

Numerické metody a programování

Lekce 6

Integrace funkcí

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

totéž jako řešení $y(b)$ diferenciální rovnice $\frac{dy}{dx} = f(x)$, $y(a) = 0$

cíl numerické integrace

- co největší přesnost
- co nejmenším počet vyhodnocení funkce $f(x)$

Elementární algoritmy (rovnoměrně rozmístěné body)

- lichoběžníkové pravidlo – přesné pro polynomy prvního řádu

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx = h \left[\frac{1}{2} f_1 + \frac{1}{2} f_2 \right], \quad h = x_2 - x_1$$

- otevřený vzorec nultého řádu

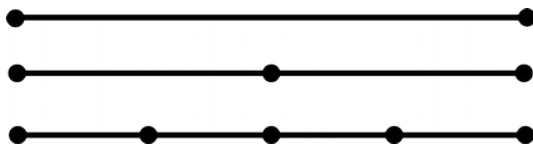
$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx = h f_2$$

- rozšířené lichoběžníkové pravidlo – intervaly $(x_1, x_2), (x_2, x_3), \dots, (x_{N-1}, x_N)$

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x) dx = h \left[\frac{1}{2} f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2} f_N \right] + O(N^{-2}) \quad (\text{uzavřený vzorec})$$

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x) dx = h \left[\frac{3}{2} f_2 + f_3 + \dots + f_{N-2} + \frac{3}{2} f_{N-1} \right] + O(N^{-2}) \quad (\text{otevřený vzorec})$$

- adaptivní volba kroku



- začínáme odhadem ze dvou krajních bodů
- zjemňujeme vzorec přidáním dalších bodů (např. půlením intervalů)
- končíme, když se hodnota integrálu již mění málo

Rombergova integrace

- k postupných zjemnění I_k rozšířeného lichoběžníkového pravidla
- polynomiální extrapolace I_k pro $h \rightarrow 0$
- integrály se singularitami/nekonečné meze: otevřený vzorec a substituce (např. $x \rightarrow 1/t$)

Gaussova integrace

- dosud byla funkce vyhodnocována ve stejně vzdálených bodech – volba vhodných váhových koeficientů
- Gaussovy metody – volba polohy integračních bodů (délky intervalů)
 - další stupeň volnosti
 - vede k dalšímu zvýšení řádu vzorce
 - přesná hodnota integrálu pro sadu vhodně zvolených ortogonálních polynomů
- vzorec

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

volba bodů x_j a koeficientů w_j :

- ortogonální polynomy $p_k(x), k = 0 \dots N$, kde $p_0(x) = 1$ a $\int_a^b p_k(x) p_{l \neq k}(x) dx = 0$
např. pro oblast integrace $-1 < x < 1$ obdržíme Legendrovy polynomy
- N bodů x_j získáme jako kořeny polynomu $p_N(x)$
- koeficienty volíme tak, aby integrace pro polynomy $p_k(x), k = 0 \dots N-1$ byla exaktní,
t.j. $\sum_{j=1}^N w_j p_0(x_j) = \int_a^b p_0(x) dx$ a $\sum_{j=1}^N w_j p_k(x_j) = \int_a^b p_k(x) p_0(x) dx = 0, k = 1 \dots N-1$
- pak je exaktní i integrace pro polynomy $p_k(x), k = N \dots 2N-1$
- s rostoucím N roste řád vzorce \rightarrow exponenciální konvergence

Integrace ve více dimenzích

- jednoduchá hranice: opakovaná 1D integrace

$$\iint dx dy f(x, y) = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f(x, y)$$

např. integrál na jednotkovém kruhu:

$$\iint dx dy f(x, y) = \int_{-1}^1 dx \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}} dy f(x, y)$$

- složitá hranice/nespojitý integrand: Monte-Carlo metody (malá přesnost)

Integrace obyčejných diferenciálních rovnic

obecný problém: integrace soustavy diferenciálních rovnic prvního řádu

$$\frac{d y_i(x)}{d x} = f_i(x, y_1, \dots, y_N), \quad i = 1, \dots, N$$

počáteční problém

- znám y_i v počátečním bodě x_s
- hledám y_i v konečném bodě x_f , nebo průběh pro tabulované hodnoty x

Metody typu Runge-Kutta

- Eulerova metoda

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) \quad (n\text{-tý krok})$$

