Numerická integrace (kvadratura)

1 Úvod

V jedné dimenzi jde o numerický výpočet integrálu

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

Tato úloha je ekvivalentní řešení počátečního problému pro obyčejnou diferenciální rovnici (ODE)

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}x} = f(x) \qquad \text{s podmínkou} \qquad I(a) = 0$$

kdy se hledá $I(b)$.
Metody řešení ODE obsahují adaptivní volba kroku a proto převedení na úlohu ODE je vhodné u funkcí, které mají proměnné měřítko (např. integrace spektra s úzkými spektrálními čarami)

Metody numerické integrace:

- Integrace aproximované funkce (kubický spline, Čebyševův polynom)
- Klasické kvadraturní vzorce + případně Rombergova integrace
- Gaussovy kvadratury

Integrace ve více dimenzích je samostatnou kapitolou.

Ukážeme si následující přístupy:

- rozklad na opakované integrace v jedné proměnné
- integrál pomocí metody Monte Carlo

2 Klasické kvadraturní vzorce

Uvažujeme ekvidistantní body $x_i = x_1 + (i-1)h$, kde $i = 1, \dots, N$, a $f(x_i) = f_i$.

- Základní formule – přesný integrál pro polynomy do určitého stupně.
  - uzavřené (obsahují krajní body)
  - otevřené
  - extrapolační
  - používají body $i + \frac{1}{2}$
- Složené formule

2.1 Uzavřené Newton–Cotesovy vzorce

Lichoběžníkové pravidlo

Vzorec

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}f_2\right] + O\left(h^3 f''\right)$$

je přesný pro polynomy do prvního stupně včetně.

Chybu vzorce můžeme odvodit pomocí rozkladu do Taylorovy řady

$$\begin{aligned}
\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_0^h \left[f(x_1) + f'(x_1)\tilde{x} + f''(x_1)\frac{\tilde{x}^2}{2} + \dots\right] d\tilde{x} = \\
&= h[\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}\underbrace{\left(f_1 + f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 + \dots\right)}_{f_2}] + \\
&+ \underbrace{f''(x_1)\left(\frac{h^3}{6} - \frac{h^3}{4}\right)}_{-\frac{1}{12}f''(x_1)h^3} = \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + O\left(h^3 f''\right)
\end{aligned}$$

Simpsonovo pravidlo

Je to tříbodový vzorec konstruovaný pro polynom druhého stupně, ale je přesný i pro integraci polynomu třetího stupně

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{1}{3}f_3\right] + O\left(h^5 f^{(4)}\right)$$

Simpsonovo 3/8 pravidlo

Je to čtyřbodový vzorec, přesný pro integraci polynomu třetího stupně

$$\int_{x_1}^{x_4} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{3}{8}f_1 + \frac{9}{8}f_2 + \frac{9}{8}f_3 + \frac{3}{8}f_4\right] + O\left(h^5 f^{(4)}\right)$$

2.2 Jiné typy jednoduchých vzorců

Otevřené Newton-Cotesovy formule

Otevřené formule se nedají vhodně skládat vedle sebe – nejde z nich sestavovat rozšířené formule. Například

$$\int_{x_1}^{x_6} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{55}{24}f_2 + \frac{5}{24}f_3 + \frac{5}{24}f_4 + \frac{55}{24}f_5\right] + O\left(h^5 f^{(4)}\right) \quad .$$

Extrapolační formule

Extrapolační formule se někdy hodí na okrajích. Počítají integrál s pomocí bodů ležících mimo interval.
Jako příklad uvedeme

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x &= hf_2 + O\left(h^2 f'\right)\\ \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x &= h\left[\frac{3}{2}f_2 - \frac{1}{2}f_3\right] + O\left(h^3 f''\right) \quad .\end{aligned}$$

Integrace s polovičními body

Příkladem (často užívaným) je **obdélníkové pravidlo**. Dá se dobře skládat a složený vzorec se používá při nemožnosti výpočtu funkce v některém z okrajových bodů.

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = hf_{\frac{3}{2}} + O\left(f'' h^3\right) \quad .$$

2.3 Složené vzorce

K výpočtu integrálu přes zadaný interval není vhodné při rovnoměrné síti použít vzorec jeden mnohabodový vzorec, přesný pro polynomy až do vysokého stupně. Lepší je rozdělit interval do mnoha krátkých podintervalů a v $\forall$ použít vzorec relativně nízkého řádu.
Součtu těchto integrálů se říká **složený vzorec**.

