§ Numeričko diferenciranje i integriranje

- numeričko diferenciranje
- numeričko integriranje
- trapezna formula
- Simpsonova formula

numeričko diferenciranje

- općenito, **poznate funkcije** se (u pravilu) mogu diferencirati, ali za **tablične podatke,** općenito u slučajevima kada nam analitički izraz funkcije nije poznat, potrebno je koristiti numeričko diferenciranje

- ukoliko je analitički izraz funkcije prekompleksan

- prilikom rješavanja praktičnih problema često je potrebno odrediti derivacije nekog određenog reda za funkciju zadanu tabličnim vrijednostima *(npr. Imamo podatke o pređenom putu u vremenskim intervalima, a nas zanima trenutna brzina; ili imamo podatke o brzini, a zanima nas ubrzanje, ili brzina kemijske reakcije – promjena koncentracije reaktanta, …*

numeričko diferenciranje

- niz tabličnih podataka može se diferencirati: 1) **diferenciranjem interpolacijskih formula** 2) **numeričkim metodama za diferenciranje** (različite formule za diferenciranje izvedene iz Newtonovog interpolacijskog polinoma, Taylorovog reda, …)

numeričko diferenciranje

1) diferenciranjem interpolacijskih formula

- zadanu funkciju na segmentu a, b aproksimiramo interpolirajućom funkcijom, npr. polinomom $P \quad x$

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

- tada za $x \in \quad a, b$ vrijedi

$$f'(x) \cong P'(x)$$

- postupak je isti u određivanju derivacija višeg reda

$$f'(x) \cong P'(x) = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \ldots + n a_n x^{n-1}$$
$$f''(x) \cong P''(x) = 2a_2 + 6a_3 x + \ldots + n(n-1) a_n x^{n-2}$$

numeričko diferenciranje

PRIMJER 1: Odredite vrijednost derivacije funkcije u točki *x*=3,5

x	3.40	3.50	3.60
$f(x)$	0.294118	0.285714	0.277778

- nekom od interpolacijskih metoda odredimo interpolacijski polinom

$$P_2(x) = 0.858314 - 0.2455x + 0.0234x^2$$

- deriviramo interpolacijski polinom

$$P_2'(x) = -0.2455 + 0.0468x$$

- izračunamo vrijednost prve derivacije u zadanoj točki

$$P_2'(3.5) = -0.2455 + 0.0468 \cdot 3.5 = -0.0817$$

- vrijednosti u tablici dobivene su funkcijom *f(x)=1/x* te možemo odrediti točnu vrijednost derivacije u zadanoj točki i usporediti

