# 4 Numerické derivování a integrace

Břetislav Fajmon, UMAT FEKT, VUT Brno

**Téma je podrobně zpracováno ve skriptech [1], kapitola 7, strany 85-94.**

**Jedná se o úlohu výpočtu (první či druhé) derivace či o výpočet určitého integrálu jinými metodami, než klasickým analytickým stylem. K VÝPOČTU DERIVACE ČI INTEGRACE POTŘEBUJEME ZNÁT POUZE FUNKČNÍ HODNOTU DERIVOVANÉ ČI INTEGROVANÉ FUNKCE V NĚKOLIKA BODECH V OKOLÍ BODU DERIVACE ČI NA INTERVALU INTEGRACE.**

## 4.1 Numerické derivování

**Uloha: je dána funkce $f(x)$ – vypočtěte její derivaci (většinou první či druhou) v zadaném bodě $x_0$.**

**I když jsou zatím v kursu probrány jen některé metody, vzorce v této celé kapitole je možné odvodit pomocí nich.**

**Základní myšlenka: Nahradíme funkci $f$ v okolí bodu $x_0$ interpolačním polynomem, který zderivujeme. Numerická hodnota první derivace funkce $f$ v bodě $x_0 \doteq$ přesné hodnotě derivace daného interpolačního polynomu v bodě $x_0$.**

**Čím vyšší je stupeň interpolačního polynomu, tím přesnějšího výsledku dosáhneme. Celkem uspokojivý výsledek dává první derivace už pro přímku, která nahrazuje na intervalu $\langle x_i; x_i+h\rangle$ funkci $f$:**

**Sestavme interpolační polynom pro zadané body $[x_i, f(x_i)]$, $[x_i+h, f(x_i+h)]$ (v Lagrangeově tvaru):**

$$L_1(x) = f(x_i)\frac{x-(x_i+h)}{x_i-(x_i+h)} + f(x_i+h)\frac{x-x_i}{x_i+h-x_i}.$$

**Jmenovatele v tomto výrazu lze ještě zjednodušit:**

$$L_1(x) = f(x_i)\frac{x-(x_i+h)}{-h} + f(x_i+h)\frac{x-x_i}{h}.$$

**Grafem funkce $L_1(x)$ je přímka. Nyní derivací**

**funkce $L_1$ Podle proměnné $x$ dostaneme**

$$L_1'(x) = \frac{1}{h} \cdot (f(x_i + h) - f(x_i))\,,$$

**a odtud plynou vzorce**

$$f'(x_0) \doteq \frac{fx_1 - fx_0}{h}; \tag{1}$$

$$f'(x_1) \doteq \frac{fx_1 - fx_0}{h}. \tag{2}$$

**Příklad Vypočtěte derivaci funkce $f(x) = \frac{1}{x}$ pro $x_0 = 2$ a pro $h = 0{,}2$:**

**Víme, že $f' = \frac{-1}{x^2}$, tedy $f'(2) = -0{,}25$. Dejme tomu, že bychom přesnou derivaci analyticky nebyli**

**schopni zjistit nebo používali programové prostředí, které analytickou derivaci spočítat neumí. Lze nyní použít numerickou metodu a vzorec 1**

$$f'(x_i) \doteq \frac{f(2{,}2) - f(2)}{0{,}2} = -0{,}2273;$$

**nebo vzorec 2**

$$f'(x_{i+1}) \doteq \frac{f(2) - f(1{,}8)}{0{,}2} = -0{,}2778.$$

**Výsledky se liší na druhém desetinném místě, a to jsme použili ten nejjednodušší vzorec, co jsme použít mohli.**

**Odvodíme nyní ještě vzorec pro přesnější výpočet – tento vzorec vychází z náhrady funkce interpolač-**

**ním polynomem řádu $2$, tj v bodech s $x$-ovými souřadnicemi $x_i - h$, $x_i$, $x_i + h$:**

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= f(x_i - h)\frac{(x - x_i)(x - x_i - h)}{(x_i - h - x_i)(x_i - h - x_i - h)} \\
&\quad + f(x_i)\frac{(x - x_i + h)(x - x_i - h)}{(x_i - x_i + h)(x_i - x_i - h)} \\
&\quad + f(x_i + h)\frac{(x - x_i + h)(x - x_i)}{(x_i + h - x_i + h)(x_i + h - x_i)}.
\end{aligned}
$$

**Úpravou tohoto výrazu do mocnin $(x - x_i)$ dostaneme**

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= \frac{(x - x_i)^2}{2h^2}\left(f(x_i - h) - 2f(x_i) + f(x_i + h)\right) \\
&\quad + \frac{x - x_i}{2h} \cdot \left(f(x_i + h) - f(x_i - h)\right) + f(x_i).
\end{aligned}
$$

**Nyní derivujeme podle $x$ a dostaneme**

$$L_2'(x) = \frac{1}{2h^2}\left[f(x_i - h)\,(2(x - x_i) - h) - 2f(x_i)\cdot 2(x - x_i) + f(x_i - h)\,(2(x - x_i) + h)\right].$$

