2.5. NUMERICKÁ INTEGRACE

Hlavní myšlenka numerického výpočtu určitého integrálu $\int_a^b f(x)\,dx$ spojité funkce $f(x)$ v intervalu $\langle a, b\rangle$ - kde předpokládáme, že meze a, b jsou konečná reálná čísla - spočívá ve vyjádření integrálu jako lineární kombinace funkčních hodnot funkce $f(x)$ v některých bodech x_j intervalu $\langle a, b\rangle$ podle vztahu

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{n} H_j\, f(x_j) + e\ , \tag{2.83}$$

kde n je počet členů uvažovaných v sumaci (dosud blíže neurčený), H_j jsou součinitele lineárních kombinací (rovněž dosud blíže neurčené), x_j jsou dosud blíže neurčené body z intervalu $\langle a, b\rangle$ a e je chyba, které se dopustíme, nahradíme-li $\int_a^b f(x)\,dx$ sumací $\sum_{j=1}^{n} H_j\, f(x_j)$.

Dosud blíže neurčené veličiny n, H_j a x_j pro $j = 1, .., n$ jsou určovány z požadavku, aby numerická integrace (2.83) byla přesná pro všechny polynomy $f(x)$ stupně nejvýše rovného m (tj. aby pro všechny polynomy stupně nejvýše rovného zadanému m platil vztah (2.83) a dále, aby v tomto vztahu bylo $e = 0$).

Při výuce numerické matematiky se posluchači seznámili se základními metodami numerické integrace funkce jedné proměnné jako jsou lichoběžníkové nebo Simpsonovo pravidlo - podrobněji např. [20], [21]. U těchto dvou metod uvedeme pouze algoritmy výpočtu určitého integrálu $\int_a^b f(x)\,dx$.

2.5.1. Lichoběžníkové a Simpsonovo pravidlo

Zvolíme-li na intervalu $\langle a, b\rangle$ posloupnost $m + 1$ uzlů $x_0 \equiv a, x_1, .., x_m \equiv b$, které tento interval rozdělují na m stejně velkých subintervalů $\langle x_i, x_{i+1}\rangle$ tj. platí

$$x_i = x_0 + i\,h \qquad \text{kde} \qquad h = \frac{1}{m}(b - a) \tag{2.84}$$

pak algoritmus výpočtu určitého integrálu $\int_a^b f(x)\,dx$

a) lichoběžníkovým pravidlem má tvar

$$\int_a^b f(x)\,dx \doteq \sum_{i=1}^{m} I_i = \sum_{i=1}^{m} \frac{h}{2}\left[f(x_{i-1}) + f(x_i)\right] = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)\right]; \tag{2.85}$$

b) Simpsonovým pravidlem má tvar

$$\int_a^b f(x)\,dx \doteq \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + \cdots + 2f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m)\right]. \tag{2.86}$$

Poznamenejme, že pro použití Simpsonova pravidla je nutné, aby číslo m bylo sudé. Pokud je funkce $f(x)$ nejvýše lineární (kvadratickou) funkcí v proměnné x na $\langle a, b\rangle$, tak je při použití lichoběžníkového (Simpsonova) pravidla integrál $\int_a^b f(x)\,dx$ vypočten přesně.

2.5.2. Gaussovy kvadraturní formule

Pro odvození Gaussovy kvadraturní formule vyjdeme z požadavku, aby vztah (2.83) byl splněn přesně pro polynomy stupně nejvýše $2m-1$ (tj. pro polynomy s $2m$ libovolnými reálnými koeficienty). Tedy pro splnění požadavku přesné integrace polynomů stupně $2m-1$ je ve vztahu (2.83) $e = 0$.