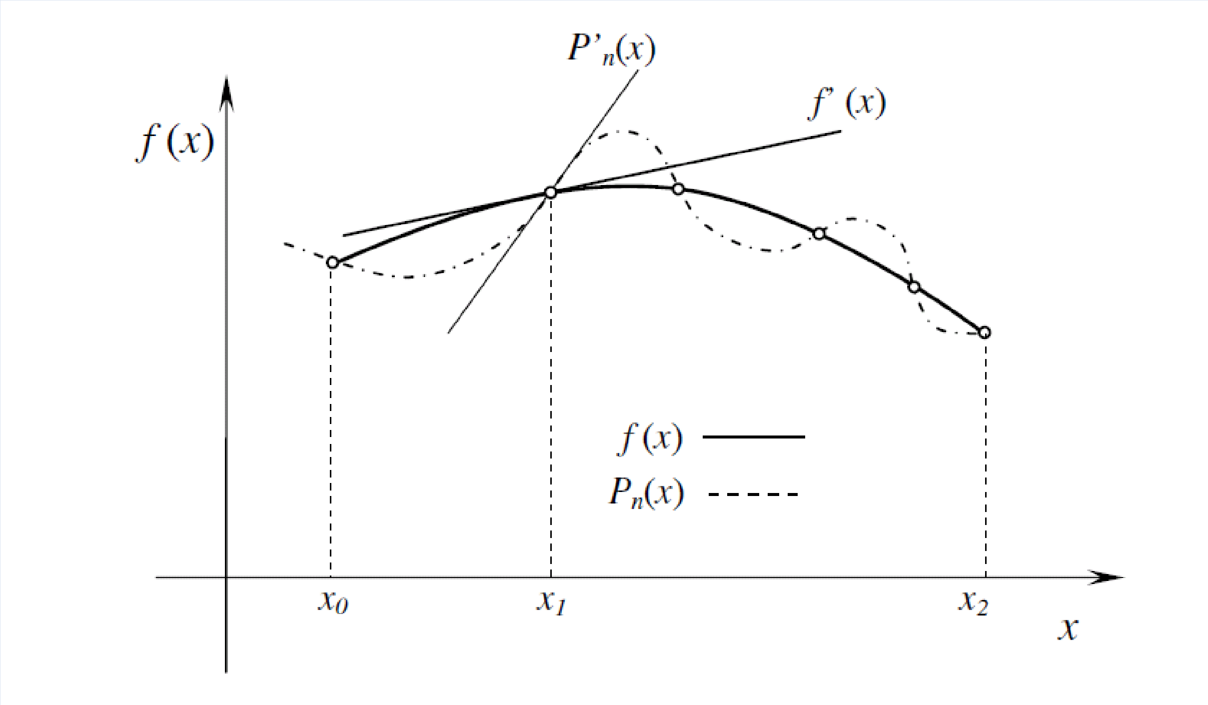
$$f'(3.5) = -\frac{1}{x^2} = -\frac{1}{3.5^2} = -0.081633\ldots$$

$$|f(3.5) - P_n(3.5) = 0.000067|$$

-**često nećemo dobiti ovako dobro slaganje!**

numeričko diferenciranje

- aproksimativno diferenciranje je **manje egzaktna** operacija od interpolacije (nema garancije za odstupanja derivacije)
- **mala odstupanja interpolacijskog polinoma** od stvarne funkcije, **ne znače nužno i mala odstupanja derivacije polinoma** od derivacije stvarne funkcije



numeričko diferenciranje

- ukoliko je poznata pogreška interpolacijske funkcije $R\ \ x$ tada je poznata i pogreška derivacije $r\ \ x$

$$R\ \ x\ \ = f\ \ x\ \ - P\ \ x$$

$$r\ \ x\ \ = R'\ \ x\ \ = f'\ \ x\ \ - P'\ \ x$$

- **pogreška derivacije** interpolacijske funkcije jednaka je **derivaciji pogreške** te interpolacijske funkcije

- isto vrijedi i za derivacije višeg reda

<u>NEDOSTACI NUMERIČKOG DIFERENCIRANJA INTEGRACIJSKOG POLINOMA:</u>

-NUMERIČKO DIFERENCIRANJE INTERPOLACIJSKOG POLINOMA MOŽE IMATI ZNAČAJNO VEĆU POGREŠKU OD SAME INTERPOLACIJE

- MOŽE BITI RAČUNSKI ZAHTJEVNO

2) numeričke metode za diferenciranje

- formule za numeričko diferenciranje mogu se izvesti iz **konačnih razlika** *(prethodno predavanje)*

$$f'(x_i) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$$

- ako se uzme približna vrijednost gornjeg izraza dobije se formula za **konačnu razliku prvog reda unaprijed** kojom možemo aproksimirati prvu derivaciju

