

DERIVACE FUNKCE

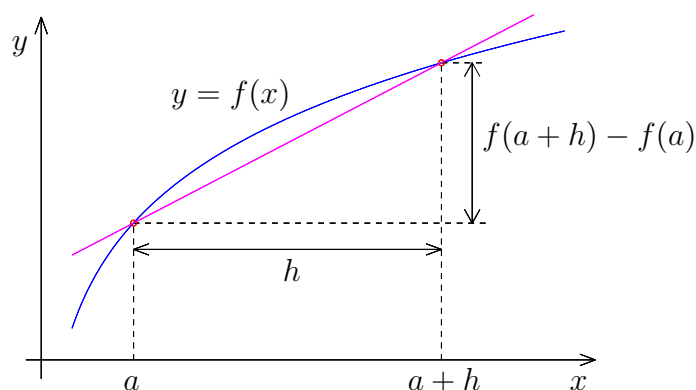
Na úvod si připomeňme definici derivace reálné funkce jedné reálné proměnné.

Definice: Existuje-li pro danou funkci $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ vlastní (tj. konečná) limita

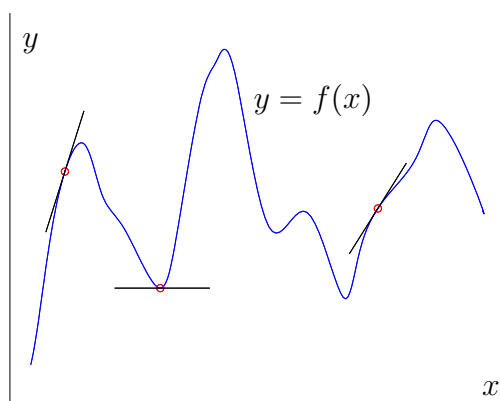
$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

říkáme, že funkce $f(x)$ má v bodě a derivaci. Příslušnou limitu značíme $f'(a)$.

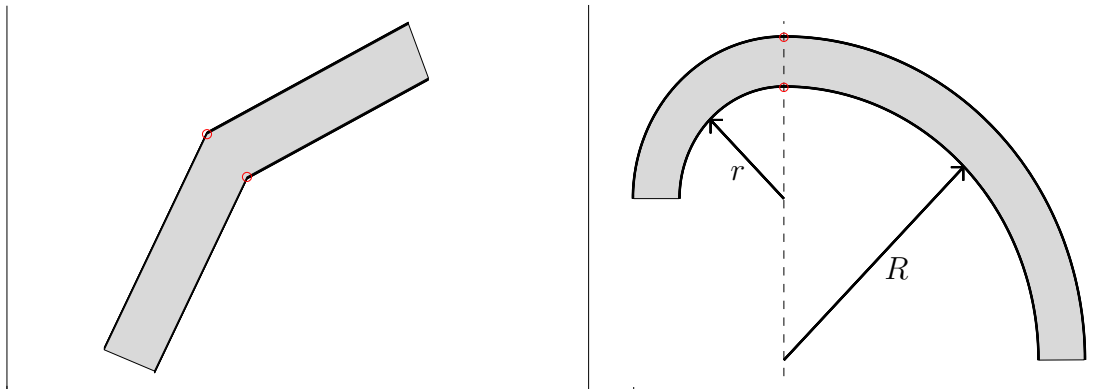
Poznámka: Geometrický význam derivace $f'(a)$ (viz obrázek) je směrnice tečny křivky dané rovnicí $y = f(x)$ v bodě a (neboť tečna v bodě a je limitní polohou sečny pro $h \rightarrow 0$). Fyzikálně značí derivace funkce $y = f(x)$, kde x je čas a y dráha pohybu, limitu z průměrné rychlosti, tedy okamžitou rychlost v čase a .



Poznámka: Pro danou funkci $f(x)$ vyjadřuje derivace $f'(x_0)$ míru „stoupání“, resp. „klesání“ v bodě x_0 .



Poznámka: Geometrický význam druhé derivace $f''(x_0)$ souvisí s mírou „zakřivení“ grafu funkce f v bodě x_0 . Pro ilustraci si uveďme dva příklady špatné výstavby pomyslné silnice. V prvním případě ve vyznačených bodech vůbec neexistuje první derivace (derivace se v těchto bodech mění *skokově*).



