

Numerická integrace

Matematické algoritmy (11MAG)

Jan Příkryl

10. přednáška 11MAG
pondělí 7. prosince 2014

verze:2014-12-07 23:54

Obsah

1 Numerická integrace	2
1.1 Formulace úlohy	2
1.2 Numerické metody výpočtu integrálu: podmíněnost a stabilita	3
1.3 Algebraická přesnost kvadraturních vzorců	4
1.4 Konvergence kvadraturních vzorců	6
2 Newtonovy-Cotesovy vzorce	7
2.1 Příklady Newtonových-Cotesových vzorců	7
2.2 Vlastnosti Newtonových-Cotesových vzorců	8
3 Gaussovy kvadraturní vzorce	10
3.1 Odvození Gaussových kvadraturních vzorců	11
3.2 Gaussovy kvadraturní vzorce pro obecný interval	12
3.3 Některé vlastnosti Gaussových kvadraturních vzorců	13
3.4 Progresivní Gaussova kvadratura	14
4 Složené kvadraturní vzorce	15
5 Dodatky	15
5.1 Adaptivní kvadratura	16
5.2 Dvojné integrály	17
5.3 Vícerozměrné integrály	17

Pro detailnější obeznámení s pojmy, uváděnými níže, doporučuji i zde konzultovat knihu Michaela T. Heathe [1], případně nějakou z českých učebnic či mnoha skript o numerické matematice,

kteřá v posledních letech vyšla – například [2], [3], [4] (části tohoto skriptu jsou dostupné i online). Mnohé ze zde použitých obrázků jsme převzali právě z [1].

1 Numerické metody výpočtu jednorozměrných integrálů

V této přednášce se budeme zabývat numerickými metodami pro (přibližný) výpočet jednorozměrných integrálů s konečnými mezemi, tedy integrálů $I(f)$ tvaru

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx, \quad (1)$$

kde $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je reálná funkce jedné reálné proměnné, definovaná a integrovatelná na intervalu $[a, b]$ a a, b jsou daná reálná čísla. Počítat některé takové integrály explicitně v ruce jsme se naučili možná již na střední škole a pokud ne, pak v základních kursech matematiky na škole vysoké.

Pro porozumění podstatě metod pro numerický výpočet integrálu je výhodné podívat se znovu na to, jak se definuje Riemannův jednorozměrný integrál funkce. ■ **zopakovat definici** ■

Stejně jako v této definici, kde se hodnota integrálu definuje jako limita jistých vážených průměrů funkčních hodnot, se totiž většina numerických metod pro výpočet integrálů (říká se také **numerická kvadratura**) konstruuje jako vhodně sestavený vážený průměr určitého počtu navzorkovaných funkčních hodnot. Hlavním problémem je zde tedy volba bodů, v nichž se počítají (vzorkují) funkční hodnoty (říká se jim **uzly kvadratury** nebo **uzly kvadraturního vzorce**) a stanovení vhodných koeficientů pro jejich lineární kombinaci ve tvaru váženého průměru (**váhy kvadraturního vzorce**).

Formálně má obecný kvadrurní vzorec $Q_n(f)$ s n uzly tvar

$$I(f) \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i), \quad (2)$$

kde w_i jsou **váhy** nebo také **koeficienty** uvažovaného vzorce a kde budeme předpokládat, že pro uzly x_i platí $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$. Říkáme, že kvadrurní vzorec je **otevřený**, pokud $a < x_1$ a $x_n < b$, a že je **uzavřený**, jestliže $a = x_1$ a $x_n = b$. Kvadrurní vzorec (2) nazýváme také *n-bodový kvadrurní vzorec*.

1.1 Formulace úlohy

Numerický výpočet integrálu tedy spočívá v tom, že řešení matematické úlohy (1), která má infinitesimální charakter (obecnou funkci nelze charakterizovat konečným počtem parametrů, limita v definici) přibližně nahradíme (aproximujeme) řešením numerické úlohy, totiž výpočtem hodnoty vhodného kvadratického vzorce (2), který má konečný počet uzlů a vah. Hlavním cílem numerických metod pro výpočet integrálu je pak volit uzly a váhy takovým způsobem, abychom dosáhli požadované úrovně přesnosti a přitom vynaložili pouze rozumné výpočetní úsilí, které je charakterizované především počtem výpočtů hodnot integrandu. Popravdě řečeno se velká část integrálů, které se vyskytují v praxi, v té či oné formě aproximuje numericky. Integrály, které jsme počítali v základním kurzu matematické analýzy, byly spíše ukázkové příklady na procvičení. Tak například už jednoduše vypadající integrál

$$I(f) = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

neumíme vypočítat analyticky.

Užitečnost numerického výpočtu integrálů vidíme na první pohled v oblasti geometrie a mechaniky, což jsou oblasti v nichž vlastně pojem integrálu vznikl, ale k aplikacím patří také mnohé další oblasti vědy a techniky, jako

- integrální transformace, jako je třeba Laplaceova transformace,
- výpočet hodnot speciálních funkcí v aplikované matematice a matematické fyzice (gamma funkce, Besselovy funkce, funkce chyby atd.), z nichž mnohé lze vyjádřit pomocí integrálů,
- metoda konečných a hraničních prvků pro řešení diferenciálních rovnic,
- integrální rovnice a variační metody,
- pravděpodobnost a statistika, kde jsou mnohé základní pojmy definovány pomocí integrálů,
- klasická a kvantová fyzika

a jistě i jiné.

1.2 Numerické metody výpočtu integrálu: podmíněnost a stabilita

Přirozený princip numerických metod pro výpočet integrálu vychází z našich znalostí o aproximaci funkcí (k tématu se vrátíme v jedné z následujících přednášek). Postupujeme tak, že danou funkci f nahradíme nějakou její aproximací φ , jejíž integrál umíme vypočítat analyticky a jako přibližnou hodnotu integrálu $I(f)$ použijeme integrál $I(\varphi)$. Jako aproximující funkce se typicky používají polynomy, a to jednak proto, že je snadné je explicitně integrovat, jednak také díky tzv. *Weierstrassově větě*, která velmi zhruba říká, že každá funkce spojitá na uzavřeném intervalu se dá libovolně přesně nahradit vhodným polynomem dostatečně vysokého stupně. A funkce, pro něž jsou běžné numerické kvadratury určeny, jsou především funkce spojitě nebo po částech spojitě.

Není těžké ukázat, že je-li aproximující funkce φ dobrým přiblížením funkce f na celém intervalu $[a, b]$, je integrál z φ dobrou aproximací integrálu z f , neboť

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b \varphi(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - \varphi(x)| dx \leq (b - a) \sup_{x \in [a, b]} |f(x) - \varphi(x)|.$$

Odsud také plyne, že *absolutní číslo podmíněnosti* ■ **ověřit, že v úvodu do numeriky opravdu definujeme absolutní a relativní číslo podmíněnosti** ■ výpočtu integrálu vzhledem k poruchám ve funkčních hodnotách je $(b - a)$ a integrace je tedy vnitřně v tomto smyslu *dobře podmíněná*. Dá se ukázat, že pro relativní číslo podmíněnosti odsud ale dostáváme odhad

$$\text{cond}(I(f)) \leq \frac{(b - a) \sup_{x \in [a, b]} |f(x)|}{|I(f)|},$$

který může nabývat velkých hodnot, jestliže počítáme integrál o malé absolutní hodnotě z funkce, která má velké funkční hodnoty. Je ovšem otázkou, zda v takovém případě (jmenovatel blízký nule), bychom i zde neměli používat spíše absolutní číslo podmíněnosti. Pokud jde o podmíněnost vzhledem k poruchám v integračních mezích, zde pouze řekneme (viz k tomu [1]), že absolutní podmíněnost je v zásadě dobrá, s výjimkou případů, kde funkce f má vně intervalu $[a, b]$ singularity poblíž koncových bodů (což nepřekvapuje).