Složené lichoběžníkové pravidlo

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[\frac{1}{2}f_1 + f_2 + f_3 + \ldots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N\right] + O\left(\frac{(b-a)^3 f''}{N^2}\right)$$

Složené Simpsonovo pravidlo

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = &\quad h \quad \left[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{2}{3}f_3 + \frac{4}{3}f_4 + \ldots + + \frac{2}{3}f_{N-2} + \frac{4}{3}f_{N-1} + \frac{1}{3}f_N\right] \\ &+ \quad O\ \left(\frac{1}{N^4}\right)\end{aligned}$$

Ve střídání koeficientů není žádné magie, je to spíše nevýhodou. Rozšířené Simpsonovo pravidlo ale lépe aproximuje okraje než lichoběžníkové pravidlo. Vzorec 4. řádu přesnosti k konstantními koeficienty uprostřed intervalu lze získat následovně.

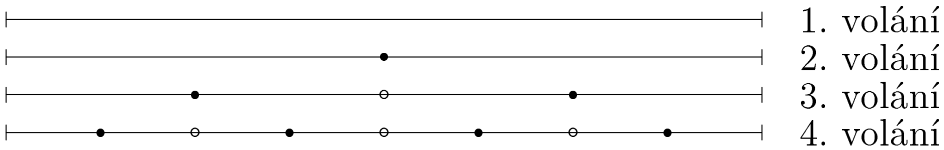
Alternativa $\left[\frac{1}{2}\right.$ Simpsonova $+\ \frac{1}{2}\big($začátek $\frac{3}{8}$ Simpsonova $+$ Simpsonovo$\big)\left.\right]$

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = &\quad h \quad \left[\frac{17}{48}f_1 + \frac{59}{48}f_2 + \frac{43}{48}f_3 + \frac{49}{48}f_4 + f_5 + \ldots + \right. \\ &+ \quad \left.\frac{49}{48}f_{N-3}\frac{43}{48}f_{N-2} + \frac{59}{48}f_{N-1} + \frac{17}{48}f_N\right] + O\ \left(\frac{1}{N^4}\right)\end{aligned}$$

Složené odbélníkové pravidlo

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = h\ \left(f_{3/2} + f_{5/2} + \ldots + f_{N-1/2}\right) + O(h^2)$$

2.4 Praktická implementace složeného lichoběžníkového pravidla



Podintervaly při jednotlivých voláních lichoběžníkového pravidla

Postup přidávání bodů - hodnoty proměnných `NV`, `NS`, `N` a `ND`:

volání `NV`	počet subintervalů `NS`	počet bodů `N`	počet přidaných bodů `ND`
1	1	2	0
2	2	3	1
3	4	5	2
4	8	9	4

Pro začátek integrace `NV` $= 1$, je algoritmus

```
Int := (b - a) / 2 * (f(a) + f(b));
ND := 1;
```

Pro volání `NV` $= k > 1$ je algoritmus

```
HD := (b - a) / ND;
SUM := 0; x := a + 0.5 * HD;
for j := 1 to ND do
   begin
      SUM := SUM + f(x);
      x := x + HD
   end;
Int := 0.5 * (Int + (b - a) * SUM / ND);
ND := 2 * ND;
```

Postupné zpřesňování při jednotlivých voláních odpovídá půlení podintervalů. Přitom se využije předchozích bodů.

Odhad chyby získáme porovnáním výsledků pro h a $2h$.

$$\begin{aligned} I_h &= I + a\,h^2 + b\,h^4 + O(h^6) \\ I_{2h} &= I + 4\,a\,h^2 + 16\,b\,h^4 + O(h^6)\ , \end{aligned}$$

kde konstanty a, b sice neznáme, ale jsou shodné v obou vztazích.
Chybu výpočtu s krokem h lze tedy odhadnout

$$\varepsilon\,(I_h) \simeq a\,h^2 \simeq \frac{I_{2h} - I_h}{3}$$

Odhad chyby pro rozšířené lichoběžníkové pravidlo.

Chyba je funkcí jen sudých mocnin $1/N$. Chyba je dána okrajem

$$\begin{aligned} \int\limits_{x_1}^{x_N} = \;& h\ \left[\frac{1}{2}f_1 + f_2 + f_3 + \ldots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N\right] - \frac{B_2 h^2}{2!}\left(f_N' - f_1'\right) - \ldots - \\ & - \ \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left(f_N^{(2k-1)} - f_1^{(2k-1)}\right) - \ldots \end{aligned}$$

V předchozím vztahu jsou B_k **Bernoulliova čísla**, pro která platí $B_0 = 1$, $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, $B_6 = 1/42$, $B_8 = -1/30$, $B_{10} = 5/66$ a $B_{12} = -691/2730$. Rozvoj nemusí konvergovat, jde o asymptotický rozvoj. Chyby rozvoje můžeme odhadnout shora dvojnásobkem absolutní hodnoty nejnižšího zanedbaného členu.