Ve druhém případě je tvořena komunikace částmi dvou kružnic o různých poloměrech r a R . První derivace je v tomto případě spojitá i ve vyznačených bodech (říkáme, že funkce je „hladká“), nevhodnost tohoto případu je způsobena skokem v hodnotách tzv. **křivosti**, která je v případě kružnice konstantní a je rovna převrácené hodnotě poloměru (tj. $1/r$ a $1/R$). Pro úplnost dodejme, že vztah pro křivost je dán vztahem

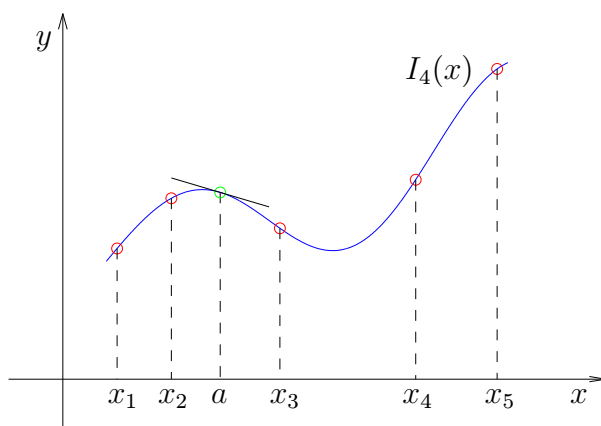
$$k = \frac{f''^2}{(1 + f'^2)^3},$$

kde f'' je druhá derivace funkce f .

Způsoby odvození vzorců pro výpočet derivace

1. Odvození pomocí interpolačního polynomu

Pro funkci f , která je zadána tabulkou, sestavíme interpolační polynom a derivaci funkce f v bodě a ztotožníme s derivací tohoto interpolačního polynomu v bodě a .



$$f'(a) \approx I'_n(a)$$

$$f^{(k)}(a) \approx I_n^{(k)}(a)$$

Poznámky:

- Stupeň polynomu nemůže být nižší než řád počítané derivace.
- Pro jednoduchost hledáme hodnotu derivace v uzlovém bodě a navíc uvažujeme ekvidistantní uzly s krokem h .

2. Odvození pomocí Taylorova rozvoje

Pro dostatečně hladkou funkci f platí (pro $h > 0$):

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0, x_0 + h)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_0 - h, x_0)$$

Z první rovnice potom plyne vztah

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}_{=D_P f(x_0, h)} - \frac{1}{2}hf''(\xi_1)$$

Podobně ze druhé rovnice

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}}_{=D_L f(x_0, h)} + \frac{1}{2}hf''(\xi_2)$$

Obdrželi jsme dva základní **dvoubodové** vzorce $D_P f(x_0, h)$ a $D_L f(x_0, h)$, tzv. pravou a levou poměrnou diferencí.

Podobně odvodíme další vzorce pomocí Taylorova rozvoje vyšších řádů. Platí:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0, x_0 + h)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_0 - h, x_0)$$

Po odečtení obdržíme:

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + \frac{h^3}{6}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))$$

Odtud vyjádříme první derivaci a získáme **tříbodový** vzorec $D_C f(x_0, h)$, tzv. centrální poměrnou diferencí

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}}_{D_C f(x_0, h)} - \underbrace{\frac{h^2}{12}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))}_{O(h^2)}$$

Uvedené vzorce jsou pro výpočet první derivace $f'(x_0)$, pro výpočet druhé derivace $f''(x_0)$ můžeme použít například vzorec, který dostaneme po sečtení vztahů:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0, x_0 + h)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_0 - h, x_0)$$

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^4}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2))$$

Odtud vyjádříme druhou derivaci a získáme **tříbodový** vzorec pro druhou derivaci

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} - \underbrace{\frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2))}_{O(h^2)}$$

Poznámka: Samozřejmě lze odvodit řadu dalších vzorců, přičemž platí, že čím více bodů použijeme, tím bude řád chyby vyšší.

Příklad: Pomocí uvedených tří vzorců vypočítejte přibližnou hodnotu první derivace funkce $f(x) = e^x(1 - x)$ v bodě $x_0 = 1$. Použijte krok $h = 0,1$.

Řešení: (Nejprve si pro kontrolu analyticky zjistíme přesnou hodnotu první derivace funkce f bodě x_0 :

$$f'(x) = e^x(1 - x) + e^x(-1) = -xe^x, \quad \text{tj. } f'(1) = -1e^1 = -e \approx -2,7182.)$$

