

9. Numerikus differenciálás és integrálás

Nagy tömegű adatot feldolgozása során szükség lehet a feladat diszkretizálására, vagyis az analitikus függvény kapcsolat helyett bizonyos (általában ekvidisztáns) osztáspontokban vett értékek megadására, és ezekből a deriváltak és határozott integrál értékeinek meghatározására.

Más esetekben az előző fejezetekben megismert interpoláció, vagy legkisebb négyzetes közelítés alkalmas lehet az ismeretlen függvény deriváltjának és integráljának közelítésére.

9. 1. Numerikus deriválás

Ilyen típusú feladattal találkozunk, amikor diszkrét időpontokban mért helykoordináták segítségével sebességet, diszkrét sebességértékek segítségével gyorsulást, diszkrét töltésmennyiség értékek esetén áramerősséget stb. szeretnénk becsülni. A másik fontos alkalmazási terület a differenciálegyenletek numerikus megoldása, ezt a későbbi fejezetben tárgyaljuk.

Amint azt a következőkben megmutatjuk, numerikus deriválás esetén pontatlan adatokból elég veszélyes dolog numerikus deriváltakat számolni, ugyanis az adatok kis hibája is nagy eltérést okozhat a deriváltban. A **numerikus deriválás** un. **instabil numerikus módszer**. Ezért alkalmazásakor nem kerülhető el a hibabecslés, illetve mérési adatok esetén célszerű inkább lesimítani az adatokat- azaz például a legkisebb négyzetek módszere segítségével meghatározni a közelítő függvényt és azt deriválni.

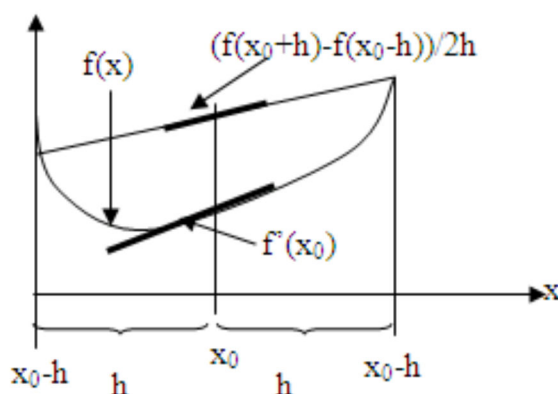
9. 1. 1. Közelítés differencia hányadossal

Használt Maple parancs: `fdiff`

Egy függvény adott pontbeli differenciáhányadosa alatt a differenciahányadosok adott pontbeli határértékét értjük. Ebből adódik, hogy a numerikus deriváltat első lépésben az $(x_0 - h, f(x_0 - h))$ illetve az $(x_0 + h, f(x_0 + h))$ pontokhoz tartozó differenciahányadossal közelítjük.

Ha ismerjük az

$x_0 - h < x_0 < x_0 + h$ helyeken az $f(x_0 - h)$, $f(x_0)$, $f(x_0 + h)$ függvényértékeket,



a differenciálhányados közelítése

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

Vegyük észre, hogy ez nem más, mint az $((x_0 - h), f(x_0 - h)), ((x_0 + h), f(x_0 + h))$ pontokon átmenő egyenes meredeksége, vagyis az elsőfokú $y = ax + b$ Lagrange polinomban az a értéke.

Ez adja az ötletet, hogy vegyük hozzá a fenti két ponthoz az $(x_0, f(x_0))$ pontot és írjuk fel a 3 ponton átmenő Lagrange polinomot., majd ennek x_0 helyen vett deriváltjával közelítsük az ismeretlen függvény deriváltját.

> restart; with(CurveFitting) :

> $X := [x_0 - h, x_0, x_0 + h] : Y := [f(x_0 - h), f(x_0), f(x_0 + h)] :$

> masodfoku_polinom := PolynomialInterpolation(X, Y, x)

$$\begin{aligned} \text{masodfoku_polinom} := & \frac{1}{2} \frac{(f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)) x^2}{h^2} \\ & + \frac{1}{2} \frac{(-2f(x_0 + h) x_0 + f(x_0 + h) h - 2f(x_0 - h) x_0 + 4f(x_0) x_0 - hf(x_0 - h)) x}{h^2} \\ & + \frac{1}{2} \frac{1}{h^2} (2h^2 f(x_0) + f(x_0 + h) x_0^2 - f(x_0 + h) x_0 h - 2f(x_0) x_0^2 + f(x_0 \\ & - h) x_0 h + f(x_0 - h) x_0^2) \end{aligned}$$

Ennek deriválásával kapjuk a derivált közelítését.

> derivalt_masodfoku := $\frac{\partial}{\partial x}$ masodfoku_polinom

$$\begin{aligned} \text{derivalt_masodfoku} := & \frac{(f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)) x}{h^2} \\ & + \frac{1}{2} \frac{-2f(x_0 + h) x_0 + f(x_0 + h) h - 2f(x_0 - h) x_0 + 4f(x_0) x_0 - hf(x_0 - h)}{h^2} \end{aligned}$$

Képezzük a derivált értékét az $x = x_0$ helyen.

> kozelito_derivalt_ertek := expand(subs(x = x_0, derivalt_masodfoku))

$$\text{kozelito_derivalt_ertek} := \frac{1}{2} \frac{f(x_0 + h)}{h} - \frac{1}{2} \frac{f(x_0 - h)}{h}$$

Vegyük észre, hogy ez megegyezik a két szomszédos pont segítségével kiszámított közelítő derivált értékével.

Számítsuk ki a masodfoku_polinom segítségével a második derivált közelítő értékét is. (Ez a teljes értelmezési tartományra állandó, hiszen a polinom másodfokú.)

> kozelito_masodik_derivalt_ertek := $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ masodfoku_polinom

$$\text{kozelito_masodik_derivalt_ertek} := \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}$$

Az első és a második derivált közelítő értékeinek kiszámítására vonatkozó fenti képletetek neve: **centrális differencia formulák**

További pontok hozzávételével bonyolultabb formulákat is levezethetünk. Ha 5 egymást követő pontot tekintünk, negyedfokú polinomhoz jutunk.

$$\begin{aligned}
 & X := [x0 - 2h, x0 - h, x0, x0 + h, x0 + 2h] : \\
 & Y := [f(x0 - 2h), f(x0 - h), f(x0), f(x0 + h), f(x0 + 2h)] : \\
 & negyedfoku := PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = power) : \\
 & derivalt_negyedfoku := \frac{\partial}{\partial x} negyedfoku : \\
 & kozelito_derivalt_negyedfoku := expand(subs(x = x0, derivalt_negyedfoku)) \\
 & masodik_der_negyedfoku := \frac{\partial^2}{\partial x^2} negyedfoku, x : \\
 & kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku := subs(x = x0, collect(masodik_der_negyedfoku, x)) \\
 & kozelito_derivalt_negyedfoku := -\frac{1}{12} \frac{f(x0 + 2h)}{h} + \frac{1}{12} \frac{f(x0 - 2h)}{h} + \frac{2}{3} \frac{f(x0 + h)}{h} \\
 & \quad - \frac{2}{3} \frac{f(x0 - h)}{h} \\
 & kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku := x0 \left(\right. \\
 & \quad - \frac{1}{2} \frac{-f(x0 - 2h) - f(x0 + 2h) + 4f(x0 + h) + 4f(x0 - h) - 6f(x0)}{h^4} \left. \right) x0^2 + x0 \left(\right. \\
 & \quad - \frac{1}{4} \frac{1}{h^4} (24f(x0)x0 - 2f(x0 + 2h)h + 4f(x0 + 2h)x0 - 16f(x0 + h)x0 \\
 & \quad - 16f(x0 - h)x0 + 4f(x0 - 2h)x0 + 2f(x0 - 2h)h - 4hf(x0 - h) + 4f(x0 \\
 & \quad + h)h) \left. \right) x0 + x0 \left(-\frac{1}{12} \frac{1}{h^4} (-16f(x0 + h)h^2 + 6f(x0 + 2h)hx0 + 24f(x0 \\
 & \quad + h)x0^2 + 30h^2f(x0) + 24f(x0 - h)x0^2 - 16f(x0 - h)h^2 - 6f(x0 + 2h)x0^2 \right. \\
 & \quad - 12f(x0 + h)x0h - 6f(x0 - 2h)x0^2 + 12f(x0 - h)x0h + f(x0 + 2h)h^2 \\
 & \quad \left. - 36f(x0)x0^2 - 6f(x0 - 2h)hx0 + h^2f(x0 - 2h) \right) \left. \right)
 \end{aligned}$$

A második derivált már igen bonyolult. Vizsgáljuk meg egy konkrét példán keresztül, az elkövetett hiba hogyan függ h értékétől.

1. Példa Vizsgáljuk meg, hogyan függ h értékétől a közelítő deriválással elkövetett hiba egy negyedfokú polinom esetén, ha a deriváltakat a centrális differencia formulák segítségével számítjuk ki?