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$$

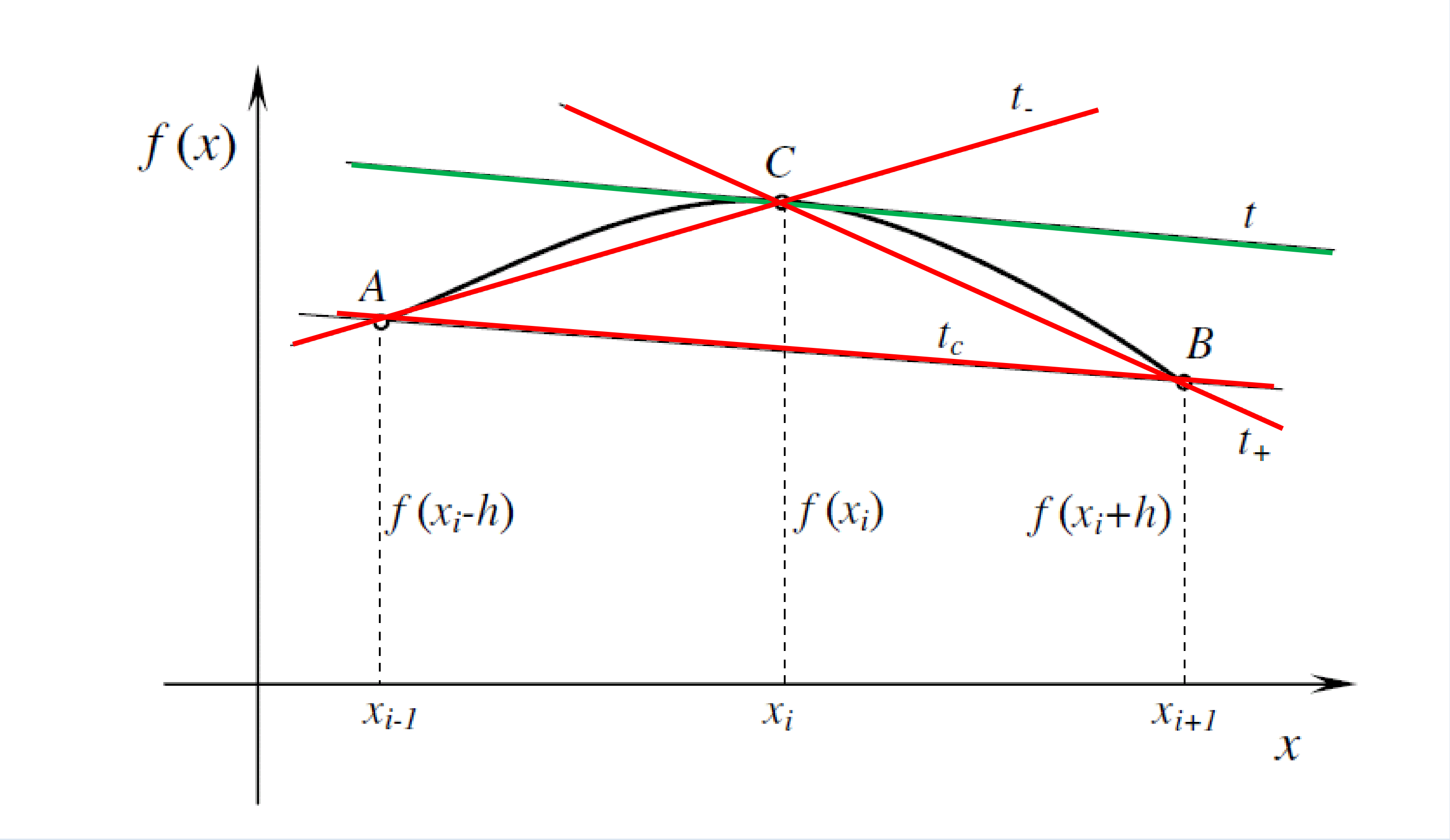
- na isti način može koristiti i **konačnu razliku prvog reda unatrag**

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h}$$

- te **središnju konačnu razliku**

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}$$

numeričko diferenciranje - grafička interpretacija



t – prva derivacija funkcije

t₊ - prva derivacija aproksimirana prvom konačnom razlikom **unaprijed**

t₋ - prva derivacija aproksimirana prvom konačnom razlikom **unatrag**

t - prva derivacija aproksimirana prvom **središnjom** konačnom razlikom

KOJA JE APROKSIMACIJA NAJBOLJA?