Nyní použijeme pravou, levou a centrální poměrnou diferenci:

$$\begin{aligned} 1. \quad D_P f(x_0, h) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{e^{1,1}(1 - 1,1) - e^1(1 - 1)}{0,1} = \\ &= \frac{-0,1e^{1,1}}{0,1} = -e^{1,1} \approx -3,0041 \quad \text{tj. chyba je přibližně } 0,2858 \\ 2. \quad D_L f(x_0, h) &= \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{e^1(1 - 1) - e^{0,9}(1 - 0,9)}{0,1} = \\ &= \frac{-0,1e^{0,9}}{0,1} = -e^{0,9} \approx -2,4596 \quad \text{tj. chyba je přibližně } 0,2586 \\ 3. \quad D_C f(x_0, h) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = \frac{e^{1,1}(1 - 1,1) - e^{0,9}(1 - 0,9)}{0,2} = \\ &= \frac{-0,1e^{1,1} - 0,1e^{0,9}}{0,2} = -\frac{e^{1,1} + e^{0,9}}{2} \approx -2,7318 \\ &\quad \text{tj. chyba je přibližně } 0,0136 \end{aligned}$$

Všimněme si velikosti chyb v jednotlivých případech. Potvrzuje se fakt, že chyba prvních dvou (dvoubodových) vzorců je řádu h , tj. v řádu desetin a chyba posledního (tříbodového) vzorce je řádu h^2 , tj. v řádu setin. \square

Podmíněnost úlohy numerického derivování

Uvažujme nyní např. vzorec s pravou diferencí $D_P f(x_0, h)$, tj. platí

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}_{D_P f(x_0, h)} - \underbrace{\frac{1}{2} h f''(\xi)}_{\text{chyba metody}}$$

Chybu metody označme r_1 . Platí-li $|f''(x)| < M$ pro $x \in (x_0, x_0 + h)$, potom $|r_1| \leq \frac{M}{2}h$.
Dále je třeba uvážit **chyby měření**, resp. **zaokrouhlovací chyby**, které označíme r_2 .
Označíme-li

$f(x_0), f(x_0 + h)$ přesné hodnoty

$f^*(x_0), f^*(x_0 + h)$ vstupní hodnoty

Potom pro r_2 platí

$$r_2 = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}_{\text{přesná hodnota vzorce}} - \underbrace{\frac{f^*(x_0 + h) - f^*(x_0)}{h}}_{\text{vypočtená hodnota vzorce}}$$

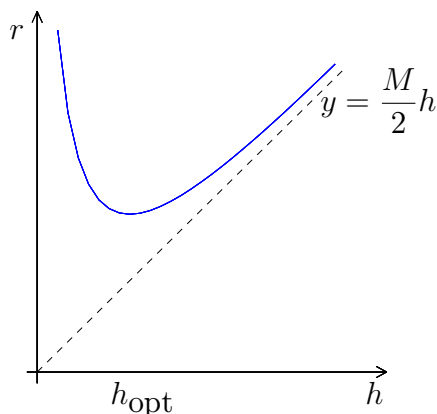
A dále

$$\begin{aligned} |r_2| &= \left| \frac{f(x_0 + h) - f^*(x_0 + h)}{h} + \frac{f^*(x_0) - f(x_0)}{h} \right| \leq \\ &\leq \frac{|f(x_0 + h) - f^*(x_0 + h)|}{h} + \frac{|f^*(x_0) - f(x_0)|}{h} \leq \\ &\leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{\varepsilon}{h} = \frac{2\varepsilon}{h} \end{aligned}$$

Využili jsme zde odhady $|f^*(x_0 + h) - f(x_0 + h)| \leq \varepsilon$ a $|f^*(x_0) - f(x_0)| \leq \varepsilon$, kde číslo ε může představovat např. strojovou přesnost.

Pro celkovou chybu r potom platí

$$|r| \leq |r_1| + |r_2| \leq \frac{M}{2}h + \frac{2\varepsilon}{h}$$



- Úloha numerického derivování je **špatně podmíněná** !
(pro zmenšující se h roste chyba)
- Lze najít optimální krok h_{opt}

Poznámka: Na základě špatné podmíněnosti se zdá, že nebude možné při výpočtu derivace dosáhnout libovolné přesnosti. Zvýšení přesnosti ale můžeme dosáhnout

- 1) použitím vzorce s chybou vyššího řádu
- 2) použitím tzv. Richardsonovy extrapolace

Věnujme nyní pozornost **Richardsonově extrapolaci**. Je třeba zdůraznit, že se jedná o **obecný princip**, který se nepoužívá jen u numerického výpočtu derivace. Myšlenka vychází z toho, že na základě znalosti výrazu pro rozvoj chyby využijeme dvou přibližných výsledků k získání třetího, který bude přesnější. Tento proces eliminace chyb budeme demonstrovat např. na poměrné centrální diferenci

$$f'(x_0, h) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}}_{D_C f(x_0, h)} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_0 - h, x_0 + h). \quad (1)$$