Kromě přesnosti kvadraturního vzorce, kterou se budeme zabývat později (až popíšeme konkrétní vzorce), je třeba se zabývat také **stabilitou výpočtu**, tedy vlivem zaokrouhlovacích chyb a jiných poruch na výsledek výpočtu podle kvadraturních vzorců ■ **bylo definováno v úvodu do numeriky?** ■. Tato analýza stability se dá v daném případě provést obecně. Jestliže \hat{f} je funkce f porušená nějakými chybami, pak platí

$$\begin{aligned} |Q_n(\hat{f}) - Q_n(f)| &= |Q_n(\hat{f} - f)| \\ &= \left| \sum_{i=1}^n w_i (\hat{f}(x_i) - f(x_i)) \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^n (|w_i| \cdot |\hat{f}(x_i) - f(x_i)|) \\ &\leq \left(\sum_{i=1}^n |w_i| \right) \sup_{x \in [a,b]} |\hat{f}(x) - f(x)|. \end{aligned}$$

Odsud je vidět, že absolutní číslo podmíněnosti kvadraturního vzorce je nanejvýš $\sum_{i=1}^n |w_i|$.

Je přirozené od kvadraturních vzorců požadovat, aby dávaly přesnou hodnotu integrálu alespoň pro konstantní funkce. Díky linearitě integrálu i kvadraturních vzorců stačí, aby tuto vlastnost měly pro funkci identicky rovnou jedné na $[a, b]$. Integrál z takové funkce je $b - a$, takže pro použitelné kvadraturní vzorce musí platit

$$\sum_{i=1}^n w_i = b - a.$$

Připomeňme ■ **bylo definováno v úvodu do numeriky?** ■, že numerický algoritmus je **stabilní**, jestliže jeho podmíněnost je stejná jako je podmíněnost řešené úlohy nebo je s ní srovnatelná. Stabilní algoritmy tedy nezhoršují citlivost řešení na poruchy ve vstupních datech a během výpočtu. Pokud jde o námi uvažované kvadraturní vzorce, pak pokud jsou všechny váhy nezáporné, je tedy jeho absolutní číslo podmíněnosti nanejvýš $b - a$, což je srovnatelné s podmíněností řešené úlohy na výpočet integrálu. Kvadraturní vzorce s nezápornými vahami jsou tedy numericky stabilní. Na druhé straně, budou-li některé váhy záporné (takové vzorce se také vyskytují), může být absolutní číslo podmíněnosti vzorce mnohem větší a takový kvadraturní vzorec je pak nestabilní.

1.3 Algebraická přesnost kvadraturních vzorců

K dosažení požadované přesnosti za rozumnou cenu se musíme při konstrukci kvadraturních vzorců zabývat dvěma otázkami:

- Jak by měly být zvoleny vzorkovací body (uzly vzorce x_i)?
- Jaké váhy w_i bychom měli přisoudit jednotlivým vzorkům (funkčním hodnotám v uzlech $f(x_i)$)?

Vzhledem k tomu, co jsme řekli o aproximaci spojitých funkcí polynomy, je přirozené, že se při konstrukci kvadraturních vzorců používají dva základní postupy:

- buď se snažíme při předem daných uzlech stanovit váhy tak, aby vzorec přesně integroval polynomy co nejvyššího stupně; protože vzorec Q_n má při pevně daných uzlech n volných

parametrů (vah), sestrojíme jej pokud možno tak, aby přesně integroval polynomy do stupně $n - 1$ (ty mají totiž právě n koeficientů); pokud připustíme i libovolnou volbu uzlů, má Q_n celkem $2n$ parametrů a snažíme se, aby sestrojený vzorec přesně integroval polynomy do stupně $2n - 1$,

- nebo sestavíme předem aproximaci obecně integrované funkce polynomem dostatečně vysokého (v praxi ale často i nízkého) stupně a tu pak zintegrujeme; použitá aproximace bude přirozeně využívat funkční hodnoty $f(x_i)$ v jistých uzlech x_i a dá se ukázat, že její integrál pak bude mít obecně opět tvar (2).

V souvislosti s tím, co jsme právě řekli, se zdá být užitečné zavést pojem algebraické přesnosti kvadraturního vzorce, který bude udávat maximální stupeň přesně integrovaných polynomů pro daný vzorec. Řekneme, že kvadraturní vzorec Q_n má **algebraickou přesnost d** (nebo také **je řádu d**), jestliže integruje přesně (tedy s nulovou chybou) všechny polynomy stupně d , ale není už přesný pro nějaký polynom stupně $d + 1$. Ukážeme nyní, že při daném n lze vždy sestrojit kvadraturní vzorec algebraické přesnosti alespoň $n - 1$.

Zvolme libovolně n uzlů kvadratury a pokusme se stanovit váhy $w_i, i = 1, 2, \dots, n$, tak aby náš kvadraturní vzorec integroval přesně všechny polynomy až do stupně $n - 1$. Protože každý polynom stupně $n - 1$ je lineární kombinací bázových funkcí $1, x, x^2, \dots, x^{n-1}$ a jak výpočet integrálu, tak výpočet kvadratury je lineární záležitostí **■ raději připomenout, proč ■**, stačí, aby náš vzorec integroval přesně tyto bázové funkce (říká se jim také *monomy*). Tento požadavek nám ihned dává soustavu n lineárních algebraických rovnic pro váhy w_i (pamatujme, že uzly jsme pevně zvolili předem; jediný požadavek je, aby byly vzájemně různé), kterým se také říkáva *momentové rovnice*:

$$\begin{aligned} w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1 + \dots + w_n \cdot 1 &= \int_a^b 1 \, dx = b - a, \\ w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + \dots + w_n \cdot x_n &= \int_a^b x \, dx = (b^2 - a^2)/2, \\ &\vdots \\ w_1 \cdot x_1^{n-1} + w_2 \cdot x_2^{n-1} + \dots + w_n \cdot x_n^{n-1} &= \int_a^b x^{n-1} \, dx = (b^n - a^n)/n. \end{aligned} \tag{3}$$

Čtvercová matice této soustavy (napište si ji) se nazývá **Vandermondova matice** a je o ní známo, že pokud jsou čísla x_i navzájem různá, je regulární. Soustava (3) má tedy právě jedno řešení a jejím vyřešením můžeme získat hledané váhy a dokončit tak konstrukci kvadraturního vzorce $Q_n(f)$ s algebraickou přesností nejméně $n - 1$ (díky dalším vlastnostem získaného vzorce může být jeho řád i o něco vyšší).

Příklad 1 (Výpočet vah kvadraturního vzorce). Právě popsany postup založený na řešení soustavy (3) popíšeme na odvození tříbodového kvadraturního vzorce

$$Q_3(f) = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) + w_3 f(x_3)$$

pro integraci přes interval $[a, b]$ Za tři uzly vzorce vezmeme dva krajní body s střed intervalu, tj. položíme $x_1 = a, x_2 = (a + b)/2, x_3 = b$. Soustavu 3 lineárních rovnic pro w_1, w_2, w_3 zde nevypisujeme, čtenář si ji snadno může sestavit sám podle (3). Soustavu vyřešíme, například bez problémů Gaussovou eliminací, a dostaneme váhy

$$w_1 = \frac{1}{6}(b - a), \quad w_2 = \frac{2}{3}(b - a), \quad w_3 = \frac{1}{6}(b - a).$$

Výsledný kvadraturní vzorec je znám jako *Simpsonovo pravidlo* a dá se ukázat, že (díky své symetrii) je přesný dokonce pro polynomy třetího stupně.