Megoldás

$$\begin{aligned}
 & f := x \rightarrow a x^4 + b x^2 + c x + d; \\
 & X := [x0 - h, x0, x0 + h] : Y := [f(x0 - h), f(x0), f(x0 + h)] : \\
 & masodfoku := PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = power) : \\
 & derivalt_masodfoku := expand\left(\frac{\partial}{\partial x} masodfoku\right) : \\
 & kozelito_derivalt_ertek := simplify\left(\frac{1}{2} \frac{f(x0 + h)}{h} - \frac{1}{2} \frac{f(x0 - h)}{h}\right) \\
 & \quad f := x \rightarrow a x^4 + b x^2 + c x + d \\
 & kozelito_derivalt_ertek := 4 a x0^3 + 4 a x0 h^2 + 2 b x0 + c
 \end{aligned}$$

- > $\text{pontos_elso_derivalt} := D(f)(x0)$
 $\text{pontos_elso_derivalt} := 4 a x0^3 + 2 b x0 + c$
- > $\text{elteres} := |\text{simplify}(\text{kozelito_derivalt_ertek} - \text{pontos_elso_derivalt})|$
 $\text{elteres} := 4 |a x0 h^2|$
- > $\text{masodik_der_masodfoku} := \text{simplify}\left(\frac{f(x0 + h) - 2f(x0) + f(x0 - h)}{h^2}\right);$
 $\text{masodik_der_masodfoku} := 12 a x0^2 + 2 a h^2 + 2 b$
- > $\text{pontos_masodik_der} := D^{(2)}(f)(x0)$
 $\text{pontos_masodik_der} := 12 a x0^2 + 2 b$
- > $\text{masodik_der_elteres} := |\text{pontos_masodik_der} - \text{masodik_der_masodfoku}|$
 $\text{masodik_der_elteres} := 2 |a h^2|$

Tehát az első és a második deriválnál elkövetett hiba h^2 -től függ. Így azt gondolhatjuk, hogy ha a pontokat egyre közelítjük egymáshoz, az elkövetett hiba csökken.

2. Példa Legyen $f(x) = e^x$, $x0 = 1$.

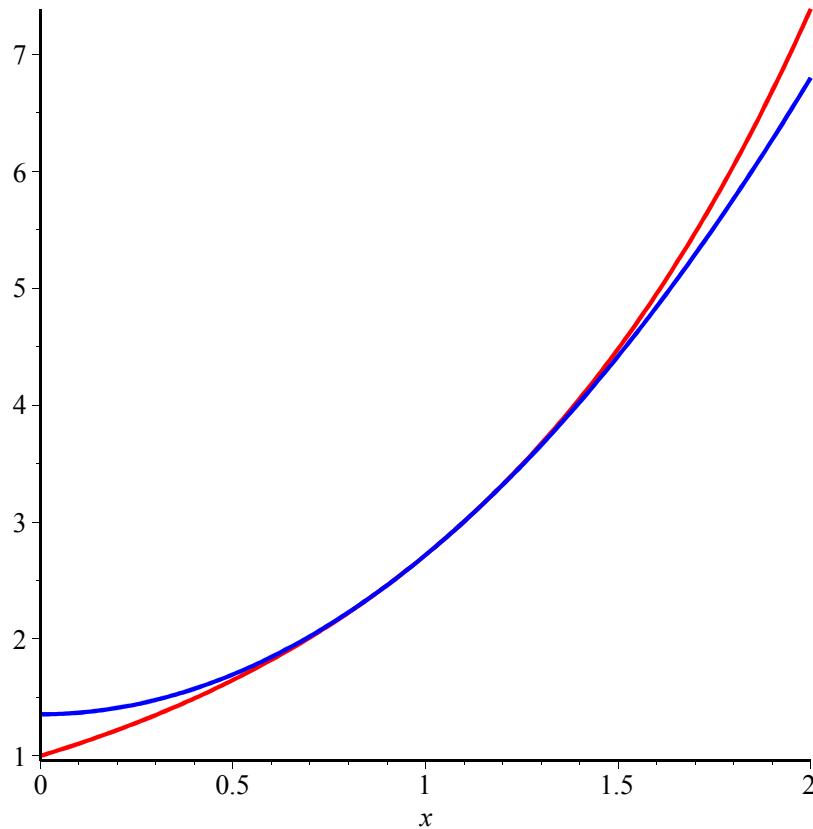
Számítsuk ki a közelítő deriváltakat másodfokú és negyedfokú polinommal való közelítéssel. Mekkora hibát követünk el, ha $h = 0.1$, $h = 0.01$?

Megoldás

a;

Másodfokú polinommal számolva:

- > $\text{restart, with(CurveFitting) : with(plots) : } f := x \rightarrow e^x : x0 := 1 : h := 0.1 :$
- > $X := [x0 - h, x0, x0 + h] : Y := [f(x0 - h), f(x0), f(x0 + h)] :$
- > $\text{masodfokul} := \text{PolynomialInterpolation}(X, Y, x, \text{form} = \text{power}) :$
- > $\text{abra1} := \text{plot}(f(x), x = 0 .. 2, \text{color} = \text{red}, \text{thickness} = 2) :$
 $\text{abra2} := \text{plot}(\text{masodfokul}, x = 0 .. 2, \text{color} = \text{blue}, \text{thickness} = 2) : \text{display}([abra1, abra2])$



A második derivált közelítése 5 illetve 7 értékes jegyre:

```
> kozelito_masodik_der_masodfoku := evalf( (f(x0+h) - 2*f(x0) + f(x0-h)) / h^2, 5);
      pontos := D^(2)(f)(1); hiba := evalf(|kozelito_masodik_der_masodfoku - pontos|,
      5)
      kozelito_masodik_der_masodfoku := 2.72
      pontos := e
      hiba := 0.0017
```

```
> kozelito_masodik_der_masodfoku := evalf( (f(x0+h) - 2*f(x0) + f(x0-h)) / h^2, 7);
      pontos := D^(2)(f)(1); hiba := evalf(|kozelito_masodik_der_masodfoku - pontos|, 7)
      kozelito_masodik_der_masodfoku := 2.7205
      pontos := e
      hiba := 0.002218
```

Figyeljük meg, hiába akartuk 5 illetve 7 jegyre kiírni a közelítő értékeket, ráadásul a nagyobb pontosságú kiíratásnál a hiba növekedett. Számoljuk ki az eltérést kisebb h értékkel is.

```
> h := 0.01 ; kozelito_masodik_der_masodfoku2
      := evalf( (f(x0+h) - 2*f(x0) + f(x0-h)) / h^2, 5);
```

```
> pontos := D(2)(f)(1) : hiba := evalf(|kozelito_masodik_der_masodfoku2 - pontos|, 5);
h := 0.01
```

```
kozelito_masodik_der_masodfoku2 := 2.
```

```
hiba := 0.7183
```

A jegyvesztés még nagyobb, a közelítő értéknek nincsenek tizedes jegyei, és az elkövetett hiba látványosan megnőtt!

b;

Nézzük meg negyedfokú polinommal is.

```
> h := 0.1; X := [x0 - 2 h, x0 - h, x0, x0 + h, x0 + 2 h] :
Y := [f(x0 - 2 h), f(x0 - h), f(x0), f(x0 + h), f(x0 + 2 h)] : negyedfoku1 :=
PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = power) :
```

```
> kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku1 := evalf(subs(x = x0,  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  negyedfoku1), 7)
```

```
> pontos := D(2)(f)(1)
```

```
> hiba := evalf(|kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku1 - pontos|, 7)
h := 0.1
```

```
kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku1 := 2.7295
```

```
pontos := e
```

```
hiba := 0.011218
```

```
> h := 0.01; X := [x0 - 2 h, x0 - h, x0, x0 + h, x0 + 2 h] :
Y := [f(x0 - 2 h), f(x0 - h), f(x0), f(x0 + h), f(x0 + 2 h)] : negyedfoku2 :=
PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = power) :
```

```
> kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku2 := abs(evalf(subs(x = x0,  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  negyedfoku2),
7)))
```

```
> pontos := D(2)(f)(1)
```

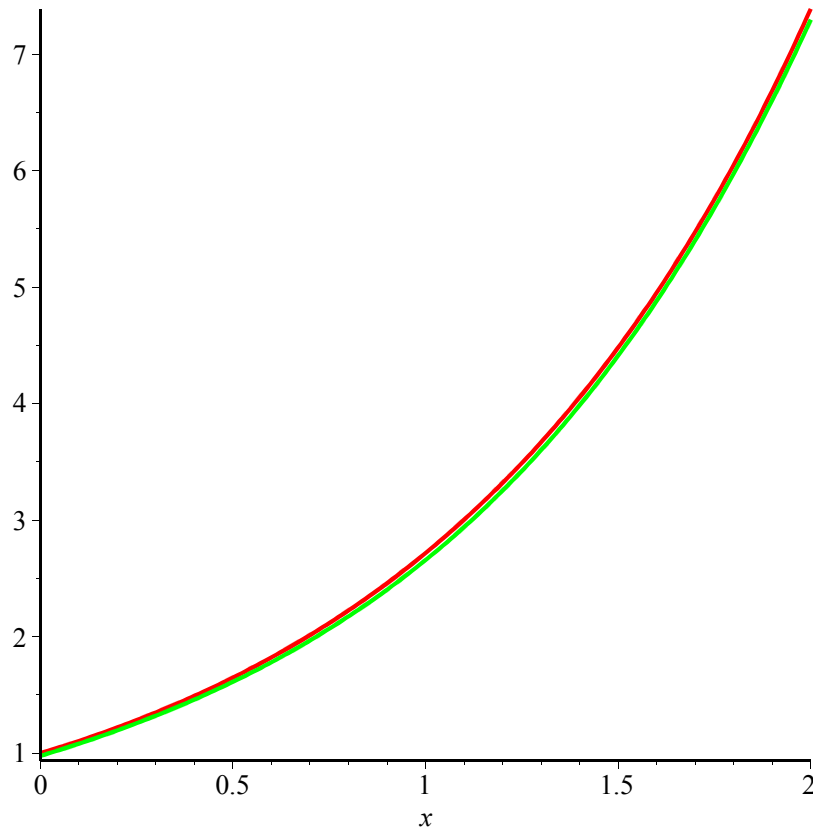
```
> hiba := evalf(|kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku2 - pontos|, 7)
h := 0.01
```

```
kozelito_masodik_derivalt_negyedfoku2 := 157.05
```

```
pontos := e
```

```
hiba := 154.3317
```

```
> abra3 := plot(negyedfoku2, x = 0..2, color = green, thickness = 2) :
display([abra1, abra3])
```



Erre az eredményre nem számítottunk. A hiba durván nagy lett! Pedig az ábráról az látszik, hogy a függvény és a negyedfokú polinom majdnem egybeesik.