Podobný vztah musí platit i v případě, že použijeme místo kroku h krok $2h$, tj.

$$f'(x_0, 2h) = \underbrace{\frac{f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h)}{2 \cdot 2h}}_{D_C f(x_0, 2h)} - \frac{(2h)^2}{6} f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_0 - 2h, x_0 + 2h). \quad (2)$$

Pro jednoduchost předpokládáme, že hodnoty $f'''(\xi_1)$ a $f'''(\xi_2)$ jsou si rovny. Vhodnou kombinací (1) a (2) dosáhneme eliminace chyby řádu h^2 , tj. od čtyřnásobku rovnice (1) odečteme rovnici (2) a výsledek dělíme třemi (4-1). Dostaneme přesnější aproximaci derivace funkce f v bodě x_0 :

$$f'(x_0) \approx \frac{4f'(x_0, h) - f'(x_0, 2h)}{3} = \frac{4}{3}f'(x_0, h) - \frac{1}{3}f'(x_0, 2h) \quad (3)$$

Poznámka: V názvu metody se objevuje slovo extrapolace. Je to proto, že nová hodnota derivace je lineární kombinací dvou hodnot, ovšem neleží mezi těmito hodnotami (kdyby tomu tak bylo, mluvili bychom o interpolaci).

Poznámka: Algoritmus Richardsonovy extrapolace lze samozřejmě použít opakovaně pro eliminaci chyb vyšších řádů. Tato metoda je potom velmi efektivní.

Příklad: Použijte opakovanou Richardsonovu extrapolaci pro výpočet derivace funkce $f(x) = \ln x$ v bodě $x_0 = 3$ pomocí centrální poměrné difference s kroky $h = 0,8; 0,4; 0,2$ a $0,1$.

Řešení: Dá se ukázat (viz. odvození), že pro dostatečně hladkou funkci f platí tento vztah

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}}_{D_C f(x_0, h)} + \underbrace{c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \dots}_{\text{rozvoj chyby}}$$

kde čísla c_1, c_2, c_3 představují kontanty obsahující příslušné derivace.

Pro přehlednost budeme výsledky zapisovat do tabulky:

h	$f'(x_0, h)$	po 1. korekci - vztah (3)	po 2. korekci - vztah (4)
0,8	0,341589		
0,4	0,335329	$\frac{4}{3} 0,335329 - \frac{1}{3} 0,341589 =$ $= 0,333242$	
0,2	0,333828	$\frac{4}{3} 0,333828 - \frac{1}{3} 0,335329 =$ $= 0,333327$	$\frac{16}{15} 0,333327 - \frac{1}{15} 0,333242 =$ $= \mathbf{0,333332}$
0,1	0,333456	$\frac{4}{3} 0,333456 - \frac{1}{3} 0,333828 =$ $= 0,333332$	$\frac{16}{15} 0,333332 - \frac{1}{15} 0,333327 =$ $= \mathbf{0,333332}$

Ve výpočtu jsme použili jednak 1. korekci pro eliminaci chyby řádu h^2 , ale dále také 2. korekci, která eliminovala chybu řádu h^4 . Vztah (4) pro 2. korekci jsme dostali podobně jako vztah (3), tj.

$$\begin{aligned}
 f'(x_0, h) &= D_C f(x_0, h) + c_2 h^4 \quad / \cdot 2^4 \\
 f'(x_0, 2h) &= D_C f(x_0, 2h) + c_2 (2h)^4 \quad / \cdot (-1) \\
 \hline
 f'(x_0) &\approx \frac{2^4 f'(x_0, h) - f'(x_0, 2h)}{2^4 - 1} = \frac{16}{15} f'(x_0, h) - \frac{1}{15} f'(x_0, 2h) \quad (4)
 \end{aligned}$$

V tabulce chybí sloupec pro 3. korekci. Důvod je ten, že se hodnoty, ze kterých by se extrapolovala nová hodnota, rovnají (dostali bychom to samé číslo). Výraz pro 3. korekci bychom opět odvodili podobně jako vztah (4), pouze místo 4 mocniny by se v něm objevila 6 mocnina.

Hodnota hledané derivace funkce $f(x) = \ln x$ v bodě $x_0 = 3$ je **0,333332**. Pro úplnost dodejme, že přesná hodnota derivace je $f'(x) = \frac{1}{x}$, tj. $f'(3) = \frac{1}{3}$.