**A teď do vyjádření pro $L_2'(x)$ dosaďme po řadě body $x_i$, $(x_i - h)$, $(x_i + h)$ a dostaneme vztahy**

$$\begin{aligned} L_2'(x_i - h) &= \frac{1}{2h}(-3f(x_i - h) + 4f(x_i) - f(x_i + h)),\\ L_2'(x_i) &= \frac{1}{2h}(f(x_i + h) - f(x_i - h)),\\ L_2'(x_i + h) &= \frac{1}{2h}(f(x_i - h) - 4f(x_i) + 3f(x_i + h)). \end{aligned}$$

**Přeznačením $x_0 = x_i - h$, $x_1 = x_i$, $x_2 = x_i + h$ dostaneme**

**vzorce**

$$f'(x_0) \doteq \frac{1}{2h}(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)), \tag{3}$$

$$f'(x_1) \doteq \frac{1}{2h}(f(x_2) - f(x_0)), \tag{4}$$

$$f'(x_2) \doteq \frac{1}{2h}(f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)). \tag{5}$$

**Důležitý pro běžné výpočty je vzorec 4. Vzorce 3 a 5 se používají tehdy, pokud nejsme schopni vypočítat funkční hodnotu nalevo od našeho klíčového bodu, ve kterém nás derivace zajímá (vzorce pro derivaci vk onkrétním bodě totiž užívají funkční hodnoty ve třech různých bodech).**

**Příklad Vypočtěme první derivaci funkce** $f(x) = \frac{1}{x}$

**pro $x_0 = 2$ a pro $h = 0{,}2$ podle vzorce 4:**

$$f'(2) = \frac{1}{2 \cdot 0{,}2}(f(2{,}2) - f(1{,}8)) = -0{,}2525;$$

**To je lepší výsledek, přesný už na dvě desetinná místa. A to je ještě krok $h$ velmi velký vzhledem k funkčním hodnotám funkce. Pro $h = 0{,}1$ dostaneme**

$$f'(2) = \frac{1}{2 \cdot 0{,}1}(f(2{,}1) - f(1{,}9)) = -0{,}2506.$$

**Pokud $L_2'(x)$ zderivujeme ještě jednou,**

$$L_2''(x) \;=\; \frac{1}{h^2}(f(x_i - h) - 2f(x_i) + f(x_i + k)),$$

**dostaneme dosazením $x_1 = x_i$ dobrý vzorec pro přibližný výpočet druhé derivace funkce $f$ v bodě $x_1$:**

$$f''(x_1) \;\doteq\; \frac{1}{h^2}(f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)) \tag{6}$$

**Příklad Vypočtěme DRUHOU derivaci funkce $f(x) = \frac{1}{x}$ pro $x = 3$ a pro $h = 0{,}2$ podle vzorce 6:**

**Přesně analyticky je $f'' = \frac{2}{x^3}$, tedy v bodě $x = 3$ máme $f''(3) = 0{,}07407$. Kdybychom tento přesný výpočet ne-**

**měli k dispozici, tak numericky podle vzorce 6 dostaneme**

$$f''(3) \doteq \frac{1}{0{,}04}(f(3{,}2) - 2 \cdot f(3) + f(2{,}8)) = 0{,}0744,$$

**velmi dobrý odhad druhé derivace. Pro $h = 0,1$ dokonce**

$$f''(3) \doteq \frac{1}{0{,}01}(f(3{,}1) - 2f(3) + f(2{,}9)) = 0{,}074156.$$

**Vzorce numerických derivací jsou potřeba nejen při samotném výpočtu derivací, ale rovněž v dalších numerických metodách, jako například v metodě sítí = metodě konečných diferencí (network method), kdy touto úpravou převádíme DIFERENCIÁLNÍ rovnici na systém LINEÁRNÍCH ROVNIC (viz první přednáška)!!!**

## 4.2 Numerické integrování

**Protože**

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

**má zřetelný geometrický význam, lze určitý Riemannův integrál dobře určit i přibližnými (= numerickými) metodami.**

**Projdeme opět dvě metody, nejprve** **<u>složená lichoběžníková metoda</u>: interval $\langle a; b\rangle$ rozdělíme na $m$ stejně velkých podintervalů $\langle x_i; x_{i+1}\rangle$ s krokem**

$$x_{i+1} - x_i = h = \frac{b-a}{m}$$

**(dělicích bodů je $(m+1)$: $x_1$, $x_1$, . . . , $x_m$) a funkci $f$ na**

**intervalu nahradíme úsečkou spojující body** $[x_i, f(x_i)]$**,** $[x_{i+1}, f(x_{i+1})]$**. Pak obsah podgrafu funkce** $f$ **na intervalu** $\langle x_i; x_{i+1}\rangle$ **se přibližně rovná obsahu lichoběžníka určeného touto úsečkou, kolmicemi na osu** $x$**.**

**Pro tento obsah lichoběžníka platí**

$$P = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)(f(x_i) + f(x_{i+1}));$$