Általában azt lehet mondani, akkor lesz kicsi a hiba, ha h se nem túl nagy, se nem túl kicsi. Ezt a megfigyelést **lépéstávolság dilemmának** nevezik. (Gondoljunk bele, a közelítő képlet nevezőjében h^4 szerepel, ezért nem csoda, ha h csökkentésével a hiba nem biztos, hogy csökken.) Ráadásul a deriválás instabil művelet, abban az értelemben is, hogy az **$f(x)$ kis megváltoztatása** (a mért értékekben való kis eltérés) a **derivált nagy változását okozhatja**.

3. Példa Legyen $f(x) = ax^2$, $g(x) = ax^2 + \varepsilon \cdot \sin\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$, ahol ε tetszőleges kicsi pozitív szám.

Mutassuk meg, hogy a két függvény közel azonos, deriváltjaik viszont lényegesen különböznek.

Megoldás

A függvények különbsége $g(x) - f(x) = \varepsilon \sin\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) < \varepsilon$.

Deriváltjaik különbsége viszont $\frac{d}{dx} g(x) - \frac{d}{dx} f(x) = \frac{\cos\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{\varepsilon}$ bármekkora lehet, sőt, ha ε csökken, a hiba növekszik.

Megjegyzés

A fenti példákából is látszik, hogy különösen kis pontosságú kísérleti adatokból, a centrális

differencecia formulákkal numerikus deriváltat számítani veszélyes művelet. Különböző becsléseket lehet adni az optimális lépésköz megállapítására, de ezekben is a magasabbrendű deriváltak felső becslése szerepel.

▼ 9. 1. 2. Közelítés Taylor polinommal

A 6. fejezetben megismertedtünk az x_0 körüli Taylor polinommal. A Taylor sort az n -edik Taylor polinom, és a Lagrange-féle maradéktaggal felírva

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} (x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \frac{f^{(n)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}, \xi \in [-(x - x_0), (x - x_0)]$$

Írjuk fel a Taylor polinomot a másodfokú tagig $x = x_0 - h$, illetve $x = x_0 + h$ helyen. (A deriváltakat most $D^{(n)}(f)(x_0)$ -szel jelöljük.)

> restart;

$$e1 := f(x_0 - h) = f(x_0) - D(f)(x_0) h + \frac{D^{(2)}(f)(x_0) h^2}{2} + \frac{D^{(3)}(f)(\xi_1) h^3}{3} :$$

$$e2 := f(x_0 + h) = f(x_0) + D(f)(x_0) h + \frac{D^{(2)}(f)(x_0) h^2}{2} + \frac{D^{(3)}(f)(\xi_2) h^3}{6} :$$

Ha a két egyenletet kivonjuk egymásból, rendezzük a $D(f)(x)$ deriváltra és csoportosítjuk h hatványai szerint

> $D(f)(x_0) = \text{collect}(\text{solve}(e2 - e1, D(f)(x_0)), h)$

$$D(f)(x_0) = \left(-\frac{1}{12} D^{(3)}(f)(\xi_2) + \frac{1}{6} D^{(3)}(f)(\xi_1) \right) h^2 + \frac{-\frac{1}{2} f(x_0 - h) + \frac{1}{2} f(x_0 + h)}{h}$$

az előző részben megismert centrális differenceciaformulát kapjuk, a Lagrange-féle maradéktagok különbségével kiegészülve. Tehát, ha a maradéktagokra megfelelő becslést adunk, ezzel tudjuk becsülni a numerikus deriválásnál elkövetett hibát.

4. Példa Határozzuk meg az $\ln x$ függvény deriváltját az $x_0 = 1.8$ helyen, adjunk becslést az elkövetett hibára. Legyen $h = 0.1$.

Megoldás

> $f := x \rightarrow \ln(x) : x0 := 1.8 : h := 0.1 :$

> $\text{kozelito_derivalt} := \frac{f(x0 + h) - f(x0 - h)}{2 h} = 0.5561281755 :$

> $\text{pontos} := D(f)(x0) = 0.5555555556 :$

> $\text{hiba} := |\text{kozelito_derivalt} - \text{pontos}| = 0.0005726199 :$

> $\text{hiba_becsles} := \frac{D^{(3)}(f)(x0 - h) h^2}{6} = 0.0006784720810$

Megjegyzés

A Maple beépített *fdiff* parancsa is elvégzi a numerikus deriválást.

$$> \quad \text{fdiff}(f(x), x = 1.8) = 0.5555555556$$

Az eredmény 9 jegyre megegyezik a pontos értékkel.

▼ 9. 2. Numerikus integrálás

Használt Maple parancsok: [Student\[Calculus1\]](#) csomag, [ApproximateInt](#), [Student\[MultivariateCalculus\]](#) csomag, [Student\[MultivariateCalculus\]](#) [ApproximateInt](#)

A határozott integrál kiszámítására a Newton-Leibniz formulát akkor használhatjuk, ha az f függvénynek az $[a, b]$ intervallumon ismert a primitív függvénye. Sokszor azonban nehéz előállítani a primitív függvényt, az is sűrűn előfordul, hogy bár az f függvény folytonos, határozott integrálja tehát létezik, határozatlan integrálja elemi függvény alakjában nem állítható elő. Bizonyítható például, hogy az

$$\int \frac{e^x}{x} dx; \int \frac{\sin(x)}{x} dx; \int \frac{\cos(x)}{x} dx$$

integrálok nem elemi függvények.

Az is elképzelhető, hogy az f függvényt csak diszkrét pontokban ismerjük. Ilyen esetekben numerikus integrálással próbálkozunk.

Kézenfekvő megoldás lenne, ha $f(x)$ -et egy interpolációs polinommal közelítenénk, s ezt a polinomot integrálnánk. Ez azonban többnyire elég nehézkes. A nagyobb számú pont, hosszabb intervallum esetén adódó polinom általában nem is ad elég jó közelítést. A határozott integrál közelítésére más, stabil numerikus módszerek állnak rendelkezésre.

Használjuk fel a határozott integrál additív tulajdonságát, miszerint, ha $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, akkor

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx$$

Ezért felosztjuk az $[a, b]$ intervallumot, és szakaszonként interpolálunk. Lineáris interpoláció esetén a **trapéz-módszer**hez, másodfokú közelítés esetén a **Simpson-módszer**hez jutunk.

▼ 9. 2. 1. Integrálás trapéz módszerrel

Tegyük fel, hogy ismerjük az f függvény értékét az egymástól különböző ($a =$) $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ ($=b$) helyeken $f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, f(x_2) = y_2, \dots, f(x_n) = y_n$.

Meg szeretnénk határozni $\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx$ értékét. Az $f(x)$ függvény közelítésére alkalmazzunk

szakaszonként lineáris közelítést. Tekintsük például az $[x_1, x_2]$ intervallumot! Szakaszonként írjuk fel a lineáris interpolációs polinomot, valamint használjuk fel, hogy a trapéz területe

$$\frac{(a+c)m}{2}, \text{ így a trapéz területe } \frac{(y_2 + y_1)(x_2 - x_1)}{2}$$

Ha a felosztás egyenletes lépésközű, akkor $h = \frac{x_n - x_0}{n} = \frac{b - a}{n}$ jelöléssel (h most a trapéz magasságát jelenti, az alapjai y megfelelő értékei)

$$\int_{x_0}^x f(x) dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_1}{2} + \frac{y_1 + y_2}{2} + \frac{y_2 + y_3}{2} + \dots + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} \right),$$

vagy másképp írva létrejön az úgynevezett trapéz formula

$$\int_{x_0}^x f(x) dx \sim h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right).$$

Felmerül természetesen a kérdés, hogy mekkora az így számított közelítés hibája. A kérdésre általában nem tudunk válaszolni, hiszen ha diszkrét pontok adottak csupán, akkor azokra sokféle függvény illeszthető. Ha azonban a függvény az adott $[a, b]$ intervallumon folytonos és az intervallum belsejében legalább kétszer folytonosan differenciálható, akkor adhatunk becslést az elkövetett hibára.

A Maple Student csomagjában van beépített eljárása a trapéz-formulára: ApproximateInt (függvény, x=x0..xv, method = trapezoid);, output=plot, illetve output=animation opciók mellett az eredmény grafikusán jelenik meg.

5. Példa. Határozzuk az $f(x) = (x - 2)^3 - 2x + 4 + 2.5$ integrál értékét a trapéz szabály alkalmazásával a $[0, 3.6]$ zárt intervallumon. A részintervallumok száma legyen először $n=6$!

Megoldás

$$\begin{aligned} &> f := x \rightarrow (x - 2)^3 - 2(x - 2) + 2.5 : \\ &> a := 0 : b := 3.6 : n := 6 : h := \frac{b - a}{n} : \end{aligned}$$

A trapézformula kiszámítására írhatunk rövid ciklust is, ahol az első és az utolsó tagot külön ki kell számolni.

$$\begin{aligned} &> integral := \frac{h(f(a) + f(b))}{2} : \\ &\quad \text{for } i \text{ to } n - 1 \text{ do } integral := integral + hf(a + hi) \text{ end do} : \\ &> kozelito_integral_trapéz_modszerral := integral \\ &\quad \text{kozelito_integral_trapéz_modszerral} := 7.948800000 \end{aligned}$$

Ugyanez a számolás elvégezhető a Maple *ApproximateInt* beépített parancsával, ahol a *method=trapezoid* jelenti a trapézmódszert, a *partition=érték* a részintervallumok számát adja. Alapesetben ez 11.