□

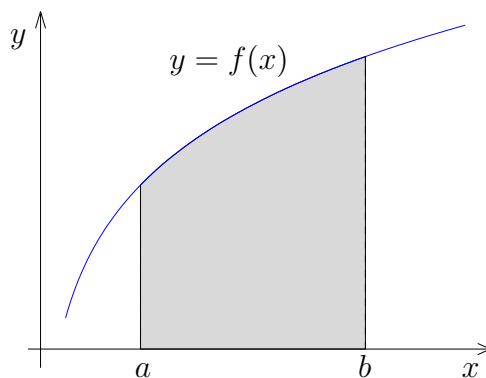
URČITÝ INTEGRÁL FUNKCE

Formulace: Naším cílem je určit přibližnou hodnotu určitého integrálu

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

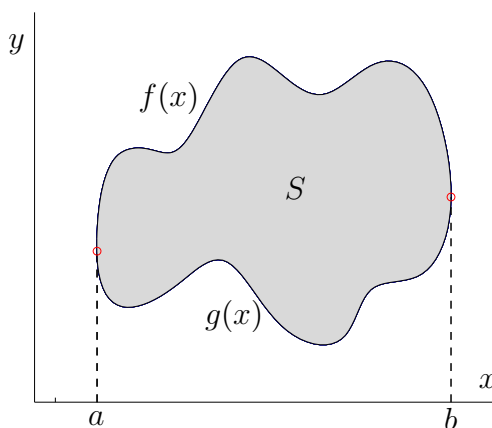
kde předpokládáme, že funkce f je na intervalu $\langle a, b \rangle$ integrovatelná.

Poznámka: Geometrický význam integrálu $I(f)$ (viz obrázek) je obsah plochy mezi grafem funkce f a osou x na intervalu $\langle a, b \rangle$.



Numerické metody výpočtu integrálu užíváme zejména tehdy, když $I(f)$ není možno spočítat analyticky (velmi častý případ) nebo je sice analytické řešení možné, ale je velmi pracné. V případě že máme zadánu funkci f tabulkou, není ani jiný přístup možný.

Příklad: Chceme-li určit obsah plochy mezi grafy funkcí f a g , užijeme určitý integrál.



Pro obsah potom platí
$$S = \int_a^b f(x) - g(x) dx$$

Přirozený princip numerických metod pro výpočet integrálu vychází z aproximace funkce. Danou funkci f nahradíme její vhodnou aproximací φ a jako aproximaci integrálu $I(f)$ prohlásíme hodnotu integrálu $I(\varphi)$, tj.

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

Poznámka: Narozdíl od výpočtu derivace je výpočet integrálu stabilní, protože je-li φ dobrou aproximací funkce f na intervalu $\langle a, b \rangle$, je integrál $I(\varphi)$ dobrou aproximací $I(f)$.

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b \varphi(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - \varphi(x)| dx \leq (b-a) \underbrace{\sup_{x \in \langle a, b \rangle} |f(x) - \varphi(x)|}_{\varepsilon}.$$

Princip většiny metod na výpočet určitého integrálu $\int_a^b f(x) dx$ je založen na tom, že interval $\langle a, b \rangle$ rozdělíme na N podintervalů $\langle x_k, x_{k+1} \rangle$ tak, že

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b.$$

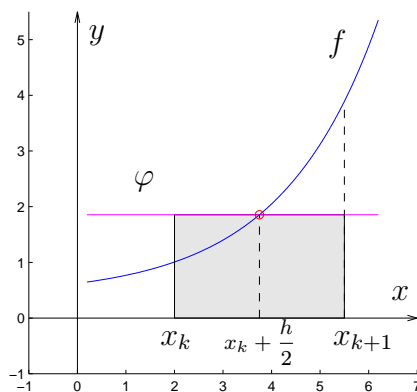
Na těchto podintervalech nahradíme funkci f polynomem a integrujeme tento polynom. Vzorce pro výpočet integrálu (tzv. **kvadrurní vzorce**) na intervalech $\langle x_k, x_{k+1} \rangle$ budeme nazývat **základní** a vzorec pro výpočet hodnoty integrálu přes celý interval $\langle a, b \rangle$ budeme nazývat **složený** (složený kvadrurní vzorec je dán součtem základních kvadrurních vzorců).

Pro jednoduchost budeme předpokládat, že jsou všechny podintervaly $\langle x_k, x_{k+1} \rangle$ stejně velké, tj. máme tzv. ekvidistantní uzly, které můžeme vyjádřit jako $x_k = x_0 + kh$, kde $k = 0, 1, \dots, N-1$ a $h = \frac{b-a}{N}$.

Uveďme si nyní tři nejjednodušší základní kvadrurní vzorce, které patří mezi tzv. **Newtonovy-Cotesovy kvadrurní vzorce**.