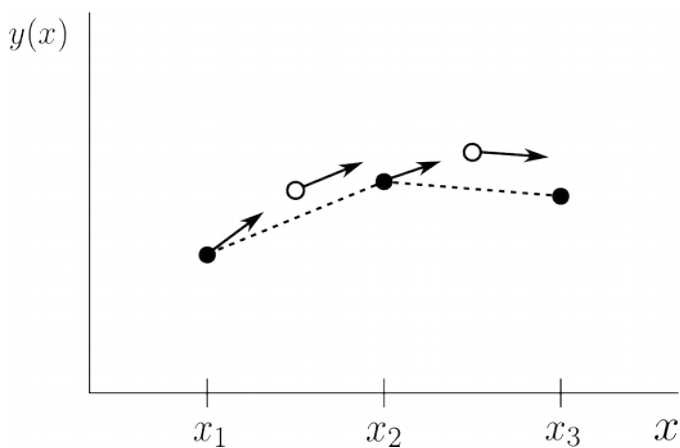
- výslednou hodnotu určuje derivace v počátku intervalu

- Runge-Kutta (druhý řád)

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + h/2, y_n + k_1/2)$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2$$



- Eulerův krok doprostřed intervalu
- derivace v tomto bodě použita ke konstrukci kroku

- Runge-Kutta (čtvrtý řád)

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + h/2, y_n + k_1/2)$$

$$k_3 = h f(x_n + h/2, y_n + k_2/2)$$

$$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3)$$

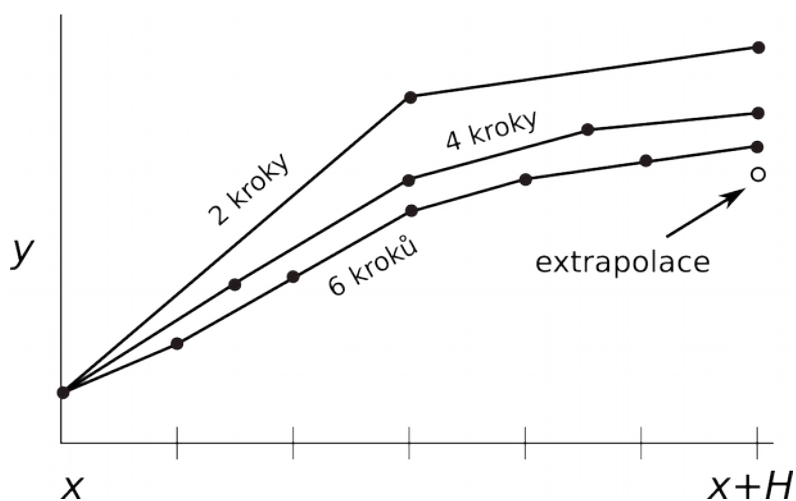
$$y_{n+1} = y_n + k_1/6 + k_2/3 + k_3/3 + k_4/6$$

- krok určují derivace ve čtyřech bodech (dva na koncích a dva uprostřed intervalu)
- nejčastěji používaná z Runge-Kuttových vzorců
- vhodná pokud není požadována velká přesnost

- adaptivní volba kroku

- zdvojení kroku ($1 \times h \rightarrow 2 \times h/2$)
- srovnání Δy s požadovanou přesností \rightarrow zkrácení/prodloužení kroku

Richardsonova extrapolace (Bulirsch-Stoer)



- krok $x \rightarrow x+H$ rozdělen na n kroků délky $h = H/n$
- volba vhodné integrační metody (chyba je funkce h^2)
- extrapolace řešení v bodě $x \rightarrow x+H$ jako funkce h do $h \rightarrow 0$: racionální/polynomiální extrapolace

Okrajové úlohy

znám $y_i(x_s)$, $i=1, \dots, k$ a $y_j(x_f)$, $j=k+1, \dots, N$, $k < N$

- metoda střelby
 - odhadneme $y_j(x_s)$
 - řešení počáteční úlohy
 - opakujeme dokud nejsou splněny okrajové podmínky

- relaxační metody
 - reprezentace diferenciálních rovnic a řešení na diskrétní síti (derivace \rightarrow difference)
 - počáteční odhad (nemusí splnit okrajové podmínky)
 - iterační řešení (relaxace) až jsou splněny ODE i okrajové podmínky