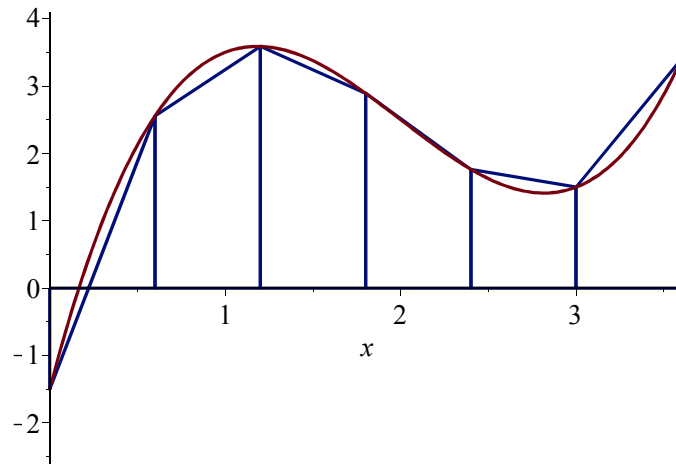
$$\begin{aligned} &> \text{with(Student[Calculus1]) : kozelito := ApproximateInt}(f(x), x = 0 .. 3.6, \text{method} \\ &\quad = \text{trapezoid}, \text{partition} = 6) \\ &\quad \text{kozelito} := 7.948800000 \end{aligned}$$

A pontos integrál értéke:

$$\begin{aligned} &> pontos := \int_0^{3.6} f(x) dx = \int_0^{3.6} f(x) dx; \text{ elteres} := |kozelito - rhs(pontos)| \\ &\quad pontos := \int_0^{3.6} ((x - 2)^3 - 2x + 6.5) dx = 8.078400000 \\ &\quad \text{elteres} := 0.129600000 \end{aligned}$$

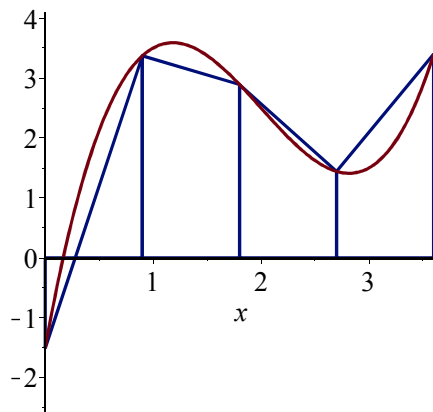
Természetesen ha az osztópontok számát növeljük, a közelítő érték egyre jobban megközelíti a pontos értéket. Ezt a beépített animációval jól lehet szemléltetni.

> `ApproximateInt(f(x), x=0..3.6, method=trapezoid, output=plot, partition=6)`

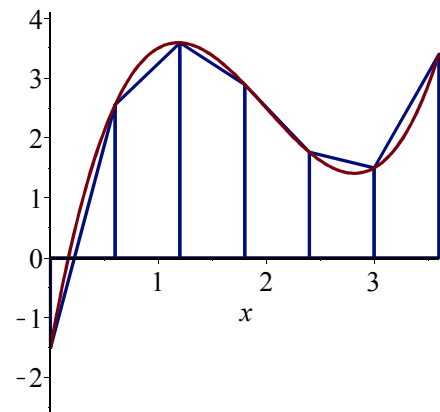


An approximation of $\int_0^{3.6} f(x) \, dx$ using trapezoid rule, where $f(x) = (x-2)^3 - 2x + 6.5$ and the partition is uniform. The approximate value of the integral is 7.948800000. Number of subintervals used: 6.

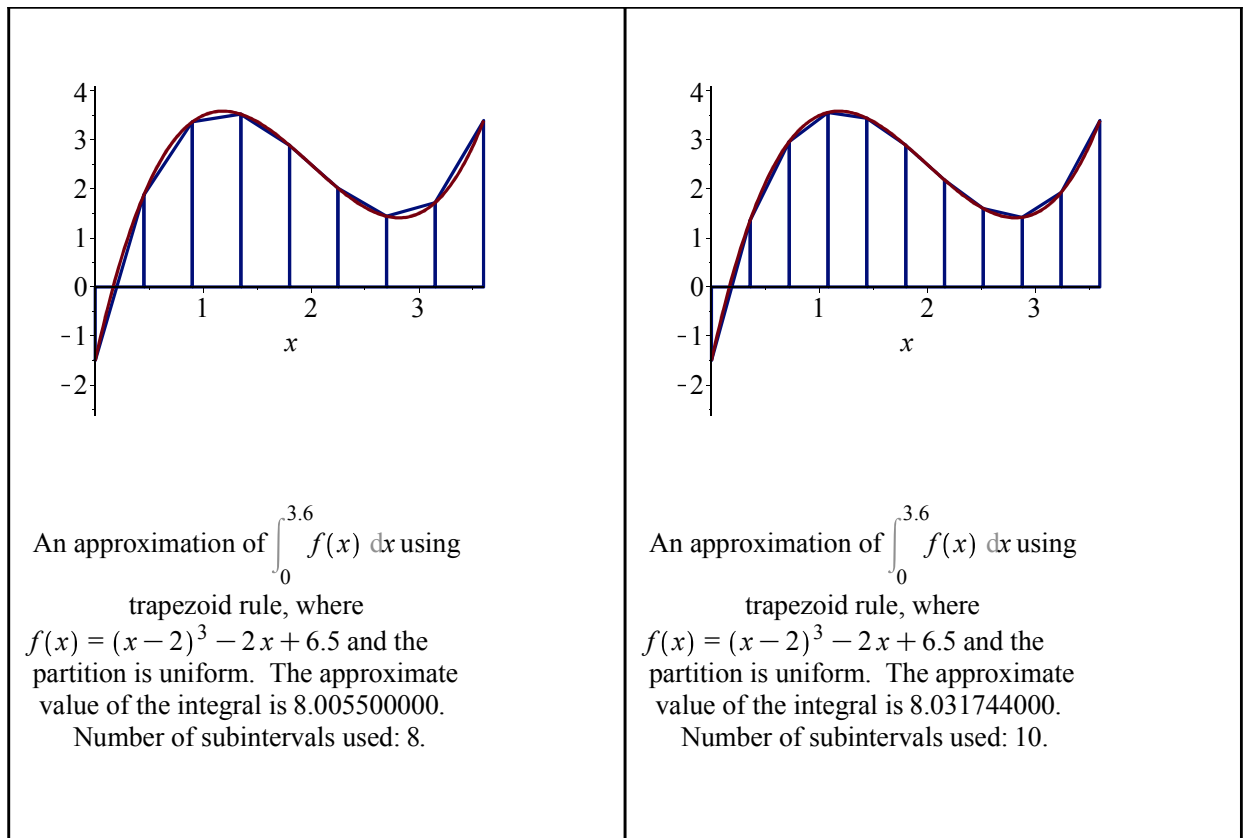
> `abra := Matrix(2, 2, [seq(ApproximateInt(f(x), x=0..3.6, method=trapezoid, output=plot, partition=2*i), i=2..5)]) : plots[display](abra)`



An approximation of $\int_0^{3.6} f(x) \, dx$ using trapezoid rule, where $f(x) = (x-2)^3 - 2x + 6.5$ and the partition is uniform. The approximate value of the integral is 7.786800000. Number of subintervals used: 4.



An approximation of $\int_0^{3.6} f(x) \, dx$ using trapezoid rule, where $f(x) = (x-2)^3 - 2x + 6.5$ and the partition is uniform. The approximate value of the integral is 7.948800000. Number of subintervals used: 6.



6. Példa Összegzés diszkrét pontokra. Legyenek adottak a következő mérési adatok $X := [1, 2, 3, 5]$, $Y := [3, 1, 5, 2]$.

a; Ábrázoljuk a görbepontokat, majd trapézmódszerrel adjuk meg az integrál értékét.

b; Illesszünk harmadfokú polinomot a pontokra, és adjuk meg a polinom integrálját az $[1, 5]$ intervallumon. Vizsgáljuk a két integrál eltérését.

c; A legkisebb négyzetek módszerével illesszünk egyenest a pontokra, és képezzük ennek az integrálját az adott intervallumon.