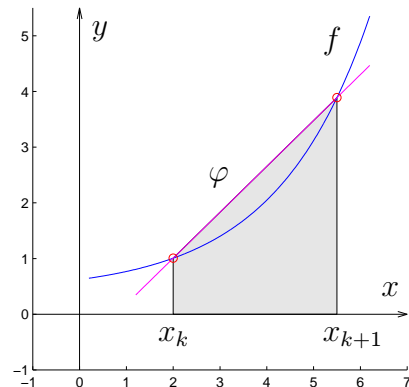
1) Obdélníkové pravidlo (funkci f nahrazujeme konstantní funkcí φ)

$$\begin{aligned} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx &\approx \\ &\approx h \cdot f\left(x_k + \frac{h}{2}\right) \equiv R_Z(f, h) \end{aligned}$$



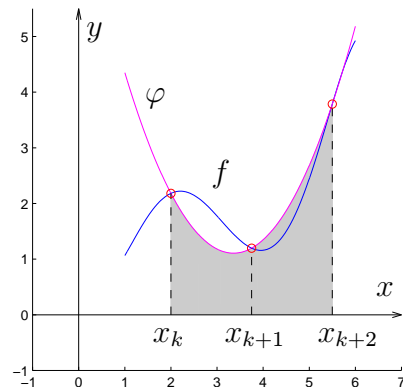
2) Lichoběžníkové pravidlo (funkci f nahrazujeme lineární funkcí φ)

$$\begin{aligned}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx &\approx \\ &\approx \frac{h}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})] \equiv T_Z(f, h)\end{aligned}$$



3) Simpsonovo pravidlo (funkci f nahrazujeme kvadratickou funkcí φ)

$$\begin{aligned}\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x) dx &\approx \\ &\approx \frac{h}{3} [f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})] \equiv S_Z(f, h)\end{aligned}$$



Příklad k procvičení: Odvoďte základní vzorec pro Simpsonovo pravidlo.

Poznámka: Základní vzorce v předchozím textu jsme odvodili na základě geometrické interpretace. V případě, že bychom chtěli vyjádřit současně i vztahy pro chyby těchto vzorců, museli bychom použít k odvození Taylorův rozvoj. Získali bychom tyto vztahy:

$$\begin{aligned}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx &= R_Z(f, h) + \frac{h^3}{24} f''(\xi) \\ \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx &= T_Z(f, h) - \frac{h^3}{12} f''(\xi) \\ \int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x) dx &= S_Z(f, h) - \frac{h^5}{90} f^{(IV)}(\xi)\end{aligned}$$

Příklad: Pomocí výše uvedených Newtonových-Cotesových vzorců vypočtěte integrál

$$\int_1^{1,2} e^x dx.$$

Řešení: (Přesné řešení je $[e^x]_1^{1,2} = e^{1,2} - e^1 \doteq 0,601835$.)

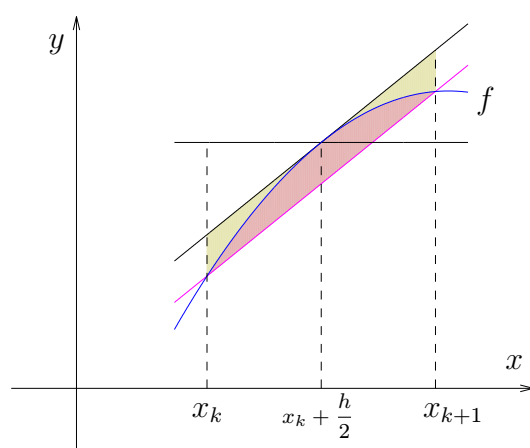
$$R_Z(e^x; 0, 2) = 0,2e^{1,1} \doteq 0,600833 \quad \text{chyba: } 0,001002$$

$$T_Z(e^x; 0, 2) = \frac{0,2}{2}(e^{1,0} + e^{1,2}) \doteq 0,603839 \quad \text{chyba: } 0,002003$$

$$S_Z(e^x; 0, 1) = \frac{0,1}{3}(e + 4e^{1,1} + e^{1,2}) \doteq 0,601835 \quad \text{chyba: } 0,000000$$

□

Poznámka: Všimněme si chyb. U obdélníkového pravidla vyšla chyba menší než u lichoběžníkového, přestože u lichoběžníkového pravidla jsme funkci f aproximovali „lepší“ funkcí φ (lineární). Chyba u Simpsonova pravidla vyšla menší než u ostatních. Tyto výsledky potvrzují vztahy pro chyby jednotlivých vzorců na minulé straně. Fakt, že obdélníkové pravidlo je přesnější než lichoběžníkové můžeme demonstrovat na obrázku:



Chceme-li získat složené kvadraturní vzorce, je třeba sečíst základní kvadraturní vzorce. Pro uvedené základní Newtonovy-Cotesovy dostaneme tyto složené kvadraturní vzorce:

$$\begin{aligned} R(f, h) &\equiv h \cdot \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k + \frac{h}{2}) \\ T(f, h) &\equiv \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)] = \\ &= h \cdot \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + \frac{1}{2}f(x_N) \right] \\ S(f, h) &\equiv \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \\ &+ \dots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)] \end{aligned}$$

Pro chyby složených vzorců potom platí:

$$\begin{aligned} I &= R(f, h) + (b-a) \frac{h^2}{24} f''(\xi) \\ I &= T(f, h) - (b-a) \frac{h^2}{12} f''(\xi) \\ I &= S(f, h) - (b-a) \frac{h^4}{180} f^{(IV)}(\xi) \end{aligned}$$

Pro zpřesňování výsledků nám, stejně jako u numerického výpočtu derivace, poslouží **Richardsonova extrapolace**. Někdy se tato metoda také nazývá Rungeova metoda nebo metoda polovičního kroku. Ukažme si nyní ještě jednou, jak se vztah pro zpřesnění odvodí:

Předpokládejme, že výraz pro chybu má tvar $e(f) = h^k M$, $h = \frac{b-a}{N}$.

Přesná hodnota integrálu je potom

$$I = K(h) + h^k M \quad (5)$$

Integrál vypočteme stejným vzorcem, ale s krokem $\frac{h}{2}$.

Dostaneme

$$I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \underbrace{\left(\frac{h}{2}\right)^k M_1}_{\text{ozn. } \varepsilon} \Rightarrow h^k = \frac{\varepsilon 2^k}{M_1} \quad (6)$$

Dosadíme-li h^k do (5), získáme

$$I = K(h) + \frac{\varepsilon 2^k M}{M_1} \quad (5')$$

Předpokládáme-li, že se hodnota derivace ve výrazu $e(f)$ pro chybu příliš nemění (tj. $M \approx M_1$), potom $\frac{M}{M_1} \approx 1$ a pro (5') a (6) musí platit

$$K\left(\frac{h}{2}\right) + \varepsilon \approx K(h) + 2^k \varepsilon$$

Odtud plyne odhad chyby ε

$$\varepsilon \approx \frac{1}{2^k - 1} \left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h) \right]$$

a přesnější hodnota integrálu je potom

$$I = K\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^k - 1} \left[K\left(\frac{h}{2}\right) - K(h) \right].$$

Příklad: Pomocí lichoběžníkového pravidla vypočtěte $\int_1^5 \ln x \, dx$. Ke zpřesnění použijte Richardsonovu extrapolaci.

Řešení: Pro rozvoj chyby lichoběžníkového pravidla platí

$$I = T(f, h) + \underbrace{a_1 h^2}_{\text{tab. } k=2} + \underbrace{a_2 h^4}_{\text{tab. } k=4} + a_3 h^6 + \dots$$

Výsledky opět zapíšeme do tabulky

h	$T(f, h)$	1. zpřesnění ($k = 2$)	2. zpřesnění ($k = 4$)
4	$\frac{4}{2}(\ln 1 + \ln 5) = 3,2188$		
2	$\frac{2}{2}(\ln 1 + 2 \ln 3 + \ln 5 = 3,8066$	$\frac{3,8066 - 3,2188}{3} + 3,8066 = \underline{4,0025}$	
1	$\frac{1}{2}(\ln 1 + 2 \ln 2 + 2 \ln 3 + 2 \ln 4 + \ln 5) = 3,9827$	$\frac{3,9827 - 3,8066}{3} + 3,9827 = \underline{4,0414}$	$\frac{4,0414 - 4,0025}{15} + 4,0414 = \underline{\underline{4,04399}}$

Pro kontrolu uveďme přesnou hodnotu integrálu:

$$\int_1^5 \ln x \, dx = \left| \begin{array}{cc} u = \ln x & v' = 1 \\ u' = \frac{1}{x} & v = x \end{array} \right| = [x \ln x]_1^5 - \int_1^5 dx = 5 \ln 5 - 4 \doteq \underline{\underline{4,04719}}$$

□

Poznámka: Newtonovy-Cotesovy vzorce používají $(m + 1)$ ekvidistantních uzlů a integrují přesně polynomy až do m -tého stupně (máme na mysli základní vzorce na intervalu (x_k, x_{k+m})). Pro zvýšení přesnosti by se mohlo zdát výhodné použít více uzlů a funkci f aproximovat polynomem vyššího řádu. Ze zkušeností z aproximace funkce polynomem ovšem víme, že limitní případ polynomu stupně $m \rightarrow \infty$ nemusí odpovídat původní funkci (říkáme, že Newton-Cotesovy vzorce **nejdou konvergentní**).