Zpřesnění výsledku

$$I\ = \frac{4}{3}I_h - \frac{1}{3}I_{2h} + O(h^4)$$

Výsledek je zpřesněn ze dvou následujících výsledků integrační procedury. Tento výsledek je identický se složeným Simpsonovým pravidlem.

3 Rombergova integrace

Výsledek numerické integrace lze chápat jako funkci veličiny h^2. Správná hodnota integrálu je vlastně hodnota funkce pro $h = 0$. Tu ovšem nemůžeme spočítat přímo. Můžeme ji ovšem získat přibližně pomocí extrapolace výsledků spočítaných pro různá h^2.

Provedeme polynomiální extrapolaci na $h^2 = 0$. Složené lichoběžníkové pravidlo mělo přesnost 2.řádu, při použití 2 výsledků jsem získal přesnost 4. řádu, ze 3 výsledků přesnost 6. řádu atd. Ze 7 výsledků lze získat přesnost 14. řádu, tedy velmi vysoký stupeň přesnosti. Větší počet bodů není vhodný použít vzhledem k vlastnostem polynomiální extrapolace (interpolace).

Rombergova metoda často podstatně sníží počet bodů, ve kterých musíme počítat funkci při zadané přesnosti integrace.

4 Integrály se singularitami

1. Na okraji má $f(x)$ konečnou limitu, ale nelze tam $f(x)$ přímo počítat ($\frac{\sin x}{x}$ v bodě $x = 0$).
2. Integrál má okraj v bodech $+\infty$ nebo $-\infty$.
3. Integrabilní singularita na okraji.
4. Integrabilní singularita ve známém bodě uprostřed.
5. Integrabilní singularita v neznámém bodě uprostřed. Řešíme vždy jako obyčejnou diferenciální rovnici (ODE).

<u>*Pozn.*</u> Neexistující nebo nekonečný integrál neřešíme, protože je to nekorektní úloha.

1. případ - funkci nelze počítat na okraji

Použijeme **složené obdélníkové pravidlo**

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x_1}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x = \quad & h \quad \left[f_{\frac{3}{2}} + f_{\frac{5}{2}} + \ldots + f_{n-\frac{1}{2}}\right] + \\
+ \quad & \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left(1 - 2^{-2k+1}\right)\left(f_N^{(2k-1)} - f_1^{(2k-1)}\right) + \ldots
\end{aligned}
$$

Při půlení podintervalů nelze využít předchozí body. Proto užijeme $h/3$, pak je implementace obdobná jako u lichoběžníkového pravidla. I zde můžeme použít Rombergovu metodu, která provádí extrapolaci integrálu na $h^2 = 0$.

Integrál s nekonečnými mezemi

Integrál transformujeme na integrál s konečnými mezemi a pro ten užijeme složené obdélníkové pravidlo.

Například po substituci $t = 1/x$ dostaneme

$$\int\limits_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int\limits_{\frac{1}{b}}^{\frac{1}{a}} \frac{1}{t^2}\, f\left(\frac{1}{t}\right)\,\mathrm{d}t,$$

Tuto substituci lze použít pokud interval integrace neobsahuje 0, jinak integrál rozdělíme na více integrálů.

Často integrály rozdělíme $\int_a^{+\infty} = \int_a^d + \int_d^{+\infty}$ tak, aby od bodu d integrovaná funkce v absolutní hodnotě klesala.

Integrál s integrabilní singularitou

Transformace záleží na charakteru funkce. Pokud $f(x)_{x\to a} \sim (x-a)^{-\gamma}$, kde $0 \le \gamma < 1$, provádíme transformaci $t = (x-a)^{1-\gamma}$. Potom platí

$$\int\limits_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{1-\gamma}\int\limits_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}}\, f\left(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a\right)\,\mathrm{d}t$$

5 Gaussovy kvadratury

Chceme spočítat integrál s minimálním počtem vyčíslení funkce $f(x)$. Volíme optimální polohu bodů x_i a váhy jednotlivých bodů w_i. Gaussova metoda s použitím N bodů dává přesný výsledek pro $\forall$ polynomy řádu $2N-1$, čili dvojnásobek řádu (přesnosti) integrace s ekvidistantním dělením. Řád metody se tak zvýší z N na $2N$. Polohy a váhy bodů jsou známy pro i pro integrace s některými vahami $W(x)$.
Jde o integrál

$$\int_a^b W(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^N W_i f(x_i) \quad ,$$

kde funkce $f(x)$ by měla být hladká, relativně málo proměnná.