formule numeričko diferenciranje

- do istih izraza možemo doći iz razvoja funkcije u **Taylorov red** oko točke x_i, uzimajući $h=x+x_i$ ili $h=x-x_i$

IZVODI

- uzimanjem u obzir i viših članova Taylereovog reda može se pokazati da je greška kod metoda temeljenih na konačnim razlikama unaprijed i unatrag **greška proporcionalna s *h***, dok je kod metode temeljene na središnoj konačnoj razlici **proporcionalna s h^2**
- s obzirom da je *h* obično <1, jasno je da metoda temeljena na središnoj konačnoj razlici ima najmanju pogrešku
- postoji i niz drugih formula za numeričko diferenciranje, mnoge se izvode na sličan način kao ove predstavljene

numeričko diferenciranje

PRIMJER 2: Odredite vrijednost derivacije funkcije u točki *x*=3,5

x	3.40	3.50	3.60
$f(x)$	0.294118	0.285714	0.277778

- vrijednosti u tablici dobivene su funkcijom *f(x)=1/x*

$$f'(3.5) = -\frac{1}{x^2} = -\frac{1}{3.5^2} = -0.081633\ldots$$

konačna razlika prvog reda unaprijed

$$f'(3.5) = \frac{f(3.6) - f(3.5)}{3.6 - 3.5} = \frac{0.277778 - 0.285714}{0.1} = -0.07936$$

$$|-0.081633 - (-0.07936)| = 0.002273$$

konačna razlika prvog reda unatrag

$$f'(3.5) = \frac{f(3.5) - f(3.4)}{3.5 - 3.4} = \frac{0.285714 - 0.294118}{0.1} = -0.08404$$

$$|-0.081633 - (-0.08404)| = 0.002407$$

središnja konačna razlika prvog reda

$$f'(3.5) = \frac{f(3.6) - f(3.4)}{3.6 - 3.4} = \frac{0.277778 - 0.294118}{0.2} = -0.0817$$

$$|-0.081633 - (-0.0817)| = 0.000067$$

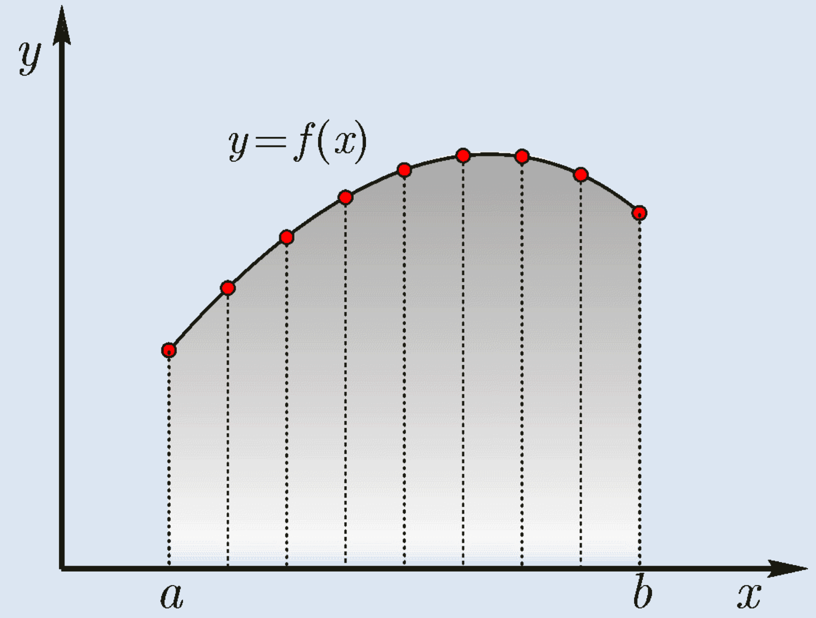
§ Numeričko integriranje

numeričko integriranje

- funkcija nam nije poznata, imamo samo skupu točaka, ili imamo funkciju čiji se integrali ne mogu eksplicitno izraziti
- prilikom rješavanja praktičnih problema, npr. potrebno je integrirati funkciju zadanu tabličnim vrijednostima *(npr. određivanje entalpije kod mikrokalorimetrijskih mjerenja; utrošenu energiju za savladavanje neke sile na putu,...)*
- integral