Pokud uzly nezadáme předem pevně a necháme je také jako volné parametry, nebude soustava (3) už soustavou lineárních rovnic, ale budeme místo ní mít soustavu nelineárních rovnic s neznámými w_i i x_i . Protože je zde více volných parametrů, bude také více těchto rovnic, pokud se nám je ale podaří analyticky nebo numericky vyřešit, můžeme při daném n dosáhnout v podstatě dvojnásobné algebraické přesnosti. Na takovém přístupu jsou založeny Gaussovy kvadraturní vzorce, k nimž se ještě krátce vrátíme později.

Při pevně zvolených uzlech je ale místo výše popsaného a příkladem ilustrovaného postupu běžnější používat postup druhý, totiž zaměřit se na náhradu integrované funkce vhodným aproximujícím polynom a ten integrovat. Na tomto principu jsou založeny Newtonovy-Cotesovy vzorce, které v další kapitole popíšeme podrobněji. Patří k nim také Simpsonovo pravidlo z našeho předchozího příkladu.

1.4 Konvergence kvadraturních vzorců

Vzpomeneme-li si na definici Riemannova integrálu, kde hodnota integrálu je u integrovatelné funkce limitou Riemannových vážených průměrů při počtu vzorkovacích bodů rostoucím do nekonečna, můžeme čekat, že podobně se budou chovat i alespoň některé posloupnosti kvadraturních vzorců při $n \rightarrow \infty$. Při dané funkci f budeme posloupnost kvadraturních vzorců $\{Q_n(f), n = 1, 2, \dots\}$ také nazývat **kvadraturou**. Řekneme pak, že daná posloupnost vzorců tvoří na intervalu $[a, b]$ **konvergentní kvadraturu**, jestliže pro každou funkci f , která je na $[a, b]$ spojitá, platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = \int_a^b f(x) dx.$$

Pro pořádek a pro ty, kdo o aproximaci funkcí již vědí více, uvádíme, že pojem konvergentní kvadratury vyžaduje platnost uvedeného limitního vztahu pro každou funkci, která je spojitá, a další požadavky se zde na ni nekladou. Pokud budeme vědět, že funkce f má například ohraničené všechny derivace na $[a, b]$, mohou pro ni konvergovat i takové posloupnosti kvadraturních vzorců, jež v našem smyslu konvergentní kvadraturu netvoří. Posloupnost Riemannových součtů je tedy z našeho hlediska konvergentní kvadratura.

V předchozích odstavcích jsme naznačili, že je v zásadě možné konstruovat posloupnosti kvadraturních vzorců $\{Q_n(f), n = 1, 2, \dots\}$ takové, že s rostoucím n jejich algebraická přesnost poroste. Bylo by proto přirozené čekat, že vezmeme-li takovou posloupnost, bude tvořit konvergentní kvadraturu. To ale není obecně pravda, ukazuje se, že podstatnou roli přitom hraje to, jakým způsobem na $[a, b]$ rozmístujeme vzorkovací body (uzly kvadratury). O příkladech konvergentních a nekonvergentních kvadratur se zmíníme ještě později.

V praxi se při výpočtu snažíme minimalizovat výpočetní práci, takže zde posloupnosti kvadraturních vzorců volíme především tak, aby vzorce byly do sebe vnořené. Přesněji, říkáme, že daná kvadratura je **vnořená** nebo **progresivní**, jestliže při $m > n$ tvoří uzly $Q_n(f)$ podmnožinu uzlů $Q_m(f)$. To tedy znamená, že již spočítaných n funkčních hodnot můžeme v $Q_m(f)$ znovu použít a potřebujeme tedy vypočítat pouze $m - n$ nových funkčních hodnot, čímž šetříme.

Dá se ukázat, že kromě zvyšování řádu kvadratury zvyšováním počtu uzlů je smysluplné také postupovat způsobem obdobným, jako použil Riemann ve své definici integrálu, kde mezi každými dvěma dělicími body aproximoval funkci se stále stejnou řádovou přesností (konstantou), a nezvyšoval tedy algebraickou přesnost, ale pouze počet vzorkovacích bodů. Přesnost lze tedy

zvyšovat nejen zvyšováním algebraického řádu, ale také tak, že vyjdeme z jednoho *základního* kvadraturního vzorce, interval integrace postupně dělíme na malé části (tak zvané **panely**) a daný základní kvadraturní vzorec aplikujeme postupně na každém panelu. Se zjemňováním sítě panelů tak můžeme docílit požadované přesnosti, aniž bychom zvyšovali řád kvadratury. Tímto způsobem (rozmyslete si) dostáváme opět posloupnost kvadraturních vzorců, která je založena na jednom vzorci základním. Takto zkonstruovaným kvadraturním vzorcům se pak říká vzorce **složené**. Zaměříme se nyní nejprve na popis vybraných základních kvadraturních vzorců.

2 Newtonovy-Cotesovy vzorce

Nejjednodušší způsob, jak rozložit vzorkovací body na intervalu $[a, b]$ je bezesporu rozložit je rovnoměrně, *ekvidistantně* (ve stejné vzdálenosti). Při takovémto rozložení uzlů pak vznikají kvadraturní vzorce, kterým se říká **Newtonovy-Cotesovy vzorce**. Budeme-li chtít sestavit n -bodový **otevřený** Newtonův-Cotesův vzorec, použijeme jako uzly body

$$x_i = a + i(b - a)/(n + 1), \quad i = 1, \dots, n,$$

kdežto **uzavřený** n -bodový Newtonův-Cotesův vzorec bude mít uzly

$$x_i = a + (i - 1)(b - a)/(n - 1), \quad i = 1, \dots, n.$$

2.1 Příklady Newtonových-Cotesových vzorců

Uvádíme tři příklady nejjednodušších a neznámějších často používaných Newtonových-Cotesových vzorců.

Příklad 2 (Obdélníkové pravidlo). Pokud integrovanou funkci nahradíme na $[a, b]$ konstantou (tedy polynomem nultého stupně) rovnou funkční hodnotě ve středu intervalu a tuto konstantu zintegrujeme přes $[a, b]$, dostaneme jednobodový otevřený Newtonův-Cotesův vzorec

$$M(f) = (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right),$$

kterému se říká **obdélníkové pravidlo** (angl. *midpoint rule*).

Příklad 3 (Lichoběžníkové pravidlo). Pokud integrovanou funkci nahradíme na $[a, b]$ lineární funkcí spojující její hodnoty v krajních bodech (přímkou, tedy polynomem prvního stupně) a tuto lineární funkci zintegrujeme, dostaneme dvoubodový uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec

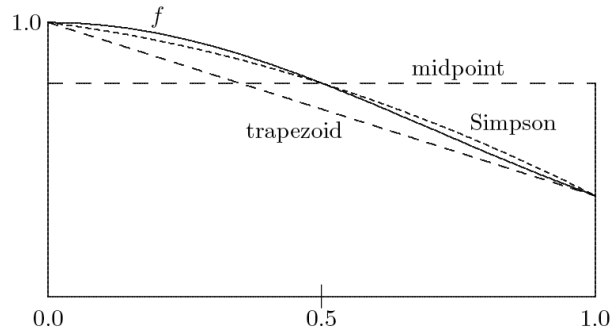
$$T(f) = \frac{b - a}{2}(f(a) + f(b)),$$

kterému se říká **lichoběžníkové pravidlo** (angl. *trapezoid rule*).