Megoldás

a;

> *restart*; $X := [1, 2, 3, 5]$; $Y := [3, 1, 5, 2]$; $n := \text{nops}(X)$; $h := \frac{X_n - X_1}{n}$:

> $\text{integral} := \frac{h(Y_1 + Y_n)}{2}$: **for** i **from** 2 **to** $n - 1$ **do** $\text{integral} := \text{integral} + h Y_i$ **end do** :

> $\text{kozelito_integral_trapéz_modszerral} := \text{evalf}(\text{integral})$

$\text{kozelito_integral_trapéz_modszerral} := 8.500000000$

> *with*(*plottools*) : *with*(*plots*) :

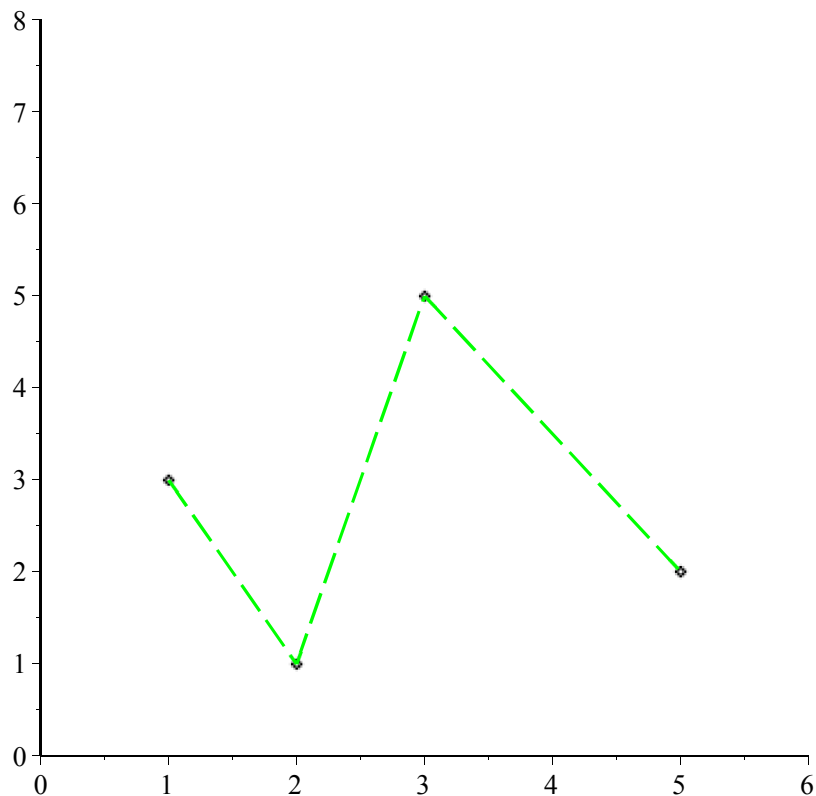
$\text{pontok} := \text{plot}([seq([X_i, Y_i], i = 1..n)], \text{style} = \text{point}, \text{symbol} = \text{diamond}, \text{color} = \text{black})$:

$\text{line1} := \text{display}(\text{line}([X_1, Y_1], [X_2, Y_2], \text{color} = \text{green}, \text{linestyle} = \text{dash}))$: $\text{line2} :=$

$\text{display}(\text{line}([X_2, Y_2], [X_3, Y_3], \text{color} = \text{green}, \text{linestyle} = \text{dash}))$: $\text{line3} :=$

$\text{display}(\text{line}([X_3, Y_3], [X_4, Y_4], \text{color} = \text{green}, \text{linestyle} = \text{dash}))$:

> $\text{plots}[\text{display}]([\text{pontok}, \text{line1}, \text{line2}, \text{line3}], \text{view} = [0..6, 0..8])$



b;

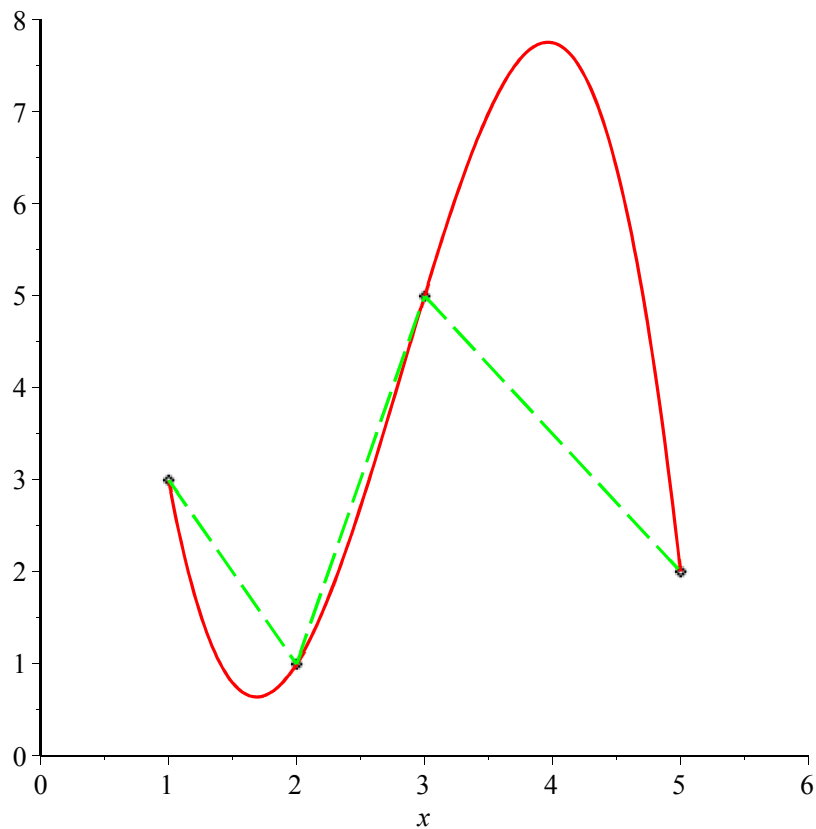
> with(CurveFitting) : harmadfoku_polinom := PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = power)

$$\text{harmadfoku_polinom} := -\frac{29}{24}x^3 + \frac{41}{4}x^2 - \frac{583}{24}x + \frac{73}{4}$$

$$\begin{aligned} > \int_{X_1}^{X_n} \text{harmadfoku_polinom} \, dx = \text{evalf} \left(\int_{X_1}^{X_n} \text{harmadfoku_polinom} \, dx \right) \\ & \int_1^5 \left(-\frac{29}{24}x^3 + \frac{41}{4}x^2 - \frac{583}{24}x + \frac{73}{4} \right) dx = 16.66666667 \end{aligned}$$

Majdnem kétszeresét kaptuk a trapézmódszer eredményének! Nézzük meg grafikusan az eltérés okát.

> graf := plot(PolynomialInterpolation(X, Y, x), x = X₁..X_n, color = red) :
plots[display]([pontok, graf, line1, line2, line3], view = [0..6, 0..8])



A polinom nagyon kileng, ez okozza a nagy eltérést.

c;

Illesszünk a legkisebb négyzetek módszerével egyenest!

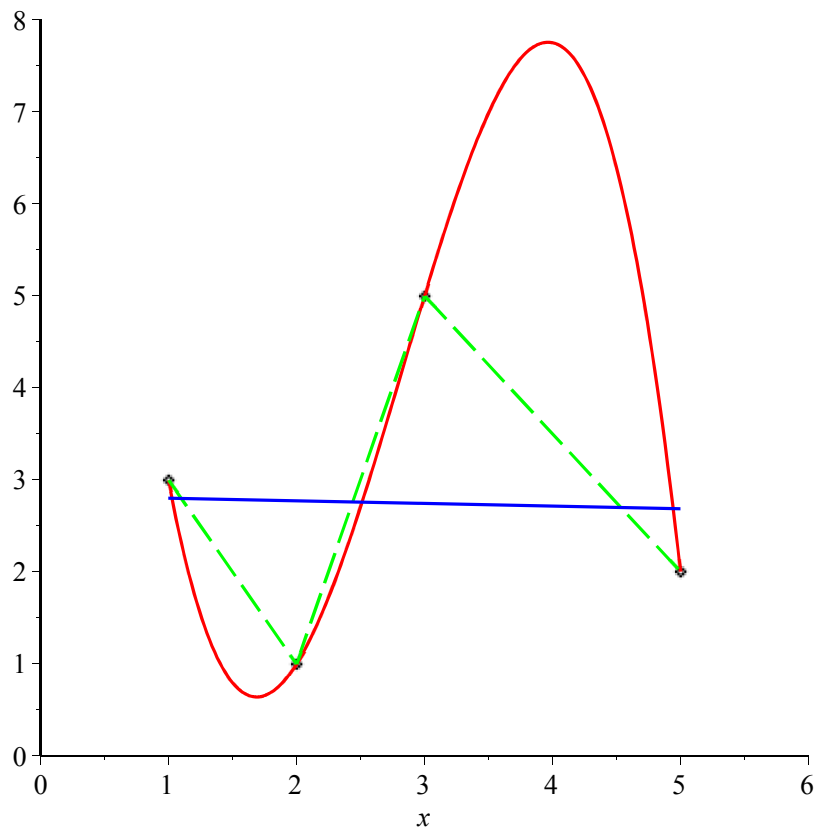
> `egyenes := LeastSquares(X, Y, x, curve = a x + b); Int(egyenes, x = 1 .. 5)`
`= evalf(int(egyenes, x = 1 .. 5));`

$$egyenes := \frac{99}{35} - \frac{1}{35} x$$

$$\int_1^5 \left(\frac{99}{35} - \frac{1}{35} x \right) dx = 10.97142857$$

Ez az érték már közelebb van a trapézmódszerrel kapott értékhez.

> `egyenesabra := plot(egyenes, x = 1 .. 5, color = blue) : plots[display]([pontok, graf,
line1, line2, line3, egyenesabra], view = [0 .. 6, 0 .. 8])`



Az eltérések négyzetösszege

$$\begin{aligned} > y := \text{egyenes} : \sum_{k=1}^4 (\text{subs}(x = X_k, y) - Y_k)^2 = \text{evalf}\left(\sum_{k=1}^4 (\text{subs}(x = X_k, y) - Y_k)^2\right) \\ & \sum_{k=1}^4 \left(\frac{99}{35} - \frac{1}{35} X_k - Y_k\right)^2 = 8.742857143 \end{aligned}$$

Tanulság: diszkrét pontok esetén az integrált ne a polinom integrálásával határozzuk meg!