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

predstavlja površinu ispod krivulje



numeričko integriranje

- kao i kod numeričkog diferenciranja, jedno moguće rješenje jest napraviti **interpolaciju funkcije** nekom od spomenutih metoda *(Newtonova metoda, Lagrangeova metoda - prethodno predavanje)* te **dobiveni polinom n-tog reda integrirati.**

$$f(x) \approx P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots$$

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx = \left(a_0 x + a_1 \frac{x^2}{2} + \ldots \right)\Big|_a^b$$

numeričko integriranje

- interpolacija može biti zahtjevna (računski i vremenski)
- ukoliko imamo podatke koji se sastoje od niza **ekvidistantnih točaka** mogu se koristiti puno efikasnije metode, poput **Newton-Cotesove formule**
- tražena funkcija *f(x)* se aproksimira polinomom:

$$P_n(x) = f_0 + \binom{s}{1}\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_0 + \ldots + \binom{s}{n}\Delta^n f_0$$

$$s = \frac{x - x_0}{h} \qquad x = x_0 + sh \qquad dx = s \cdot dh$$

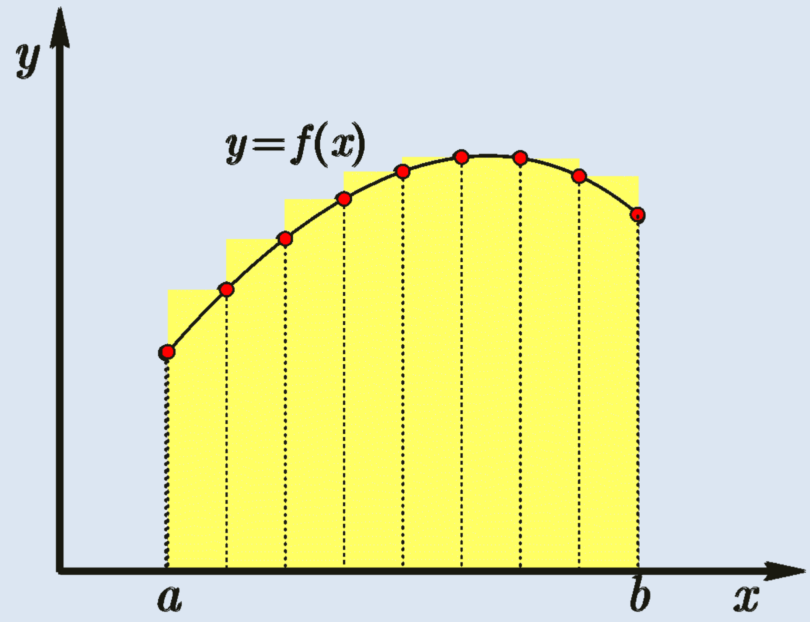
- te se dobije:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx = h\int_{s(a)}^{s(b)} P_n(s)ds$$

numeričko integriranje

- u slučaju kad je u prethodnoj formuli polinom najnižeg reda *(n=0)*, imamo **metodu pravokutnika**
- u toj metodi površinu segmenta zamijenimo sa ***s*** pravokutnika čije površine lako izračunamo