**sečtením obsahů těchto obdélníčků na všech** $m$ **intervalech dostaneme přibližně obsah celého podgrafu funkce** $f(x)$ **na intervalu** $\langle a; b\rangle$ **(ve vzorci je opět využito** $h = x_{i+1} - x_i$**):**

$$L_m = h \cdot \left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \cdot + f(x_{m-1}) + \frac{f(x_m)}{2}\right) \quad (7.)$$

**Opět jsme vlastně dělali to, že funkci $f(x)$ jsme na intervalu $\langle x_i; x_{i+1}\rangle$ nahradili interpolačním polynomem stupně $1$ (tedy „částí přímky“), vypočetli přesný integrál z tohoto interpolačnínomu a všechny tyto integrálky sečetli (odtud název „složená lichoběžníková metoda“ – že se složily = sečetly obsahy lichoběžníků).**

**Lze matematicky odvodit též odhad chyby = rozdíl mezi přesnou a přibližnou hodnotou tohoto integrálu u složené lichoběžníkové metody:**

$$|E_m| \;\le\; \frac{(b-a)^3}{12m^2} \cdot \mathbf{max}_{\langle a;b\rangle} |f''(x)|. \tag{8}$$

**Než se dostaneme k příkladům, tak ještě vysvětlení té druhé metody přibližné integrace: <u>Složená Simpsonova metoda</u>: jedná se jen o zobecnění předchozí složené lichoběžníkové metody o jednu mocninu interpolačního polynomu výše:**

**Interval** $\langle a; b\rangle$ **rozdělíme s krokem** $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{m}$ **na sudý počet dílků. Tj. musí platit** $m = 2n$ **– je to proto, abychom mohli rozdělit intervaly do dvojic a pro každou dvojici intervalů měli zadané body** $[x_i - h, f(x_i - h)]$, $[x_i, f(x_i)]$, $[x_i + h, f(x_i + h)]$; **těmito třemi body na daném páru intervalů proložíme interpolační polynom řádu 2 (jeho grafem je zpravidla parabola),**

tento polynom zintegrujeme na intervalu $\langle x_{i-1}; x_{i+1}\rangle$, a přes všechny páry intervalů tyto integrály sečteme (= „složíme“) a položíme přibližně rovno integrálu z funkce $f(x)$ na intervalu $\langle a; b\rangle$.

Ještě jednou pomaleji:

**Interpolační polynom pro dané tři body napíšeme, jmenovatele upravíme do konstant obsahujících krok $h$, čitatele upravíme do mocnin $(x - x_i)$; celkově vzato jej pak můžeme psát ve tvaru**

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - x_i)^2}{2h^2}\left[f(x_i - h) - 2f(x_i) + f(x_i + h)\right] + \\ &+ \frac{x - x_i}{2h}\left[f(x_i + h) - f(x_i - h)\right] + f(x_i). \end{aligned}$$

**Nyní $L_2(x)$ integrujeme na intervalu $\langle x_{i-1}; x_{i+1}\rangle$, a protože $x_{i+1} - x_i = h = x_i - x_{i-1}$, po dosazení mezí do zintegrované funkce dostaneme**

$$
\begin{aligned}
\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)\,dx \;=\; & \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{2h^2}\left[\frac{(x-x_i)^3}{3}\right]_{x=x_{i-1}}^{x=x_{i+1}} \\
& + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}\left[\frac{(x-x_i)^2}{2}\right]_{x=x_{i-1}}^{x=x_{i+1}} \\
& + f(x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})
\end{aligned}
$$

**(a také platí $x_{i+1} - x_{i-1} = 2h$), což lze upravit do vzorce**

$$
\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \doteq \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})\right).
$$

**Sečtením těchto výsledků přes všechny páry malých $m$ intervalů máme**

$$\int_a^b f(x)\,dx \doteq S_m = \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m)) \quad (9)$$

**(první a poslední koeficient je roven jedné, pak se střídají čtyřky a dvojky s tím, že druhý a předposlední koeficient musí být roven čtyřem).**

**Existuje též vzorec pro odhad chyby přesného minus přibližného výpočtu tohoto integrálu:**

$$|E_m| \ \leq \ \frac{(b-a)^5}{180m^4} \cdot \mathbf{max}_{\langle a;b\rangle} |f^{(iv)}(x)| \tag{10}$$

**($f^{(iv)}$ znamená čtvrtou derivaci funkce $f$).**

**Řešené příklady 7.1/str.92 a 7.2/str,93, 7.3/str.93 jsou tak dobré a ilustrativní, že je dobré je projít všechny a beze zbytku – viz skripta [1].**

**V rámci procvičení tohoto tématu můžete vypočíst ze skript [1], str. 95-96, příklady 7.1 a 7.2 na numerické derivování, 7.6, 7.7, 7.8 a 7.9 na integrování.**

## Literatura


[1] **Fajmon, B., Růžičková, I.: Matematika 3. Skriptum FEKT VUT v elektronické formě, Brno 2003. Počet stran 257 (identifikační číslo v informačním systému VUT: MAT103).** `http://www.rozhovor.cz/souvislosti/matematika3.pdf`.