▼ 9. 2. 2. Integrálás Simpson módszerrel

Az eljárás lényege, hogy egymás utáni 3-3 mérési pontra másodfokú görbéket illeszt, és ezeket integrálja. Páratlan számú pont (páros számú intervallum) esetén alkalmazható. Legyen adott az f függvény az $[a, b]$ intervallumban. Először osszuk fel az intervallumot két egyenlő részre, és az így kapott 3 pontra illesszünk másodfokú polinomot, majd ezt a polinomot integráljuk,

> `restart; with(CurveFitting) : with(Student[CalculusI]) : X := [a,  $\frac{a+b}{2}$ , b] :`

$$Y := \left[f(a), f\left(\frac{a+b}{2}\right), f(b) \right] :$$

> `polinom := PolynomialInterpolation(X, Y, x, form = Lagrange)`

$$\begin{aligned}
\text{polinom} &:= \frac{f(a) \left(x - \frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b\right) (x-b)}{\left(\frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b\right) (a-b)} + \frac{f\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right) (x-a) (x-b)}{\left(-\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right) \left(\frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b\right)} \\
&+ \frac{f(b) (x-a) \left(x - \frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b\right)}{(b-a) \left(-\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right)} \\
> \int_a^b f(x) \, dx &= \text{factor} \left(\text{simplify} \left(\int_a^b \text{polinom} \, dx \right) \right) \\
&\int_a^b f(x) \, dx = -\frac{1}{6} (a-b) \left(4f\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right) + f(b) + f(a) \right)
\end{aligned}$$

Ezt az eljárást lehet minden $[x_{i-1}, x_i]$ intervallumra megismételni. Az intervalumot $n=2m$ egyenlő részre osztjuk, ahol az egyes részintervallumok hossza $h = \frac{b-a}{n}$ és a pontok száma $2n+1$ ($n+1$ alappont és az n darab részintervallum belső pontjai). Így adódik a

$$\begin{aligned}
&\text{Simpson formula: } \int_{x_0}^{x_n} f(x) \, dx \approx \\
&\frac{h \left(f(x_0) + 2 \left(\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right) + 4 \left(\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) \right) + f(x_n) \right)}{6}
\end{aligned}$$

7. Példa Számítsuk az $f(x) = e^{-x^2}$ függvény $[0,2]$ intervallumon vett integrálját a Simpson formula segítségével, az intervallum 4 részre osztása esetén.

Megoldás

$$\begin{aligned}
> f &:= x \rightarrow e^{-x^2} : \\
> n &:= 4 : a := 0 : b := 2 : h := (b-a)/n :
\end{aligned}$$

A Simpson formula kiszámítására írhatunk rövid ciklust is, ahol az első és az utolsó tagot, valamint a $4f\left(a + \frac{h}{2}\right)$ értéket külön ki kell számolni.

$$> \text{integral} := \frac{1}{6} h \left(f(a) + f(b) + 4f\left(a + \frac{1}{2}h\right) \right) :$$

for i **to** $n-1$ **do**

$$\text{integral} := \text{integral} + \frac{1}{6} h \left(2f(a + h i) + 4f\left(a + h \left(i + \frac{1}{2}\right)\right) \right)$$

end do:

$$> \text{kozelito_integral_simpson_modszerral} := \text{integral}$$

$$\begin{aligned}
\text{kozelito_integral_simpson_modszerral} &:= \frac{1}{12} + \frac{1}{12} e^{-4} + \frac{1}{3} e^{-\frac{1}{16}} + \frac{1}{6} e^{-\frac{1}{4}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{9}{16}} \\
&+ \frac{1}{6} e^{-1} + \frac{1}{3} e^{-\frac{25}{16}} + \frac{1}{6} e^{-\frac{9}{4}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{49}{16}}
\end{aligned}$$

> `integral_ertek := evalf(integral, 10)`

`integral_ertek := 0.8820655104`

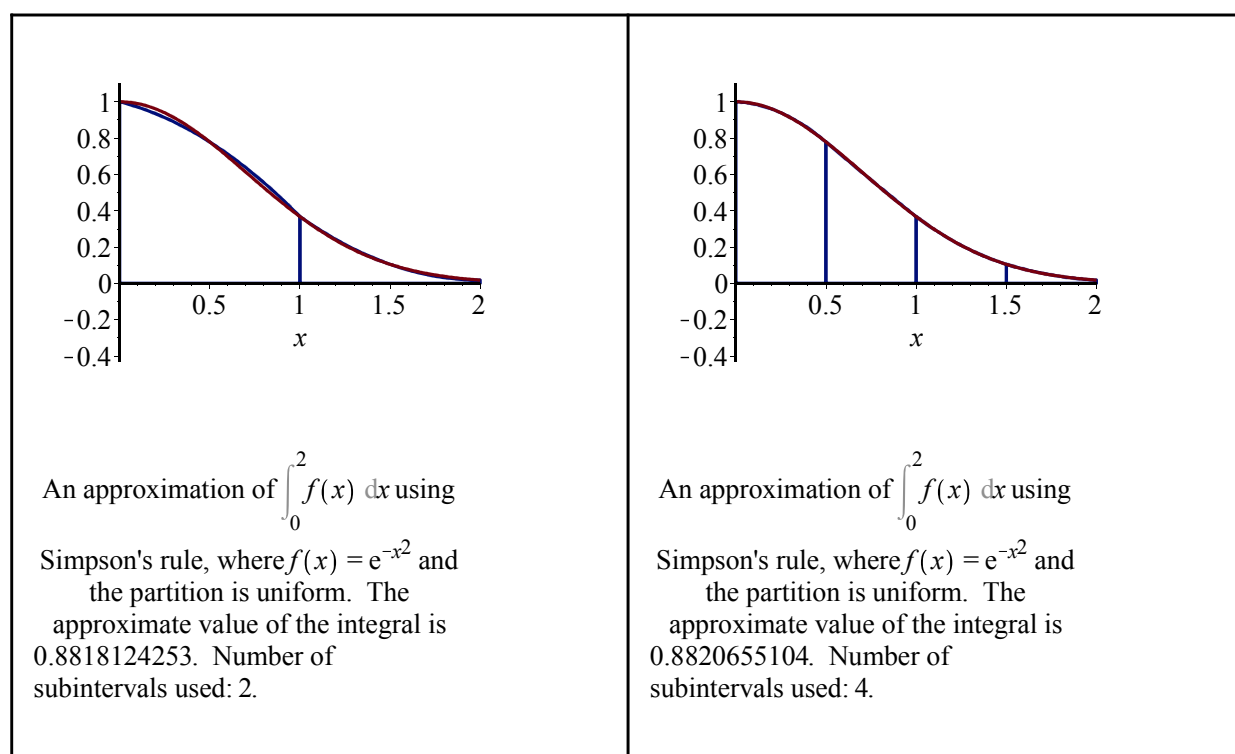
A `Student[CalculusI]` csomag `ApproximateInt method=simpson` opciójával is kiszámíthatjuk a fenti integrált

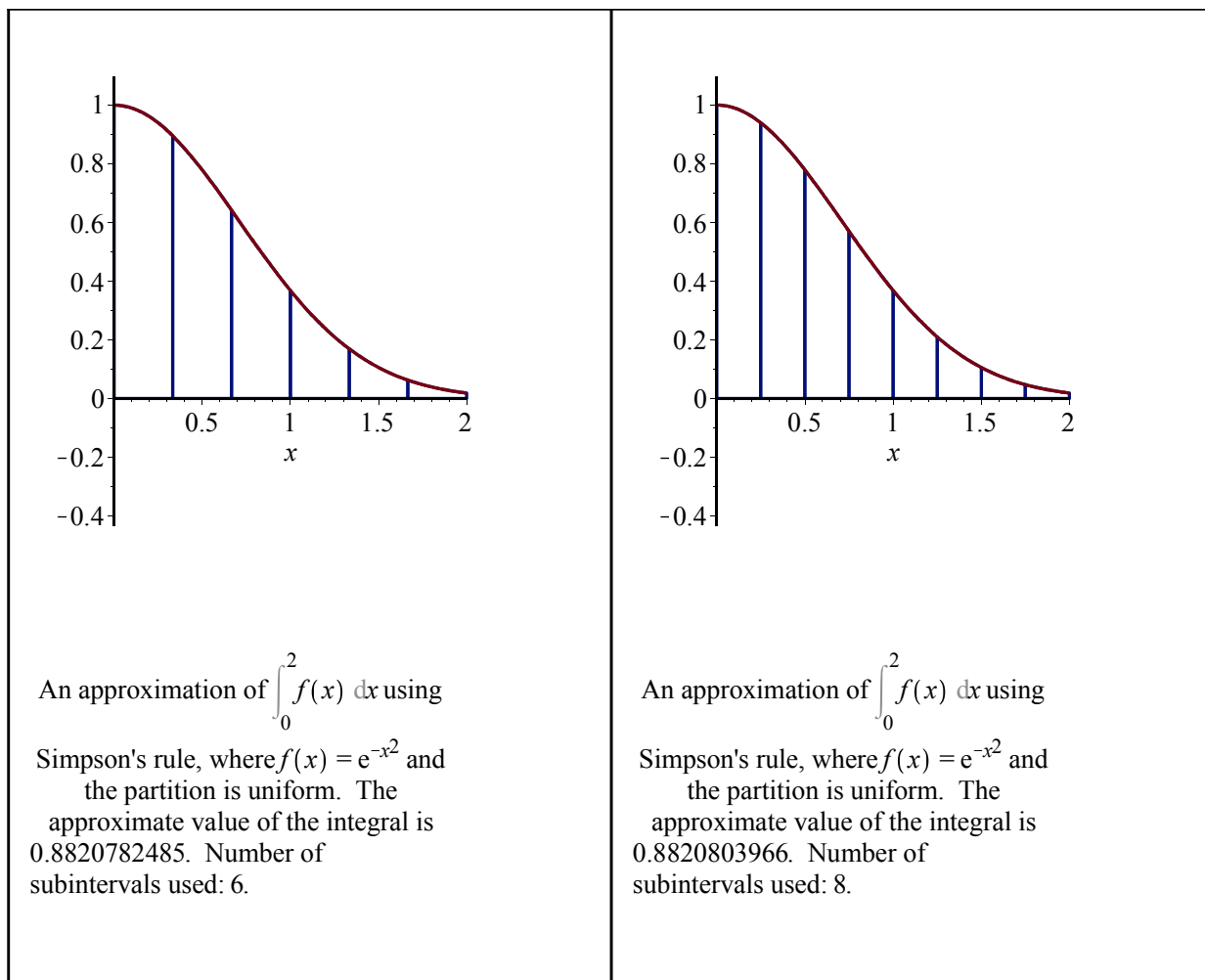
> `ApproximateInt(f(x), x=0..2, method=simpson, partition=4)`

$$\frac{1}{12} + \frac{1}{12} e^{-4} + \frac{1}{3} e^{-\frac{1}{16}} + \frac{1}{6} e^{-\frac{1}{4}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{9}{16}} + \frac{1}{6} e^{-1} + \frac{1}{3} e^{-\frac{25}{16}} + \frac{1}{6} e^{-\frac{9}{4}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{49}{16}}$$

Természetesen az `output=plot`, illetve az `output=animation` opció itt is működik.

