $m \to \infty$ nemusí odpovídat původní funkci (říkáme, že Newton-Cotesovy vzorce **nejsou konvergentní**).

Další skupinou metod pro výpočet hodnoty určitého integrálu jsou tzv. **Gaussovy kvadraturní vzorce**. Jejich princip spočívá v tom, že se snažíme, aby kvadraturní vzorec integroval přesně polynomy co možná nejvyššího řádu. Obecně kvadraturní vzorec budeme uvažovat ve tvaru

$$K(f) = \sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i),$$

kde w_i jsou tzv.*váhy* a x_i jsou *uzly*.

Uvažujeme-li, že na základním intervalu máme $m+1$ bodů, dá se ukázat, že nejvyšší možný stupeň polynomu, který se pomocí kvadraturního vzorce integruje přesně, je $2m+1$ (tomuto číslu říkáme **algebraický řád přesnosti**). U Newtonových-Cotesových vzorců byl stupeň m. Cenou za vyšší přesnost budou ovšem **neekvidistantní uzly**. V následujícím příkladě je ukázán postup pro nalezení nejjednoduššího Gaussova kvadraturního vzorce.

Příklad: Určete Gaussův kvadraturní vzorec pro $m = 0$ (tj. v intervalu uvažujeme pouze jeden uzel) a pro interval $\langle -1, 1\rangle$.

Řešení: Pro $m = 0$ má hledaný kvatraturní vzorec tvar $K(f) = w_0 f(x_0)$, kde vystupují 2 neznámé w_0 a x_0. Víme, že vzorec musí přesně integrovat:

1) konstantu

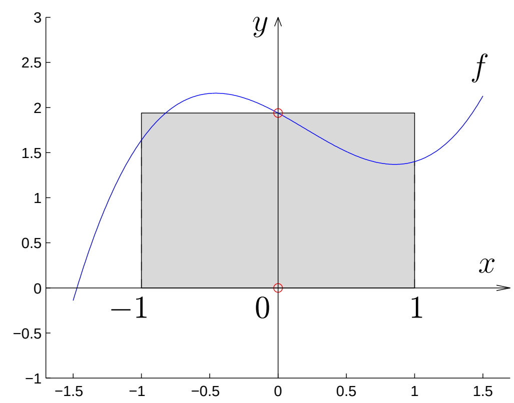
$$\int_{-1}^{1} b\,dx = 2b \overset{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{b} \quad \Rightarrow \quad w_0 = 2.$$

2) lineární funkci

$$\int_{-1}^{1} (ax+b)\,dx = \left[a\frac{x^2}{2} + bx\right]_{-1}^{1} = \underbrace{\frac{a}{2} - \frac{a}{2}}_{=0} + 2b \overset{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{ax_0+b} \quad \Rightarrow \quad 2b = 2(ax_0+b) \Rightarrow x_0 = 0.$$

Nejjednodušší Gaussův kvadraturní vzorec je:

$$K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = 2f(0) + \underbrace{\frac{1}{3} f''(\xi)}_{\text{chyba}}$$

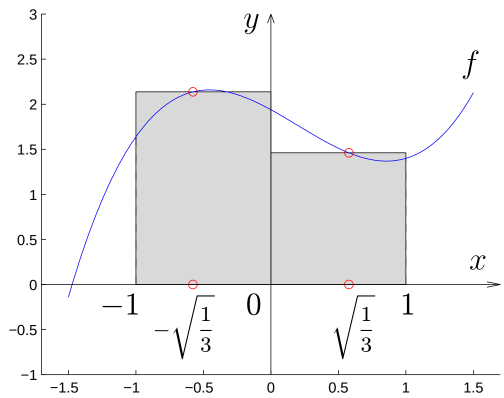


□

Poznámka: Další Gaussův kvadraturní vzorec (pro $m = 1$) vypadá takto:

$$K(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \underbrace{\frac{1}{135} f^{(IV)}(\xi)}_{\text{chyba}}.$$

Geometricky si jej lze představit takto:



Poznámka: Koeficienty a uzly vzorců vyšších řádů jsou uvedeny v tabulkách. Opět lze používat složené vzorce.

Poznámka: To, že jsme vyjádřili $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$ neubírá nic na obecnosti, můžeme totiž libovolný interval $\langle a, b\rangle$ transformovat na $\langle -1, 1\rangle$ a použít odvozené vztahy.