Označíme-li $f(x) = x^k$ pro $k = 0, \ldots, 2m-1$ a dále $y_k = \int_a^b x^k \, dx = (b^{k+1} - a^{k+1})/(k+1)$, pak získáme ze vztahu (2.83) soustavu $2m$ nelineárních rovnic

$$y_k = \sum_{j=1}^{n} H_j x_j^k \qquad \text{pro } k = 0, \ldots, 2m-1 \tag{2.87}$$

která obsahuje $2n$ neznámých $H_1, \ldots, H_n, x_1, \ldots, x_n$. Aby bylo možno tuto soustavu jednoznačně vyřešit musí být $n = m$. Poznamenejme jen, že tato podmínka je nutná (vzhledem k lineární nezávislosti rovnic v soustavě (2.87) pokud platí $x_i \neq x_j$ pro $i = j$ a $i, j = 1, \ldots, m$), nikoliv postačující - podrobněji např. [21] . Pokud lze soustavu (2.87) nelineárních rovnic řešit a je-li řešení reálné, pak získáváme přímo koeficienty $H_1, \ldots, H_n$ a uzly $x_1, \ldots, x_n$ Gaussovy kvadraturní formule.

Zjednodušíme-li poněkud zadání úlohy numerické integrace (2.83) a to tak, že hledáme určitý integrál funkce $F(\xi)$ na intervalu $\xi \in \langle -1, 1 \rangle$ ve tvaru

$$\int_{-1}^{1} F(\xi)\, d\xi \doteq \sum_{j=1}^{n} w_j F(\xi_j) + E \tag{2.88}$$

při zachování požadavku přesné integrace všech polynomů stupně nejvýše $2n-1$ lze určit koeficienty w_j (tzv. váhové koeficienty příslušné jednotlivým uzlům ξ_j Gaussovy formule) a souřadnice ξ_j. Výsledky jsou uvedeny v tab.2.2.

n	j	ξ_j	w_j
2	1	- 0,577 350 27	1,0
	2	0,577 350 27	1,0
3	1	- 0,774 596 67	0,555 555 56
	2	0,0	0,888 888 89
	3	0,774 596 67	0,555 555 56
4	1	- 0,861 136 31	0,652 145 15
	2	- 0,339 981 04	0,347 854 85
	3	0,339 981 04	0,347 854 85
	4	0,861 136 31	0,652 145 15
8	1	- 0,960 289 86	0,101 228 54
	2	- 0,796 666 48	0,222 381 03
	3	- 0,525 532 41	0,313 706 65
	4	- 0,183 434 64	0,362 683 78
	5	0,183 434 64	0,362 683 78
	6	0,525 532 41	0,313 706 65
	7	0,796 666 48	0,222 381 03
	8	0,960,289 86	0,101 228 54

Tab.2.2.

Poznamenejme, že zjednodušení vztahu (2.83) na (2.88) v žádném případě nesnižuje obecnost výsledků uvedených v tab.2.2., protože lze vždy provést transformaci integrálu

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} F(\xi)\,d\xi\,, \tag{2.89}$$

kde $x = [(b-a)\,\xi + (a+b)]/2$.

2.5.3. Funkce dvou proměnných

Lichoběžníkové a Simpsonovo pravidlo případně i Gaussovy formule numerické integrace mohou být poměrně jednoduše zobecněny pro případ integrace funkce dvou a více proměnných. V tomto odstavci uvedeme zobecnění Gaussových formulí pro případ funkce dvou proměnných.

Při výpočtu dvojného integrálu $\int_{x_d}^{x_h}\int_{y_d}^{y_h} f(x,y)\,dx\,dy$ spojité funkce $f(x,y)$ v oblasti $x \in \langle x_d, x_h\rangle$, $y \in \langle y_d, y_h\rangle$ pomocí Gaussových formulí nejprve provedeme transformaci integrálu

$$\int_{x_d}^{x_h}\int_{y_d}^{y_h} f(x,y)\,dx\,dy = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} F(\xi,\eta)\,d\xi\,d\eta\,, \tag{2.90}$$

kde $x = [(x_h - x_d)\,\xi + (x_h + x_d)]/2$ a $y = [(y_h - y_d)\,\eta + (y_h + y_d)]/2$.
Další postup numerické integrace vyplývá z (2.88) a z následujících vztahů

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} F(\xi,\eta)\,d\xi\,d\eta \doteq \int_{-1}^{1}\Big[\sum_{j=1}^{n} w_j\,F(\xi_j,\eta)\Big]d\eta \doteq$$
$$\doteq \sum_{j=1}^{n} w_j \int_{-1}^{1} F(\xi_j,\eta)\,d\eta \doteq \sum_{j=1}^{n} w_j\Big[\sum_{i=1}^{n} w_i\,F(\xi_j,\eta_i)\Big] = \tag{2.91}$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_i\,w_j\,F(\xi_j,\eta_i)\,,$$

kde w_i, w_j jsou váhové koeficienty Gaussovy integrační formule pro dané n příslušné uzlům ξ_i, η_j. Souřadnice ξ_i, η_j uzlů a jim příslušné váhové koeficienty w_i, w_j jsou uvedeny v tab.2.2.