IZVOD



numeričko integriranje

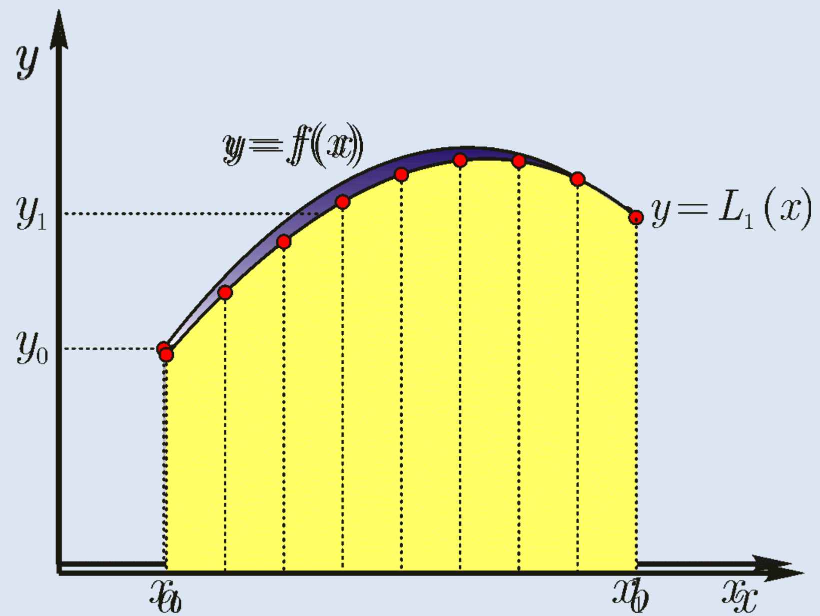
- **trapezna formula** za aproksimativni izračun određenog integrala
- u najjednostavnijem slučaju aproksimirali smo čitavu površinu jednim velikim trapezom određenog točkama *(x_0, $f(x_0)$) i (x_1, $f(x_1)$)*
- u tom slučaju, integral se može računati:

$$I = \frac{h}{2}(f_0 + f_1)$$

gdje je f_0 - $f(x_0)$, f_1- $f(x_1)$, $h = x_1 - x_0$

IZVOD

- za niz malih trapeza dobije se formula:



$$I = \frac{b-a}{2n}\left[f_0 + f_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i\right]$$

gdje je f_0 - $f(x_0)$, f_n- $f(x_1)$, $b=x_1$, $a=x_0$, *n-broj trapeza na koji smo razbili površinu*

numeričko integriranje

PRIMJER 3: Odredite vrijednost integrala funkcije u granicama od 3,1 do 3,9 koristeći trapeznu formulu uz: a) jedan b) dva c) četiri intervala

x	3.10	3.30	3.50	3.70	3.90
$f(x)$	0.32258065	0.30303030	0.28571429	0.27027027	0.25641026

a)
$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + f_1) = \frac{0.8}{2 \cdot 1}(0.32258065 + 0.25641026)$$

$$I = 0.23159636$$

b)
$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + 2f_1 + f_2)$$

$$= \frac{0.8}{2 \cdot 2}(0.32258065 + 2 \cdot 0.28571429 + 0.25641026)$$

$$I = 0.23008389$$

c)
$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + 2(f_1 + f_2 +$$

$$I = 0.22970206$$

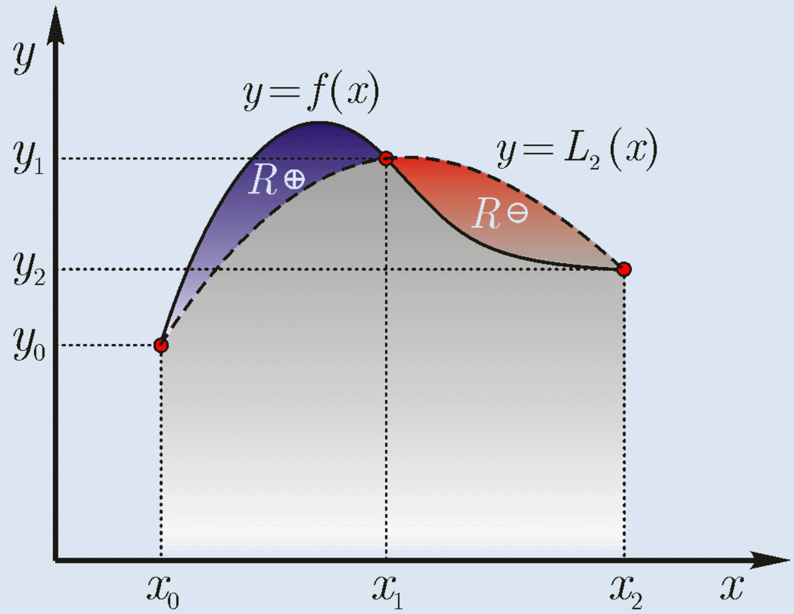
$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx = \ln(x)\Big|_{3.1}^{3.9} = \ln(\frac{3.9}{3.1}) = 0.22957444$$