Další skupinou metod pro výpočet hodnoty určitého integrálu jsou tzv. **Gaussovy kvadraturní vzorce**. Jejich princip spočívá v tom, že se snažíme, aby kvadraturní vzorec integroval přesně polynomy co možná nejvyššího řádu. Obecně kvadraturní vzorec budeme uvažovat ve tvaru

$$K(f) = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i),$$

kde w_i jsou tzv. *váhy* a x_i jsou *uzly*.

Uvažujeme-li, že na základním intervalu máme $m + 1$ bodů, dá se ukázat, že nejvyšší možný stupeň polynomu, který se pomocí kvadraturního vzorce integruje přesně, je $2m + 1$ (tomuto číslu říkáme **algebraický řád přesnosti**). U Newtonových-Cotesových vzorců byl stupeň m . Cenou za vyšší přesnost budou ovšem **neekvidistantní uzly**. V následujícím příkladě je ukázán postup pro nalezení nejjednoduššího Gaussova kvadraturního vzorce.

Příklad: Určete Gaussův kvadraturní vzorec pro $m = 0$ (tj. v intervalu uvažujeme pouze jeden uzel) a pro interval $\langle -1, 1 \rangle$.

Řešení: Pro $m = 0$ má hledaný kvadraturní vzorec tvar $K(f) = w_0 f(x_0)$, kde vystupují 2 neznámé w_0 a x_0 . Víme, že vzorec musí přesně integrovat:

1) konstantu

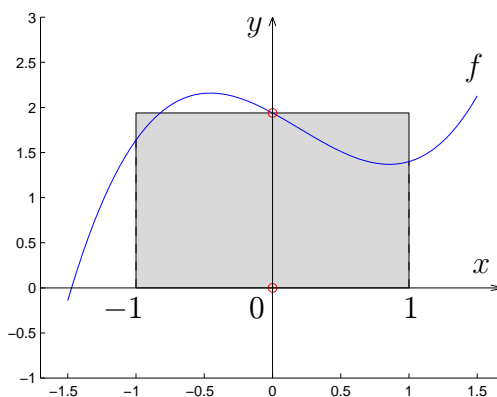
$$\int_{-1}^1 b \, dx = 2b \stackrel{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^b \Rightarrow w_0 = 2.$$

2) lineární funkci

$$\int_{-1}^1 (ax+b) \, dx = \left[a \frac{x^2}{2} + bx \right]_{-1}^1 = \underbrace{\frac{a}{2} - \frac{a}{2}}_{=0} + 2b \stackrel{\text{pož.}}{=} w_0 \cdot \overbrace{f(x_0)}^{ax_0+b} \Rightarrow 2b = 2(ax_0+b) \Rightarrow x_0 = 0.$$

Nejjednodušší Gaussův kvadraturní vzorec je:

$$K(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx = 2f(0) + \underbrace{\frac{1}{3}f''(\xi)}_{\text{chyba}}$$

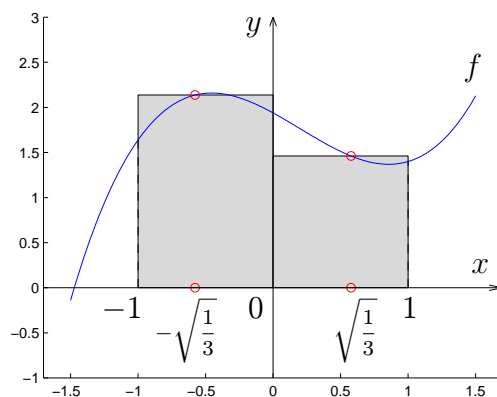


□

Poznámka: Další Gaussův kvadraturní vzorec (pro $m = 1$) vypadá takto:

$$K(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \underbrace{\frac{1}{135} f^{(IV)}(\xi)}_{\text{chyba}}.$$

Geometricky si jej lze představit takto:



Poznámka: Koeficienty a uzly vzorců vyšších řádů jsou uvedeny v tabulkách. Opět lze používat složené vzorce.

Poznámka: To, že jsme vyjádřili $\int_{-1}^1 f(x) dx$ neubírá nic na obecnosti, můžeme totiž libovolný interval $\langle a, b \rangle$ transformovat na $\langle -1, 1 \rangle$ a použít odvozené vztahy.