> `Matrix(2, 2, [seq( ApproximateInt(f(x), x=0..2, method=simpson, output=plot, partition=2·i), i=1..4)]) : plots[display](%)`





A Simpson módszeres közelítés hasonlít a másodfokú spline közelítéshez, csak ott kicsit más feltételeket fogalmaztunk meg. Nézzük meg, mi történik ha a függvényt a négy osztópont ismeretében a másodfokú spline-nal közelítjük és azt integráljuk.

```
> f:=x→e-x2 : a:=0 : b:=4 :
> n:=4 : X:= [seq( (b-a) i / n, i=0..n )]; Y:=map(f,X)
> spline2:=CurveFitting[Spline](X,Y,x,degree=2, endpoints='natural') :
integral_spline:=∫ab f(x) dx=evalf( factor( simplify( ∫ab spline2 dx ) ) )
X:= [0, 1, 2, 3, 4]
Y:= [1, e-1, e-4, e-9, e-16]
integral_spline:=∫04 e-x2 dx=0.8863185462
```

Az eltérés:

```
> elteres:=|rhs(integral_spline) - integral_ertek|
elteres:=0.0042530358
```

Ez csak a negyedik jegyben okoz eltérést, pedig az intervallumot csak 4 részre osztottuk!

▼ 9. 2. 3. Integrálás sorfejtéssel

Ha nem ismert a függvény primitív függvénye, de hatványsorba fejthető és a sor tagonként integrálható, akkor a függvény határozott integrálját közelíthetjük a hatványsor részletösszegeinek tagonkénti integrálásával.

8. Példa: Határozzuk meg hatványsor felhasználásával az $\int_0^1 \sin(x^2) dx$ integrál értékét 0.00001 pontossággal! Mennyi tagot kell számolni a sorfejtésben?

Megoldás

Nézzük meg, milyen választ kapunk, ha a függvény primitív függvényét kérdezzük:

> *restart*; $f := x \rightarrow \sin(x^2) : a := 0 : b := 1 : \int f(x) dx = \int f(x) dx$

$$\int \sin(x^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{2} \sqrt{\pi} \operatorname{FresnelS}\left(\frac{\sqrt{2} x}{\sqrt{\pi}}\right)$$

Tehát a függvénynek nem létezik primitív függvénye zárt alakban. Képezzük a függvény 0 körüli 20. Taylor polinomját, majd számítsuk ennek a $[0, 1]$ intervallumon vett integrálját. Hasonlítsuk ezt össze a Maple beépített numerikus számításával kapott értékkel.

> *poli := convert(series(f(x), x=0, 20), polynom); kozelites_polinommal := Int(f(x), x=0..1) = evalf(int(poli, x=0..1), 10); kozelites_Fresnel_fuggvennyel := Int(f(x), x=0..1) = evalf(int(f(x), x=0..1), 10);*

$$poli := x^2 - \frac{1}{6} x^6 + \frac{1}{120} x^{10} - \frac{1}{5040} x^{14} + \frac{1}{362880} x^{18}$$

$$kozelites_polinommal := \int_0^1 \sin(x^2) dx = 0.3102683028$$

$$kozelites_Fresnel_fuggvennyel := \int_0^1 \sin(x^2) dx = 0.3102683013$$

Az eltérés $1.5 \cdot 10^{-9}$, ez gyakorlatilag elhanyagolható. Érdekesebb kérdés, hogy a numerikus számítás során mennyi tagot kell figyelembe venni, hogy az elkövetett hiba egy előre megadott ε -nál kisebb legyen?

Az alternáló sorokra ismert, hogy ha a $\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} a_n$ sorban minden n -re igaz, hogy $0 < a_n$;

$|a_{n+1}| \leq |a_n|$ és $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0$, akkor az $S_n = a_1 - a_2 + \dots + (-1)^{n+1} a_n$ részletösszeg az a_{n+1} abszolút értékénél kisebb hibával közelíti meg a sor összegét. Azaz az elkövetett hiba kisebb az első elhagyott tag abszolút értékénél, vagyis $|S - S_n| < \varepsilon$.

A becsléshez fel kell írni a hatványsor primitív függvényét zárt alakban.

> $\int poli dx$;

$$\frac{1}{3} x^3 - \frac{1}{42} x^7 + \frac{1}{1320} x^{11} - \frac{1}{75600} x^{15} + \frac{1}{6894720} x^{19}$$

> $altalanos_tag := n \rightarrow \frac{(-1)^n x^{4n+3}}{(2n+1)! (4n+3)} :$

A határozott integrál az ebből $x=1$ helyen képzett $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)! (4n+3)}$ számsor összege.

Írjunk ciklust, ami adott hibáig kiszámolja a számsor tagjait, a sor részletösszegének a sorösszegetől való eltérését.

> *restart*; $a := n \rightarrow \frac{(-1)^n}{(2n+1)! (4n+3)} : \varepsilon := 0.00001 : tag := 100 :$

```

> for k to 100 while evalf( $\epsilon$ )  $\leq$  tag do
    tag := evalf(|a(k+1)|);
    osszeg := evalf( $\left| \sum_{n=0}^{\infty} a(n) \right|$ , 10);
    reszletosszeg := evalf( $\left| \sum_{n=0}^k a(n) \right|$ );
    kulonbseg := |reszletosszeg - osszeg|
end do :
> print(`a`, k, `tag =`, tag)
> print(k-1, `részetösszeg =`, reszletosszeg)
> print(valódi összegtől való eltérése =, kulonbseg)
     $\epsilon := 0.00001$ 
    a, 4, `tag =, 1.450385222 10-7
    3, `részetösszeg =, 0.3102681578
    valódi összegtől való eltérése =, 1.436 10-7

```

▼ 9. 2. 4. Többváltozós függvény integrálása

Többváltozó integrálok numerikus számításához hasonló módszerekkel juthatunk, mint amiket az egyváltozós függvények esetén megismertünk. Itt most csak a

Student[MultivariateCalculus] csomag *ApproximateInt* parancsának kétváltozós esetre való alkalmazására szorítkozunk. A közelítő integrált az alsó, felső, középső közelítő összegekkel, illetve a Riemann-féle integrálközelítő összegekkel lehet kiszámítani. Az *output=plot*, illetve *output=animation* opciók jól használhatók a kettős integrál fogalmának megértéséhez is.

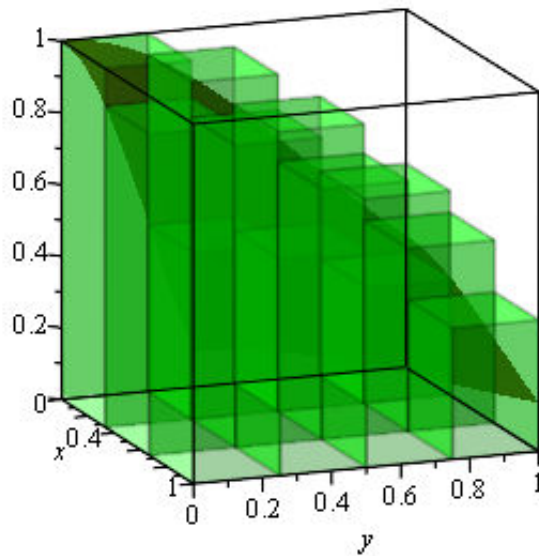
9. Példa Határozzuk meg az $f(x,y)=e^{-x^2-y^2}$ kétváltozós függvény $x \in [0,1]$, $y \in [0,1]$ tartományban vett kettősintegrálját közelítő módszerrel.