Příklad 4 (Simpsonovo pravidlo). Pokud integrovanou funkci nahradíme na $[a, b]$ kvadratickou funkcí (tedy parabolou, polynomem druhého stupně), která má stejné hodnoty jako f v krajních bodech intervalu $[a, b]$ a v jeho středu, a tento polynom druhého stupně zintegrujeme, dostaneme třibodový uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec

$$S(f) = \frac{b - a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f(b)\right),$$

kterému se říká **Simpsonovo pravidlo**. Setkali jsme se s ním již v příkladu 1.



Obrázek 1: Integrace funkce $f(x) = e^{-x^2}$ Newtonovými-Cotesovými kvadraturními pravidly.

Použití tří uvedených Newtonových-Cotesových kvadraturních vzorců ilustrujeme na příkladu.

Příklad 5 (Newtonova-Cotesova kvadratura). Budeme aproximovat integrál

$$I(f) = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

pomocí každého z tří jednoduchých Newtonových-Cotesových vzorců, jež jsme právě popsali. Dostaneme

$$\begin{aligned} M(f) &= (1 - 0) \exp(-0,25) \approx 0,778801, \\ T(f) &= \frac{1}{2}(\exp(0) + \exp(-1)) \approx 0,683940, \\ S(f) &= \frac{1}{6}(\exp(0) + 4 \exp(-0,25) + \exp(-1)) \approx 0,747180. \end{aligned}$$

Na obrázku 1 je zobrazen průběh integrandu a tří použitých aproximujících polynomů. Přesná hodnota integrálu zaokrouhlená na 6 platných cifer je 0,746824. Může se zdát poněkud překvapivým, že velikost chyby lichoběžníkového pravidla (0,062884) je asi dvakrát tak velká, jako je tomu u obdélníkového pravidla (0,031997); k tomu se ještě vzápětí vrátíme. Simpsonovo pravidlo s chybou 0,000356 se zdá být pozoruhodně přesné, uvážíme-li, že je použito na poměrně velkém intervalu délky 1.

2.2 Vlastnosti Newtonových-Cotesových vzorců

Pro chybu Newtonových-Cotesových vzorců se u hladkých funkcí s dostatečným počtem spojitých derivací na $[a, b]$ dají odvodit obecné odhady. Odvození se provádí tak, že se integrovaná funkce rozvine do Taylorovy řady; nebudeme jej zde však provádět a uvedeme pouze některé výsledky.

Pro obdélníkové pravidlo dostaneme (značíme zde $m = (a + b)/2$)

$$I(f) = f(m)(b - a) + \frac{f''(m)}{24}(b - a)^3 + \frac{f^{(4)}(m)}{1920}(b - a)^5 + \dots = M(f) + E(f) + F(f) + \dots,$$

kde $E(f)$ a $F(f)$ reprezentují první dva členy rozvoje chyby pro obdélníkové pravidlo.

Pro lichoběžníkové pravidlo nám podobným způsobem vyjde

$$I(f) = T(f) - 2E(f) - 4F(f) - \dots$$

a pro Simpsonovo pravidlo dostaneme

$$I(f) = S(f) - \frac{2}{3}F(f) + \dots$$

Odečtením rozvoju pro lichoběžníkové pravidlo a obdélníkové pravidlo odsud dostaneme praktický asymptotický vzorec pro odhad hlavního členu chyb u těchto dvou kvadraturních vzorců. Vyjde nám totiž (po úpravě a zanedbání členů vyšších řádů)

$$E(f) \approx \frac{T(f) - M(f)}{3}. \quad (4)$$

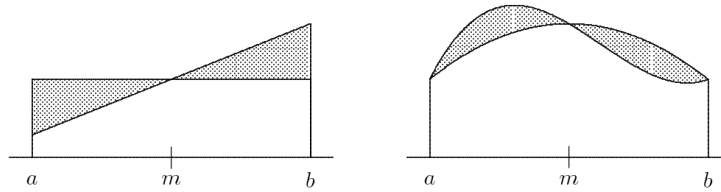
Tento vzorec ovšem platí za předpokladu, že délka intervalu integrace je malá (tak, aby platilo $(b-a)^5 \ll (b-a)^3$) a že funkce f je taková, že její čtvrtá derivace $f^{(4)}$ se chová „rozumně“. Za těchto předpokladů pak můžeme z dosavadních úvah pro tyto dva kvadraturní vzorce dospět k následujícím závěrům:

- Obdélníkové pravidlo je zhruba dvakrát tak přesné jako pravidlo lichoběžníkové (viděli jsme to již v příkladu 5), přesto, že je založeno na aproximaci funkce f polynomem menšího stupně.
- Rozdíl hodnot získaných obdélníkovým a lichoběžníkovým pravidlem se dá využít k odhadu chyby každého z těchto kvadraturních vzorců.
- Snížíme-li délku integračního intervalu na polovinu, zmenší se chyba aproximace u každého z těchto vzorců faktorem cca $1/8$.

Příklad 6 (Odhad chyby). Vraťme se k příkladu 5, kde jsme obdélníkovým a lichoběžníkovým pravidel počítali přibližné hodnoty integrálu. Dosadíme-li získané hodnoty do přibližného vzorce (4), dostaneme jako odhad hlavního členu chyby $E(f) \approx -0,031620$, což na tři desetinná místa dobře souhlasí se skutečnými velikostmi chyb uvedenými v příkladu 5.

V předchozím jsme ukázali, že n -bodový kvadraturní vzorec lze sestavit tak, aby jeho algebraická přesnost byla nejméně $n-1$. Mohli bychom tedy očekávat, že algebraická přesnost obdélníkového pravidla bude nula, lichoběžníkového pravidla jedna, Simpsonova pravidla dvě atd. To koneckonců souhlasí s tím, že tyto vzorce jsme odvodili pomocí náhrady integrované funkce polynomy stupně nula, jedna a dvě. Podíváme-li se ale na výše uvedené rozvoje chyb, vidíme, že chyba obdélníkového pravidla závisí na derivacích řádu dvě a vyšších, které jsou ale rovny nule nejen pro konstantu, ale i pro polynomy prvního stupně. Obdélníkové pravidlo tedy integruje přesně nejen konstanty, ale i lineární funkce a jeho řád je tedy o jedničku větší než nula. Podobně u Simpsonova pravidla závisí chyba na derivacích integrandu řádu čtyři a vyšších, které se anulují nejen pro kvadratické, ale i pro kubické polynomy, takže Simpsonovo pravidlo je řádu tři, nikoli pouze dva (to také vysvětluje překvapivě dobrý výsledek získaný v příkladu 5).

Obecně se dá ukázat, že pro každé liché n má n -bodový Newtonův-Cotesův vzorec algebraickou přesnost n a nikoli $n-1$. Tento jev, který plyne z rozvoju pro chybu, je také možné vykládat jako **kancelaci** (vzájemné rušení) kladných a záporných složek chyby aproximace, což ilustrujeme na obrázku 2 pro případ obdélníkového a Simpsonova pravidla. Na obrázku vidíme vlevo lineární polynom a konstantní funkci danou jeho hodnotou ve středu intervalu, vpravo je kubický polynom a kvadratická funkce, která se s ním shoduje v krajních bodech a ve středu. Integrace lineárního polynomu obdélníkovým pravidlem vede ke dvěma trojúhelníkovým oblastem, které jsou stejně velké. Vliv jednoho z těchto trojúhelníků se přesně vyruší s vlivem trojúhelníku druhého. Podobně je tomu u kubického polynomu, kde obě stínované oblasti mají rovněž stejný



Obrázek 2: Kancelace chyb u obdélníkového (vlevo) a Simpsonova (vpravo) pravidla.

obsah, takže se jejich vliv vzájemně vyruší. K takové kancelaci ale nedochází u Newtonových-Cotesových vzorců se sudým počtem uzlů. Souhrnně tedy můžeme říci, že algebraická přesnost n -bodového Newtonova-Cotesova kvadraturního vzorce je $n - 1$ při n sudém, ale je rovna n při n lichém.