numeričko integriranje

- **Simpsonova formula 1/3** za aproksimativni izračun određenog integrala
- danu funkciju zamijenimo s parabolom koja prolazi kroz 3 ekvidistantne točke, odnosno s polinomom drugog reda (n=2)
- u tom slučaju dobijemo formulu:

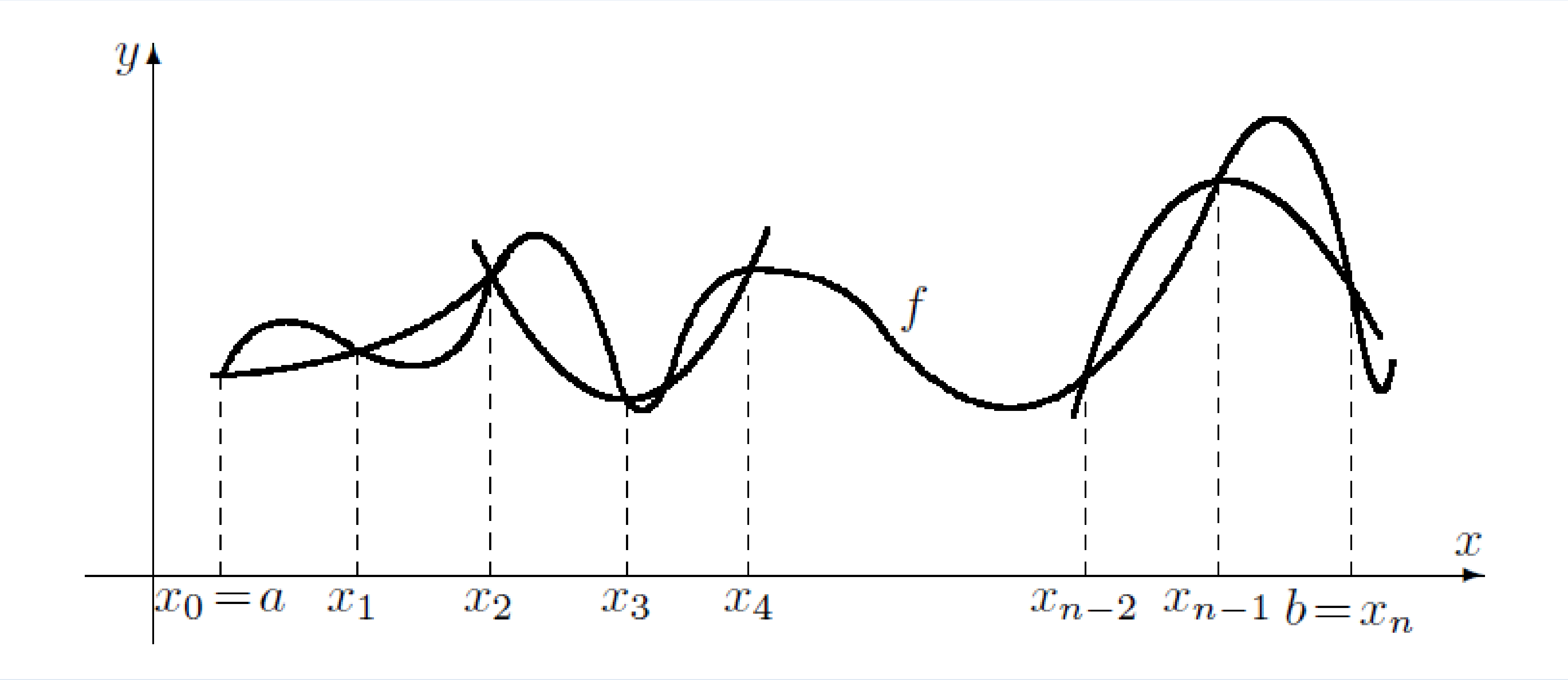
$$I = \frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