Megoldás

```

> with(Student[MultivariateCalculus]) :
    Int(Int( $e^{-x^2-y^2}$ , x=0..1), y=0..1) = ApproximateInt( $e^{-x^2-y^2}$ , x=0..1, y=0..1)
     $\int_0^1 \int_0^1 e^{-x^2-y^2} dx dy = 0.5595836687$ 
> ApproximateInt( $e^{-x^2-y^2}$ , x=0..1, y=0..1, output=plot, method=upper, partition=[3,
    4], axes=box, orientation=[-45, 75, 0], prismoptions=[color=green], orientation
    =[-21, 76, 0])

```

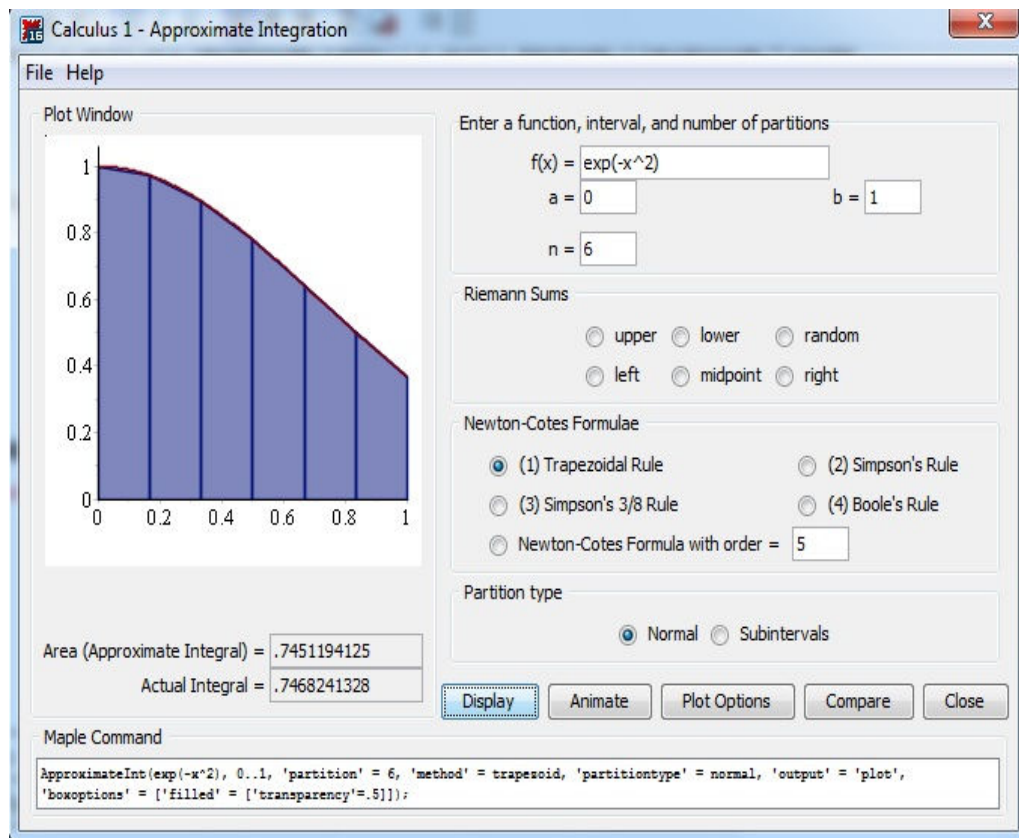


Using an upper Riemann sum, an approximation of $\int_0^1 \int_0^1 f(x, y) \, dy \, dx$,
 where $f(x, y) = e^{-x^2 - y^2}$. Actual value: 0.55775. Approximate value:
 0.69487. Grid: 3×4

▼ 9. 3. Beépített Maple interaktív lehetőségek

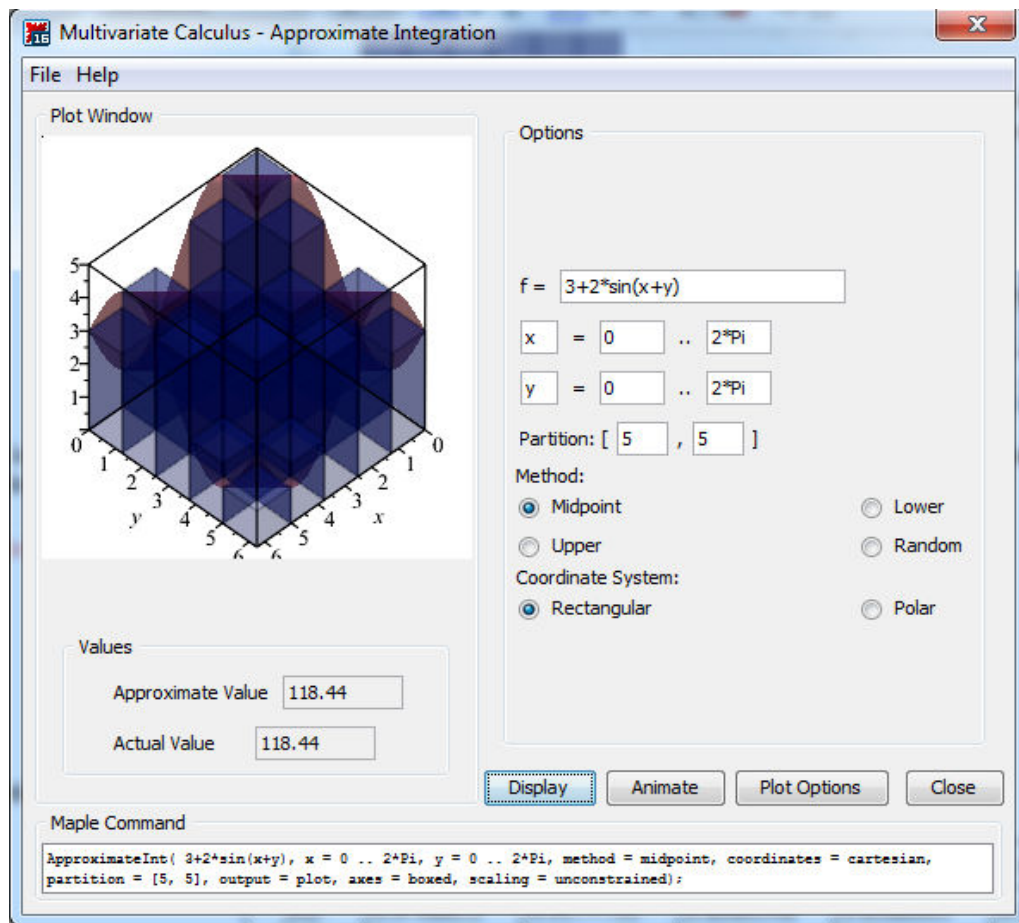
Egyváltozós közelítő integrálás: Eszközök->Oktatók(T)->Kalkulus- Egyváltozós (c) - Közelítő integrálás többféle numerikus integrálást tesz lehetővé. A függvényt, az intervallumot és az osztáspontok számát kell megadni.

> `Student[CalculusI]ApproximateIntTutor( )`



Többváltozós közelítő integrálás: Eszközök->Oktatók(T)->Calkulus- Multivariable(M) - Közelítő integrálás szintén többféle kétváltozós numerikus integrálást tesz lehetővé. A függvényt, az intervallumokat és mindkét intervallumra az osztáspontok számát kell megadni.

> *Student[MultivariateCalculus]ApproximateIntTutor()*



▼ 9. 4. Feladatok

1. Feladat Adottak a következő függvényértékek:

x	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$f(x)$	0.979865 2	0.917771 0	0.808034 8	0.638609 3	0.384373 5

Adja meg az $f'(0.6)$ értékét a; 3 pontból, b; 5 pontból c; a legkisebb négyzetekkel görbét illesztve a pontokra.

2. Feladat Az előző feladat értékeihez számítsa ki az $f''(0.6)$ értéket, negyedfokú Lagrange polinomos illesztéssel.

3. Feladat Legyen $f(x) = 3 \cdot x \cdot e^x - \cos x$. A következő függvényértékek ismertek:

x	1.20	1.29	1.30	1.31	1.40
$f(x)$	11.5900 6	13.7817 6	14.0427 6	14.30741	16.86187

- a; Számítsa ki numerikusan az $f''(0.6)$ értékét, hasonlítsa össze a pontos értékkel.
b; Ha $h=0.1$, mekkora az elkövetett hiba az $f''(0.6)$ számításakor?

4. Feladat A következő táblázattal adottak egy függvény értékei

x	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8
$f(x)$	1.543	1.668	1.811	1.971	2.151	2.352	2.577	2.828	3.107

a; Adja meg az $\int_{1.0}^{1.8} f(x) dx$ értékét trapézsabállyal $h=0.1$, $h=0.2$ választása esetén.

b; Alkalmazza a Simpson szabályt az integrál meghatározására.

5. Feladat Számítsa ki hatványsorba fejtés segítségével a következő integrálok értékeit:

a; $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$

b; $\int_0^1 \frac{e^x}{x} dx$

c; $\int_0^1 \frac{\arctan x}{x} dx$

6. Feladat Az f az úgynevezett illékonyság ideális gázok esetén megegyezik a P nyomással, míg valódi gázok esetén $\ln \frac{f}{P} = \int_0^P \frac{C-1}{P} dP$, ahol C a kísérletileg meghatározott összenyomhatósági faktor.

P (Hgmm)	1	10	20	40	60	80	120	160	250	400
C	0.9940	0.9370	0.8683	0.7043	0.4515	0.3429	0.4259	0.5252	0.7468	1.0980

Számítsa ki a különböző P értékekhez tartozó f értékeit.

7. Feladat Az m tömegű test úszik a R viszkozitású folyadékban, v sebességgel. A t idő, R viszkozitás és v sebesség közötti függvénykapcsolat:

$$t = \int_{v(t_0)}^{v(t)} \frac{m}{R(u)} du.$$

Tételezzük fel, hogy $R(v) = -v\sqrt{v}$. Ha $m=10$ kg, $v(0)=10$ m/sec, számítsuk ki, mennyi idő alatt lassul le tömegpont 5 m/sec sebességre, ha

- a; a trapéz és a Simpson szabályt használjuk $h=0.25$.
b; pontos értékkel számolunk.

▼ 9. 5. Ellenőrző kérdések

1. Mikor használjuk a numerikus deriválást?
2. Milyen kapcsolatban van az interpoláció és a numerikus deriválás?
3. Milyen kapcsolatban van a Taylor polinom a numerikus deriválttal?
4. A trapézmódszer hogyan közelíti a határozott integrált?
5. A Simpson módszer hogyan közelíti a határozott integrált?