Newtonovy-Cotesovy vzorce se poměrně snadno odvozují a používají, ale mají také jisté závažné nevýhody. Příčinou těchto nevýhod je především skutečnost, že aproximace spojitých funkcí polynomy vysokých stupňů, které nabývají stejných hodnot jako aproximovaná funkce na rovnoměrné síti uzlů, mohou vykazovat nežádoucí oscilace. To pak vede k tomu, že Newtonova-Cotesova kvadratura při $n \rightarrow \infty$ nepředstavuje obecně (pro každou spojitou funkci) konvergentní kvadraturu. Pro konečná n je dále známo, že každý n -bodový Newtonův-Cotesův kvadraturní vzorec má při $n \geq 11$ alespoň jednu zápornou váhu. Není u nich tedy zaručena stabilita. Skutečnost je ještě horší, neboť se dá ukázat, že při $n \rightarrow \infty$ platí $\sum_{i=1}^n |w_i| \rightarrow \infty$, což znamená, že při růstu počtu uzlů a odpovídajícím růstu řádu Newtonových-Cotesových kvadraturních vzorců se libovolně zhoršuje jejich podmíněnost a tedy stabilita výpočtu. Přítomnost velkých kladných a záporných vah také znamená, že se hodnota integrálu počítá jako součet velkých hodnot majících opačná znaménka, takže zde v konečné počítačové aritmetice může docházet k výrazné kancelaci ■ **je definováno v úvodu? zmínit, že nejde o kancelaci popsanou výše, ale o problém aritmetiky v pohyblivé řádové čárce** ■.

Z důvodů, které jsme právě uvedli, je vidět, že nemůžeme čekat, že bychom na daném intervalu dosáhli libovolně velké přesnosti tak, že bychom postupně zvětšovali počet uzlů (vzorků) a používali Newtonovy-Cotesovy vzorce stále vyšších řádů. V praxi se proto při používání Newtonových-Cotesových vzorců obvykle omezuje na základní vzorce s nevelkým počtem uzlů a pokud požadujeme vyšší přesnost, dělíme interval integrace na dílčí subintervaly (panely) a zvolený kvadraturní vzorec pak aplikujeme na každém z těchto panelů samostatně (k takovým postupům se ještě později vrátíme), takže tak vytváříme složený kvadraturní vzorec. Z tohoto hlediska je pozitivním rysem Newtonových-Cotesových kvadraturních vzorců, že jsou progresivní, takže při zvyšování počtu uzlů můžeme k jemnějšímu vzorkování využít funkční hodnoty již vypočítané dříve. Na druhé straně ale nemají Newtonovy-Cotesovy vzorce při daném n (a tedy daném počtu vzorků) největší možnou algebraickou přesnost (a tedy ani přesnost obecně), což je dáno tím, že jsme z $2n$ parametrů vzorce n parametrů (uzly) pevně zvolili předem. Popíšeme si nyní kvadraturní vzorce, které jsou z tohoto ohledu mnohem lepší.

3 Gaussovy kvadraturní vzorce

V kvadraturních vzorcích, které jsme dosud viděli, bylo všech n uzlů zadáno předem a n odpovídajících vah se pak hledalo tak, abychom dosáhli co největší algebraické přesnosti. Poněvadž jsme tedy měli pouze n volných parametrů, byl výsledný řád vzorce obecně $n - 1$. Pokud ale uvolníme také rozmístění uzlů, budeme mít $2n$ volných parametrů, takže by mělo být možné

dosáhnout algebraické přesnosti $2n - 1$.

3.1 Odvození Gaussových kvadraturních vzorců

U **Gaussovy kvadratury** se volí jak váhy, tak uzly tím způsobem, že ve výsledném kvadraturním vzorci je dosaženo maximálního možné algebraické přesnosti. Při daném počtu uzlů tedy Gaussovy vzorce poskytují maximální možnou přesnost, ale na druhé straně je podstatně obtížnější je odvodit než tomu bylo při pevně zvolených uzlech u Newtonových-Cotesových vzorců. Důvodem je skutečnost, že soustava rovnic pro uzly a váhy má sice stejný tvar jako (3) (rovnice je ovšem dvakrát tolik, máme dvojnásobek neznámých), ale díky tomu, že neznámými jsou také uzly, je tato soustava momentových rovnic tentokrát nelineární. Řešit tuto soustavu pro obecný interval $[a, b]$ je nepohodlné, a proto se základní Gaussovy vzorce odvozují pro některý konkrétní interval, typicky třeba pro $[-1, 1]$. Na obecný interval $[a, b]$ se pak snadno transformují jednoduchou lineární transformací, ke které se vrátíme později.

Při konstrukci Gaussových kvadraturních vzorců nejde jenom o to soustavu momentových rovnic vyřešit. Je zde předem nutno zodpovědět některé teoretické otázky týkající se této soustavy, totiž:

- Má daná soustava momentových rovnic řešení?
- Je toto řešení jediné? Pokud ne, jsou jednotlivá řešení pouze permutacemi řešení ostatních?
- Jsou tato řešení reálná a padnou uzly do intervalu $[-1, 1]$?
- Jaká znaménka mají získané váhy?

Odpovědi na tyto otázky jsou vesměs příznivé a ukazuje se, že pro každé n existuje právě jeden Gaussův kvadraturní vzorec a všechny jeho váhy jsou kladná čísla.

Příklad 7 (Gaussův kvadraturní vzorec). Odvodíme dvoubodový Gaussův kvadraturní vzorec na intervalu $[-1, 1]$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2),$$

kde se uzly x_1, x_2 a stejně tak váhy w_1, w_2 budou volit tak, aby se maximalizoval řád vzorce. Máme čtyři volné parametry, takže budeme požadovat, aby vzorec integroval přesně první čtyři monomy a tím pádem všechny polynomy do třetího stupně. Stejně jako dříve sestavíme čtyři momentové rovnice

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 &= \int_{-1}^1 1 dx &&= 2, \\ w_1 x_1 + w_2 x_2 &= \int_{-1}^1 x dx &&= 0, \\ w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 &= \int_{-1}^1 x^2 dx &&= \frac{2}{3}, \\ w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 &= \int_{-1}^1 x^3 dx &&= 0. \end{aligned}$$

Jedním řešením této nelineární soustavy rovnic jsou hodnoty

$$x_1 = -1/\sqrt{3}, \quad x_2 = 1/\sqrt{3}, \quad w_1 = 1, \quad w_2 = 2.$$

Existuje ještě jedno řešení, které získáme prohozením znamének u x_1 a x_2 , takže toto řešení dává identický Gaussův vzorec. Dvoubodový Gaussův kvadraturní vzorec má tedy tvar

$$G_2(f) = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$$

a jeho algebraická přesnost je tři.

Alternativní způsob, jak předem získat uzly Gaussových kvadraturních vzorců spočívá ve využití *ortogonálních polynomů*. Řekneme, že dva polynomy $p(x)$ a $q(x)$ jsou na intervalu $[a, b]$ *ortogonální*, jestliže platí

$$\int_a^b p(x)q(x) dx = 0.$$

Nechť p je polynom stupně n takový, že je na $[a, b]$ ortogonální ke všem monomům menšího stupně, neboli nechť platí

$$\int_a^b p(x)x^k dx = 0, \quad k = 0, \dots, n-1,$$

takže p je na $[a, b]$ ortogonální vzhledem ke všem polynomům stupně menšího než n . Pak se dá ukázat, že platí:

1. Všechny kořeny polynomu p jsou jednoduché (je jich tedy n různých), reálné a leží v otevřeném intervalu (a, b) .
2. Při uzlech zvolených jako kořeny polynomu p lze sestavit již popsáním způsobem kvadraturní vzorec, jehož váhy jsou řešením lineární soustavy momentových rovnic (3). Tyto váhy jsou kladné a řád takto získaného kvadraturního vzorce je $2n - 1$; je to tedy nutně jednoznačně určený n -bodový Gaussův kvadraturní vzorec.