2.5.4. Zhodnocení jednotlivých metod

Srovnáme-li uvedené metody z hlediska přesnosti v závislosti na počtu uzlů lze konstatovat, že

a) Simpsonovo pravidlo s m uzly dává v průměru stejnou přesnost jako lichoběžníkové pravidlo s $2m$ uzly;

b) Gaussova formule s m uzly má průměrně stejnou přesnost jako Simpsonovo pravidlo s $2m$ uzly.

Pokud srovnáme tyto metody z hlediska počtu nutných operací při zachování stejného stupně přesnosti při použití jednotlivých metod platí :

a) počet operací potřebných k výpočtu integrálu podle Simpsonova pravidla je přibližně dvakrát menší než při užití lichoběžníkového pravidla;

b) počet operací nutných k výpočtu integrálu podle některé Gaussovy formule je zhruba dvakrát menší než u Simpsonova pravidla.

Poznamenejme, že tato tvrzení vyplývají z nutného počtu uzlů pro jednotlivé formule při zachování stejné přesnosti.

Jak vyplývá z tohoto srovnání jednotlivých metod numerické integrace, je užití Gaussových formulí nejvýhodnější. Ovšem např. pro numerické integrování výsledků experimentálních zkoušek, u nichž nelze zajistit měření v předem stanovených bodech je užití Gaussových formulí poměrně obtížné.

2.6. NĚKTERÉ NUMERICKÉ METODY PRO ŘEŠENÍ DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

Převážná většina inženýrských úloh je popsána diferenciálními rovnicemi. Obecně lze říci, že libovolný fyzikální jev, ve kterém dochází ke zkoumání změny alespoň jedné proměnné veličiny ve vztahu k veličině druhé, je popsán diferenciální rovnicí.

V tomto odstavci uvedeme některé, v současné době poměrně často používané, metody pro řešení diferenciálních rovnic (ať již obyčejných nebo parciálních). Výčet zde uvedených metod nelze v žádném případě považovat za úplný a všechna tvrzení, která budou uvedena by si měl čtenář spojit se znalostmi získanými při výuce matematiky. Všechny zde popsané metody budou vyloženy z hlediska jejich možné využitelnosti pro automatizaci výpočtu.

Dříve než popíšeme některé metody pro numerické řešení diferenciálních rovnic, uvedeme některé otázky, jejichž zkoumáním je nutno se zabývat při jejich použití :

a) Jak velkých chyb se dopouštíme v každém kroku výpočtu a jak tyto chyby ovlivňují výsledky získané danou metodou v následujících krocích [x)].

b) Stanovení počátečního odhadu řešení (což bývá problémem u těch metod, které vyžadují pro výpočet hodnoty funkce v daném bodě znalost hodnot této funkce v několika jiných bodech).

c) Rychlost metody, která zvláště u velkých [xx)] soustav diferenciálních rovnic podstatně ovlivňuje spotřebu strojového času i na velkých počítačích. Při volbě konkretní metody je proto nutno přihlížet i k jejich rychlosti.

Poznamenejme, že teorie numerického řešení diferenciálních rovnic je velmi rozsáhlá - podrobněji např. [13] , [15] , [16] , [21] , [25] .

---

x) Poznamenejme, že chybami jsou v této úvaze nazývány souhrně chyba metody a zaokrouhlovací chyby. Metody, u nichž chyby vzniklé v jednom kroku řešení nemají tendenci se zvyšovat v dalších krocích, nazýváme <u>stabilní.</u>

xx) Např. soustavu deseti obyčejných diferenciálních rovnic o deseti neznámých funkcích lze již považovat ze velkou - podrobněji viz [25] , [28] .