gdje je f_0 - $f(x_0)$ ili y_0 , f_1- $f(x_1)$ ili y_1, f_2- $f(x_2)$ ili y_2, $h= x_1-x_0$ ili x_2-x_1



numeričko integriranje

- čim je **interval integracije** veći, to je pogreška veća
- stoga interval nastojimo razbiti na čim više manjih intervala kako bi maksimalno smanjili pogrešku



numeričko integriranje

Simpsonova formula 1/3

- u općenitom slučaju kada funkciju zamijenimo s polinomom n-tog reda dobije se formula:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6n}\left[f_0 + f_{2n} + 4\sum_{i=0}^{n-1} f_{2i+1} + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_{2i}\right]$$
$$= \frac{h}{3}\left[f_0 + f_{2n} + 4\sum_{i=0}^{n-1} f_{2i+1} + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_{2i}\right]$$

- **Simpsonova formula 1/3** ima najmanju pogrešku od svih iznesenih metoda te se najčešće i koristi

- pogreška Simpsonova formula 1/3 metode je četvrtog reda (opada s $\mathbf{h^4}$), pogreška **trapezne formule** je drugog reda, a pogreška **pravokutne formule** prvog reda

numeričko integriranje

PRIMJER 4: Odredite vrijednost integrala funkcije u granicama od 3,1 do 3,9 pomoću Simpsonove formile 1/3 uz: a) jedan b) dva intervala

x	3.10	3.30	3.50	3.70	3.90
$f(x)$	0.32258065	0.30303030	0.28571429	0.27027027	0.25641026

a)

$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$
$$= \frac{0.4}{3}(0.32258065 + 4 \cdot 0.28571429 + 0.25641026)$$
$$I = 0.22957974$$

b)

$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4(f_1 + f_3) + 2f_2 + f_4)$$
$$= \frac{0.2}{3}(0.32258065 + 4(0.30303030 + 0.27027027)$$
$$+ 2 \cdot 0.28571429 + 0.25641026) = 0.22957478$$

$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx = \ln(x)\Big|_{3.1}^{3.9} = \ln(\frac{3.9}{3.1}) = 0.22957444$$

numeričko integriranje

PRIMJER 3: Odredite vrijednost integrala funkcije u granicama od 3,1 do 3,9 koristeći trapeznu formulu uz: a) jedan b) dva c) četiri intervala

x	3.10	3.30	3.50	3.70	3.90
$f(x)$	0.32258065	0.30303030	0.28571429	0.27027027	0.25641026

a) $$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + f_1) = \frac{0.8}{2 \cdot 1}(0.32258065 + 0.25641026)$$

$$I = 0.23159636$$

b) $$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + 2f_1 + f_2)$$

$$= \frac{0.8}{2 \cdot 2}(0.32258065 + 2 \cdot 0.28571429 + 0.25641026)$$

$$I = 0.23008389$$

c) $$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx \approx \frac{b-a}{2n}(f_0 + 2(f_1 + f_2 +$$

$$I = 0.22970206$$

$$I = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x} dx = \ln(x)\Big|_{3.1}^{3.9} = \ln(\frac{3.9}{3.1}) = 0.22957444$$