Teorie a konstrukce ortogonálních polynomů jsou v matematice dobře zpracovány, ale téma se vymyká možnostem tohoto textu. Pro zájemce pouze uvádíme, že vhodnými ortogonálními polynomy jsou zde tzv. *Legendrovy polynomy* P_n a že se díky tomu vzniklé kvadraturní vzorce nazývají také *Gaussovy-Legendrovy kvadraturní vzorce*. Jakkoli jsou tedy Legendrovy polynomy známou věcí, zbývá zde ještě provést výpočet jejich kořenů; teprve pak můžeme stanovit váhy kvadratury ze soustavy momentových rovnic. Touto tematikou, která je také dobře zpracována teoreticky i algoritmicky, se zde však opět nemůžeme podrobněji zabývat. Zájemce odkazujeme na dostupnou literaturu, například na [2], [3], [4] nebo [1].

Příklad 7 je typický v tom smyslu, že pro všechna n jsou gaussovské uzly rozloženy symetricky kolem středu intervalu; pro lichá n je střed intervalu vždy sám také uzlem. Příklad 7 je typický také v tom, že uzly jsou většinou iracionální čísla, i když koncové body a a b jsou racionální. Dá se říci, že tento rys může činit Gaussovu kvadraturu poněkud nepohodlnou pro ruční výpočty, pokud ji totiž srovnáme s jednoduchými Newtonovými-Cotesovými vzorci. Ovšem na počítači jsou obvykle uzly a váhy Gaussových kvadraturních vzorců tabelovány předem a obsaženy v podprogramech, které se podle potřeby vyvolávají, takže uživatel ani nemusí znát jejich hodnoty natož je počítat.

3.2 Gaussovy kvadraturní vzorce pro obecný interval

Použití Gaussových kvadraturních vzorců je poněkud komplikovanější než je tomu u vzorců Newtonových-Cotesových také proto, že jejich váhy a uzly se odvozují a udávají pro konkrétní

interval, jako je například $[-1, 1]$. Tím pádem je třeba obecný interval integrace $[a, b]$ transformovat na tento standardní interval, pro nějž jsou tabelovány hodnoty uzlů a vah. Pokud tedy chceme použít (platí to obecně, nejen pro Gaussovu kvadraturu) kvadrurní vzorec, jehož parametry jsou udány pro interval $[\alpha, \beta]$,

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

k aproximaci integrálu přes interval $[a, b]$,

$$I(g) = \int_a^b g(t) dt,$$

musíme provést substituci, jež bude transformovat x v intervalu $[\alpha, \beta]$ na t v intervalu $[a, b]$. Takových substitucí existuje celá řada, ale my budeme používat jednoduchou lineární transformaci

$$t = \frac{(b-a)x + a\beta - b\alpha}{\beta - \alpha},$$

kteřá zobrazuje oba intervaly na sebe vzájemně jednoznačně a má tu přednost, že zachovává řád kvadrurního vzorce. Počítaný integrál je pak

$$\begin{aligned} I(g) &= \frac{b-a}{\beta-\alpha} \int_{\alpha}^{\beta} g\left(\frac{(b-a)x + a\beta - b\alpha}{\beta - \alpha}\right) dx \\ &\approx \frac{b-a}{\beta-\alpha} \sum_{i=1}^n w_i g\left(\frac{(b-a)x_i + a\beta - b\alpha}{\beta - \alpha}\right). \end{aligned}$$

Příklad 8 (Změna intervalu). Jako ilustraci právě popsaného postupu použijeme dvoubodový Gaussův kvadrurní vzorec G_2 z příkladu 7 odvozený pro interval $[-1, 1]$ k přibližnému výpočtu integrálu

$$I(f) = \int_0^1 e^{-t^2} dt$$

z příkladu 5. Právě popsaná lineární transformace má v tomto případě tvar

$$t = \frac{x+1}{2},$$

takže náš integrál se aproximuje jako $G_2(g) =$

$$\frac{1}{2} \left[\exp\left(-\left(\frac{(-1/\sqrt{3})+1}{2}\right)^2\right) + \exp\left(-\left(\frac{(1/\sqrt{3}*1)}{2}\right)^2\right) \right] \approx 0,746595,$$

což je o něco přesnější výsledek než ten, který jsme v příkladu 5 pro tento integrál obdrželi Simpsonovým pravidlem, přestože jsme zde použili pouze dvě funkční hodnoty místo tří.

3.3 Některé vlastnosti Gaussových kvadrurních vzorců

Shrneme zde některé důležité vlastnosti Gaussovy kvadratury, o nichž jsme se dosud zmínili:

- Gaussovy kvadrurní vzorce lze sestavit pro každé n , a to právě jedním způsobem
- Gaussovy kvadrurní vzorce mají při daném počtu uzlů maximální možný řád, a tedy optimální přesnost

- váhy Gaussových vzorců jsou pro všechna n vždy kladné, takže algoritmy výpočtu podle Gaussových vzorců jsou numericky stabilní
- navíc se dá ukázat, že Gaussovy kvadraturní vzorce tvoří konvergentní kvadraturu

Gaussovy kvadraturní vzorce mají také ale jednu vážnou nevýhodu: pro $m \neq n$ nemají vzorce G_m a G_n žádné společné uzly (s výjimkou středu intervalu, pokud jsou m i n lichá čísla). Gaussova kvadratura tedy *není progresivní*, což znamená, že pokud zvýšíme počet uzlů řekněme z n na m , musíme počítat navíc m funkčních hodnot namísto $m - n$ hodnot. Tento nedostatek se však dá obejít.

3.4 Progresivní Gaussova kvadratura

Jak jsme se právě zmínili, Gaussovy kvadraturní vzorce nejsou progresivní: pokud volíme všechny uzly a váhy volně tak, aby se při daném počtu uzlů maximalizovala algebraická přesnost, nebudou mít vzorce s různým počtem uzlů v podstatě žádné uzly společné, což znamená, že funkční hodnoty integrandu vypočítané pro jeden soubor uzlů se nedají v jiném vzorci s odlišným počtem uzlů znovu využít.

Kronrodovy kvadraturní vzorce se takové práci navíc vyhýbají. Jsou to dvojice vnořených kvadraturních vzorců: jeden člen dvojice je obvyklý n -bodový Gaussův kvadraturní vzorec G_n a druhý z nich je $(2n + 1)$ -bodový Kronrodův kvadraturní vzorec K_{2n+1} , jehož uzly se opět volí optimálně tak, aby se maximalizovala algebraická přesnost, ovšem za podmínky, že se v K_{2n+1} znovu použijí všechny uzly z G_n . Mezi uzly K_{2n+1} je tedy n uzlů pevně dáno předem, takže jako volné parametry máme zbývajících $n + 1$ uzlů a rovněž všechny váhy pro všechny uzly dohromady, kterých je $2n + 1$. Celkem je zde tedy $3n + 2$ volných parametrů a ty se určí opět tak, aby se maximalizoval řád vzorce. Algebraická přesnost vzorce K_{2n+1} je tedy rovna $3n + 1$, kdežto standardní Gaussův kvadraturní vzorec s $2n + 1$ uzly by měl algebraickou přesnost $4n + 1$. Jak vidíme, je zde jistý kompromis mezi přesností a efektivitou.