Z Hermiteovy interpolace vyplývá, že body x_i musí být vybrány tak, aby polynom

$$\omega_N(x) = \prod_{i=1}^N (x - x_i)$$

byl ortogonální ke $\forall$ polynomům stupně nejvýše $N-1$ ve skalárním součinu daném integrálem s příslušnou vahou. Body x_i jsou tedy kořeny příslušného ortogonálního polynomu řádu N.

Často se používají tyto polynomy:

(a,b)	$W(x)$	Druh polynomů	Rekurenční vztah
$(-1,1)$	1	Legendrovy	$P_{i+1} = \frac{2i+1}{i+1} x P_i - \frac{i}{i+1} P_{i-1}$
$(-1,1)$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	Čebyševovy	$T_{i+1} = 2xT_i - T_{i-1}$
$(0,+\infty)$	$x^c e^{-x}$	Laguerrovy ($c = 0, 1, \ldots$)	$L^c_{i+1} = \frac{2i+c+1-x}{i+1} L^c_i - \frac{i+c}{i+1} L^c_{i-1}$
$(-\infty,+\infty)$	e^{-x^2}	Hermiteovy	$H_{i+1} = 2xH_i - 2iH_{i-1}$

Mluvíme pak o Gauss-Legendreově, Gauss-Čebyševově . . . integraci. Tabulky vah a x_i najdeme v literatuře, například: Abramowitz, M. A., Stegun, I. A., Handbook of Mathematical Functions. Příslušné procedury najdeme v numerických knihovnách.

6 Vícedimenzionální integrály

1. Počet bodů, kde počítáme funkci roste v N dimenzích s N-tou mocninou. Pokud tedy máme v jedné dimenzi 30 bodů, ve třech dimenzích již počítáme funkci v $30^3 = 27000$ bodech.

2. Hranice je $(N-1)$ dimenzionální nadplocha. Přechod k jednodimenzionálním (1D) integrálům může být obtížný. Pro hledání mezí je třeba řešit nelineární rovnice.

Metody výpočtu vícedimenzionálních integrálů jsou

1. **Snížení dimenze pomocí symetrie**, např. u integrace sféricky symetrické funkce přes kouli.

2. **Posloupnost opakovaných jednodimenzionálních integrací**
   Oblast, přes kterou integrujeme, musí mít jednoduchou hranici a funkce musí být hladká. Metodě dáme přednost, pokud požadujeme vysokou přesnost.

   Pokud víme, kde má funkce v dané oblasti ostrá maxima, je potřeba oblast rozdělit. Maxima musíme najít, jinak je výpočet integrálu beznadějný.

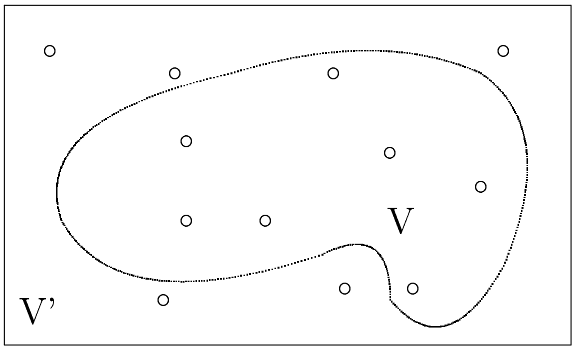
3. **Metoda Monte Carlo** Používá se, pokud má oblast složitou hranici a požadovaná přesnost integrálu není veliká. Integrand může oscilovat a mít nespojitosti, ale ne úzká maxima.

6.1 Integrace metodou Monte Carlo

Pokud funkci f vypočteme v N náhodných bodech v integrační oblasti , pak

$$\int f(\vec{x})\,\mathrm{d}V \approx V\bar{f} \pm V\sqrt{\frac{\bar{f^2} - \bar{f}^2}{N}}$$

kde V je objem integrační oblasti a $\bar{f}$ označuje aritmetický průměr funkčních hodnot. Přesnost integrálu metodou Monte Carlo je tedy $\sim N^{-1/2}$.



Integrace metodou Monte Carlo

Při výpočtu integrálu metodou Monte Carlo uzavřeme integrační oblast V do co nejmenší oblasti se známým objemem V', ve které lze snadno generovat náhodné body. Zavedeme funkci

$$\tilde{f}(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \vec{x} \notin V \\ f(\vec{x}) & \vec{x} \in V \end{cases}$$

definovanou na oblasti V'.
Vygenerujeme N náhodných bodů ve V' a integrál vypočteme ze vzorce

$$I \simeq \frac{V'}{N} \sum_{i=1}^{N} \tilde{f}(\vec{x}_i)$$