Jedním z hlavních důvodů, proč používáme dvojice vnořených kvadraturních vzorců je to, že pomocí rozdílu mezi přibližnými hodnotami integrálu získanými oběma vzorci můžeme odhadnout chybu metody. Použijeme-li Gaussův-Kronrodův pár vzorců, vezmeme jako aproximaci integrálu hodnotu K_{2n+1} a realistickým a přitom konzervativním odhadem chyby slouží veličina

$$(200|G_n - K_{2n+1}|)^{\frac{3}{2}}.$$

Tento na první pohled podivný vzorec plyne zčásti z teorie kvadratury, zčásti z praktických zkušeností (není tedy exaktní). Gaussovy-Kronrodovy kvadraturní vzorce patří k nejefektivnějším numerickým metodám výpočtu integrálu, neboť efektivně poskytují jak vysokou přesnost, tak spolehlivý odhad chyby. Obecně se dnes používá především dvojice (G_7, K_{15}) .

Dříve než opustíme toto téma se ještě zmíníme o jednom mírnějším rozšíření Gaussových kvadraturních vzorců, které se také používá a může být užitečné. Jak jsme se již zmínili, pravý Gaussův kvadraturní vzorec je vždy *otevřený*, jeho uzly tedy neobsahují krajní body intervalu integrace. Ale z jistých důvodů je někdy rozumné koncové body intervalu jako uzly ve vzorci mít. U *Gaussových-Lobattových* kvadraturních vzorců se oba koncové body předepisují jako předem pevně dané uzly, takže nám zbývá $n - 2$ uzlů a n vah jako volné parametry, které se volí tak, aby se maximalizovala algebraická přesnost. Výsledný n -bodový Gaussův-Lobattův kvadraturní vzorec je pak řádu $2n - 3$.

4 Složené kvadraturní vzorce

Až dosud jsme se zabývali *základními* kvadraturními vzorci založenými na aproximaci integrandu jedním polynomem na celém intervalu integrace. Přesnost takového vzorce lze zvýšit a jeho chybu lze odhadnout tak, že zvýšíme počet uzlů kvadratury a tím i řád aproximujícího polynomu. Jinou možností je rozdělit interval integrace na dva nebo více subintervalů a některý základní kvadraturní vzorec aplikovat na každém takovém subintervalu odděleně. Sečtením takto získaných dílčích výsledků pak dostaneme aproximaci integrálu přes celý interval.

Složený kvadraturní vzorec na daném intervalu $[a, b]$ dostaneme tak, že tento interval rozdělíme na k subintervalů (budeme jim říkat *panely*), které mají typicky stejnou délku $h = (b - a)/k$, na každém z těchto panelů aplikujeme nějaký n -bodový základní kvadraturní vzorec Q_n a jako přibližnou hodnotu celkového integrálu pak vezmeme součet takto získaných dílčích výsledků. Jestliže je použitý kvadraturní vzorec Q_n otevřený, bude takový výpočet vyžadovat kn výpočtů funkčních hodnot. Je-li naproti tomu vzorec Q_n uzavřený, pak se ve složeném vzorci některé body opakují, takže je třeba vypočítat pouze $k(n - 1) + 1$ funkčních hodnot. Uvedeme příklady složených kvadraturních vzorců založených na jednoduchých základních Newtonových-Cotesových vzorcích.

Příklad 9 (Složené kvadraturní vzorce). Rozdělíme interval $[a, b]$ na k panelů délky $h = (b - a)/k$ a položíme $x_j = a + jh, j = 0, \dots, k$. *Složené obdélníkové pravidlo* je pak

$$M_k(f) = \sum_{j=1}^k (x_j - x_{j-1}) f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) = h \sum_{j=1}^k f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right)$$

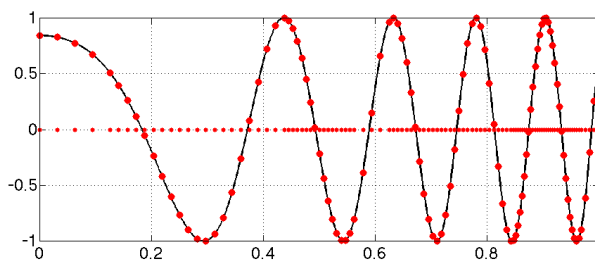
a *složené lichoběžníkové pravidlo* je

$$\begin{aligned} T_k(f) &= \sum_{j=1}^k \frac{(x_j - x_{j-1})}{2} (f(x_{j-1}) + f(x_j)) \\ &= h\left(\frac{1}{2}f(a) + f(x_1) + \dots + f(x_{k-1}) + \frac{1}{2}f(b)\right). \end{aligned}$$

Pokud je použitý základní kvadraturní vzorec stabilní, je stabilní i vzniklý složený kvadraturní vzorec. Pokud má použitý základní kvadraturní vzorec řád alespoň nula (tj. integruje přesně konstanty), dá se ukázat, že z něj postupně při $k \rightarrow \infty$ vznikající složené kvadraturní vzorce tvoří konvergentní kvadraturu. V zásadě tedy platí, že pokud zvolíme dostatečně velké k , můžeme dosáhnout libovolné přesnosti (ta je ovšem v praxi omezena přesností počítačové aritmetiky) i tehdy, je-li samotný základní kvadraturní vzorec nízkého řádu. Nemusí to být ovšem ten nejefektivnější způsob, jak požadované přesnosti dosáhnout, v praxi je zpravidla nutno zvolit vhodný kompromis mezi řádem základního vzorce n a počtem panelů k . Složené vzorce také jaksí navíc poskytují obzvláště jednoduchý způsob odhadu chyby, při němž se zpravidla využijí přibližné hodnoty integrálu získané na k panelech a na rozpůlených $2k$ panelech. Podrobnosti nejsou složité a lze je najít v běžné literatuře, například v[2], [3], [4] nebo [1].

5 Dodatky

Numerická integrace je tématem, které je v numerické matematice dobře zpracované a je k dispozici kvalitní numerický software pro přibližný výpočet integrálů, především integrálů jednorozměrných. Řadu témat jsme zde nuceni vynechat, uvádíme pouze pár stručných informací o některých z nich.



Obrázek 3: Typické rozložení uzlů u adaptivní kvadratury.

5.1 Adaptivní kvadratura

Stručně se zde zmíníme o principech současného softwaru pro výpočet jednorozměrných integrálů. Složený kvadraturní vzorec doplněný o odhad chyby poskytuje možnost sestavit jednoduchý *automatický* algoritmus pro přibližný výpočet integrálu se zadanou požadovanou přesností: postupně pokračujeme s půlením panelů tak dlouho, až celková odhadovaná chyba klesne pod požadovanou úroveň. Pro mnohé integrandy je ale vysoce neefektivní udržovat na celém $[a, b]$ stejně velké panely, protože by se tak vynaložil výpočet velkého počtu funkčních hodnot v částech intervalu, kde se integrand dobře chová a kde se dá snadno vyhovět toleranci na chybu. Používá se proto inteligentnější přístup, **adaptivní kvadratura**, při němž se interval integrace dělí na panely selektivně tak, aby to odpovídalo charakteru integrované funkce. Dělení na panely tak bude obecně nerovnoměrné.

Typická adaptivní strategie funguje následujícím způsobem. Především potřebujeme mít k dispozici vhodně vybranou dvojici základních kvadraturních vzorců, řekněme Q_{n_1} a Q_{n_2} , jejichž rozdíl nám poskytuje požadovaný odhad chyby. jako jednoduchý příklad tu může posloužit lichoběžníkové a obdélníkové pravidlo, jejichž rozdíl je zhruba trojnásobkem chyby přesnějšího z nich, jak jsme viděli v odstavci 2.1. Větší efektivity se obvykle ale dosáhne použitím vzorců vyššího řádu, jako je například Gaussův-Kronrodův pár (G_7, K_{15}) . Jinou alternativou je použít jeden základní vzorec na dvou rozdílných úrovních dělení. V tomto směru je oblíbené Simpsonovo pravidlo. Ve všech případech ovšem je k minimalizaci počtu potřebných funkčních hodnot třeba, aby použitá dvojice kvadraturních vzorců byla progresivní.

Postup adaptivního algoritmu je pak v principu prostý: nejprve oba vzorce Q_{n_1} a Q_{n_2} aplikujeme na počáteční interval integrace $[a, b]$. Pokud se takto získané přibližné hodnoty integrálu liší o více, než je předepsaná tolerance, rozdělíme interval integrace na dva nebo více panelů a uvedený postup opakujeme na každém z nich. Pokud se na některém panelu dosáhne splnění chybové tolerance, pak se tento panel už dále nedělí. Pokud na daném panelu odhad chyby přesahuje předepsanou toleranci, pokračuje se v dělení, a to tak dlouho, až je předepsaná tolerance na chybu vyhověno na všech panelech. Taková strategie vede k tomu, že vzorkovací body integrandu budou obecně rozloženy nerovnoměrně, přičemž jich bude více tam, kde se daná funkce integruje obtížně, a relativně málo tam, kde se integruje snáze. Typické rozložení vzorkovacích bodů (uzlů složeného kvadraturního vzorce), které takový algoritmus sám generuje, je na obrázku 3. Funkce zobrazená na obrázku je $f(x) = (1 - 30x^2)$, interval integrace je $[0, 1]$ a chybová tolerance je 10^{-4} . Program založený na adaptivní Simpsonově kvadratuře vygeneroval celkem 109 uzlů, které jsou znázorněny jak na grafu funkce, tak na ose x .

V Matlabu jsou k dispozici tři kvalitní funkce pro adaptivní numerický výpočet jednorozměrných integrálů. Je to jednak funkce `quad`, založená na Simpsonově pravidlu, dále funkce `quadl`, která

používá dvojice vnořených Gaussových-Lobattových vzorců, a konečně funkce `quadgk` založená na Gaussově-Kronrodově páru (G_7, K_{15}) .

I když se adaptivní kvadrurní algoritmy v praxi velmi dobře osvědčují, ve výjimečných případech mohou také selhávat: výsledná přibližná hodnota integrálu i odhad chyby mohou být výjimečně i zcela chybné. Důvodem je tu skutečnost, že integrand se vzorkuje pouze v konečném počtu bodů, takže může dojít i k tomu, že se nějaký jeho podstatný rys pomine. Může se například stát, že interval integrace je velmi dlouhý, ale veškeré „zajímavé“ chování integrandu je soustředěno do jeho velmi úzké části. V takovém případě může dojít k tomu, že adaptivní algoritmus při svém vzorkování tuto zajímavou část integrandu zcela pomine a výsledná hodnota integrálu vyjde zcela chybně. Je proto rozumné nespokojit se při výpočtu integrálů s jedním získaným výsledkem, ale porovnávat výsledky získané s různými tolerancemi. Další užitečnou informaci poskytují ty algoritmy, které na výstupu udávají také počet použitých funkčních hodnot. Je totiž (známe takový příklad z praxe) například nemožné, abychom rozumně vypočítali integrál z funkce $\sin 100x$ na intervalu $[0, 2]$ pomocí pouhých 33 vzorků (proč?).

5.2 Dvojné integrály

Až dosud jsme se zabývali pouze jednorozměrnými integrály, kde z geometrického hlediska chceme určit obsah oblasti pod nějakou křivkou na nějakém intervalu. U dvojrozměrného neboli *dvojnásobného integrálu* si přejeme vypočítat objem tělesa pod nějakou plochou na danou rovinnou oblast Ω . Pro obecnou oblast $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ takový integrál má tvar

$$\int \int_{\Omega} f(x, y) \, d\Omega.$$

V případě, že integrujeme přes obdélníkovou oblast $R = [a, b] \times [c, d]$ se dvojný integrál dá často převést na *dvojnásobný integrál*, v němž jsou vlastně do sebe vnořeny dva integrály jednorozměrné:

$$\int \int_R f(x, y) \, dR = \int_a^b \left(\int_c^d f(x, y) \, dy \right) dx.$$

Analogicky jako tomu bylo se zavedením pojmu numerická kvadratura, se numerická aproximace dvojrozměrných integrálů někdy nazývá *numerická kubatura*.

K výpočtu dvojných integrálů se dá použít řada postupů, ale jejich popis se vymyká rozsahovým možnostem tohoto textu. Poznáváme pouze, že často i dvojné integrály se dají počítat pomocí algoritmů pro integrály jednorozměrné, a to tak, že například pro výše popsany integrál přes obdélník použijeme jeden kvadrurní vzorec pro vnější integrál a druhý (třeba i identický) pro vnitřní integrál. Pokaždé, když vnější rutina bude vyvolávat integrovanou funkci, bude se tak vyvolávat rutina pro výpočet vnitřního integrálu. Další detaily k výpočtu dvojných integrálů lze najít v literatuře, viz například [1]. Také Matlab má k dispozici řadu funkcí pro výpočet takových integrálů, a to i přes obecné dvojrozměrné oblasti.

5.3 Vícerozměrné integrály

K výpočtu vícerozměrných integrálů ve více než dvou dimenzích lze sice v principu využít postupů používaných pro dvojné integrály, ale náklady na výpočet rostou s počtem dimenzí nelineárně. Jediným obecně užitečným přístupem k výpočtu složených integrálů ve více dimenzích se zdá být *metoda Monte Carlo*. Postupuje se tak, že se integrovaná funkce vyvzorkuje v n bodech, které jsou (pseudo)náhodně rozloženy v oblasti integrace, vypočítá se střední hodnota

vzorů a ta se vynásobí objemem integrační oblasti, čímž dostaneme odhad integrálu. Chyba této aproximace klesá k nule jako $1/\sqrt{n}$ při $n \rightarrow \infty$, což znamená například, že abychom získali jednu další přesnou desítkovou číslici ve výsledku, musíme počet vzorkovacích bodů zvýšit stokrát. Z tohoto důvodu není u integrace metodou Monte Carlo žádnou vzácností, jestliže se počet použitých funkčních hodnot pohybuje v řádu milionů.

Metoda Monte Carlo nemůže soutěžit s ostatními metodami u jednorozměrných a dvojrozměrných integrálů, její krása ale spočívá v tom, že rychlost konvergence u ní nezávisí na počtu dimenzí. Tím pádem například milion vzorkovacích bodů v šesti dimenzích vlastně znamená pouze 10 bodů na každou dimenzi, a to je podstatně méně, než by vyžadovala k získání požadované přesnosti jakákoli konvenční kvadratura. Existuje řada účelných způsobů vzorkování, které mají zvýšit efektivitu metody, ale zde můžeme zájemce pouze odkázat na literaturu, např. [1]. Generování pseudonáhodných čísel je užitečné i jinde než při numerické integraci a k tomuto tématu se ještě vrátíme na závěr kurzu.

Reference

- [1] Michael T. Heath. *Scientific computing: an introductory survey*. McGraw-Hill, Boston, 2 edition, 2002.
- [2] Petr Přikryl. *Numerické metody matematické analýzy*. MVŠT. SNTL, Praha, 1985.
- [3] Petr Přikryl. *Numerické metody matematické analýzy*. MVŠT. SNTL, Praha, 2., opr. a dopl. edition, 1988.
- [4] Petr Přikryl and Marek Brandner. *Numerické metody II*. FAV ZČU, Plzeň, 2001.