



Metode Numerice – Lucrarea nr. 9

INTEGRAREA ȘI DERIVAREA NUMERICĂ A FUNCȚIILOR REALE

Modelul matematic și metodele numerice utilizate

Cuadratura este o procedură numerică prin care valoarea unei integrale definite $\int_a^b f(x)dx$ este aproximată folosind informații despre integrând numai în anumite puncte (de exemplu se cunosc valorile funcției în puncte pe baza unor măsurători experimentale). Pentru rezolvarea problemelor enunțate se pot utiliza următoarele metode de integrare numerică:

- Metode de integrare clasice de tip Newton-Côtes (metoda trapezelor, metoda Simpson);
- Metode de integrare generalizate de tip Newton-Côtes (metoda trapezelor generalizată, metoda Simpson generalizată);
- Metode de integrare de tip Romberg;
- Metode de integrare clasice de tip Gauss.

Metode de integrare de tip Newton-Cotes

Se consideră funcția $f:[a,b] \rightarrow R$ continuă pe intervalul $[a,b]$ pentru care se dorește aproximarea numerică a valorii integralei $I = \int_a^b f(x)dx$ atunci când integrala nu poate fi direct calculabilă sau funcția este cunoscută doar în cele $n+1$ puncte distincte, adică în nodurile $x_i, y_i = f(x_i) \quad i = 0, \dots, n, \quad x_i \in [a, b]$, aceste situații fiind caracteristice și aplicațiilor din ingineria electrică. Se utilizează aproximarea funcției $f(x)$ prin polinoame de interpolare de tip Lagrange $f(x) = L_n(x) + R_n(x)$, punctele date în intervalul $[a,b]$ fiind echidistante, cu pasul de discretizare $h = x_{i+1} - x_i$, primul și ultimul punct corespunzând capetelor intervalului $[a,b]$,

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b, \quad x_k = a + k \cdot h, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Formula de cuadratură (integrare numerică) Newton-Côtes este:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx = \int_a^b \left[\sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot l_i(x) \right] dx + \int_a^b \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \right] dx \quad (1)$$

unde: ξ este un punct intermediar din cel mai mic interval care conține nodurile x_0, x_1, \dots, x_n și $\xi(x) \in [a, b]$ pentru orice x .



În continuare se vor considera cazurile în care formulele se deduc utilizând funcțiile Lagrange de interpolare de ordinul I (formula trapezului) și de ordinul II (formula lui Simpson) cu nodurile echidistante. Aceste formule au fost numite de Gautschi ca și „caii de bătaie” ai integrării numerice ele făcându-și foarte bine treaba atunci când intervalul de integrare este mărginit și integrandul este neproblematic.

Metoda de integrare a trapezelor

Formula clasică a trapezelor rezultă prin particularizarea cea mai simplă a versiunii clasice a metodei Newton-Côtes, pentru $n=1$. Deci este o aplicație directă a interpolării liniare Lagrange în două puncte. Se cunoaște funcția în două noduri $x_0 = a, x_1 = b \Rightarrow f(x_0), f(x_1); h = (b - a)$, și se dorește calculul aproximativ al integralei definite $\int_a^b f(x)dx$, utilizând polinomul liniar de interpolare Lagrange adică scriind funcția $f(x) = L_1(x) + R_1(x)$. Deci integrala calculată cu formula trapezului este:

$$\underbrace{\int_a^b f(x)dx}_{I_{Trapez}(f)} = \underbrace{\int_a^b L_1(x)dx}_{I_{Trapez}(L_1)} + \underbrace{\int_a^b R_1(x)dx}_{Eroare_{Trapez}} \quad (2)$$

unde: $x_0 = a < \xi < x_1 = b$ restul și polinomul de interpolare Lagrange de ordinul I sunt:

$$R_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!} (x-a)(x-b); L_1(x) = \sum_{i=0}^1 l_i(x) \cdot f(x_i) \underset{\substack{x_0=a \\ x_1=b}}{=} \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b) \quad (3)$$

Deci integrând polinomul Lagrange și restul se obține formula trapezului:

$$I_{Trapez}(f) = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \cdot [f(a) + f(b)] - \underbrace{\frac{(b-a)^3}{12} \cdot f''(\xi)}_{Eroare_{Trapez}}; \quad (4)$$

Dacă există $M_2 > 0$ astfel încât $|f''(x)| \leq M_2$ pentru orice $x \in [a, b]$ atunci are loc relația:

$$|Eroare_{Trapez}| \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{(b-a)^3}{6} \cdot M_2; \quad (5)$$

Metoda trapezelor generalizată

Pentru creșterea preciziei calculului, intervalul $[a, b]$ poate fi divizat în n subintervale egale: $i = \overline{1, n}, a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b, x_i = a + i \cdot h, h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n} > 0$, pe care se aplică repetat formula trapezului, adică:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \right); \quad (6)$$

Deci aplicând formula trapezului pe n subintervale se obține formula trapezului generalizată pentru $x_0 = a; x_n = b$, iar geometric înseamnă că funcția $f(x)$ s-a aproximat cu n segmente de



dreaptă între două noduri succesive de abscise x_i, x_{i+1} adică integrala rezultă prin însumarea ariilor tuturor celor n trapeze care se formează între punctele a și b .

Deci formula trapezelor generalizată cu $\xi \in (a, b)$, este:

$$I_{TrapezGen}(f) = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2n} \left[f(a) + f(b) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right] - \underbrace{\frac{(b-a)^3}{12n^2} f'''(\xi)}_{Eroare_{TrapezGen}}; \quad (7)$$

Dacă există $M_2 > 0$ astfel încât $|f'''(x)| \leq M_2$ pentru orice $x \in [a, b]$ atunci eroarea pentru metoda generalizată:

$$|Eroare_{TrapezGen}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2 = \frac{1}{12} \cdot \frac{h^3}{n^3} \cdot M_2; \quad (8)$$

Metoda de integrare Simpson

Formula clasică a lui Simpson rezultă prin particularizarea versiunii generale a metodei Newton-Côtes, pentru $n=2$. Se cunosc valorile funcției $f(x)$ în trei noduri echidistante:

$$x_0 = a, \quad x_1 = c = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b \Rightarrow f(x_0), f(x_1), f(x_2); \quad (9)$$

$$x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 + 2h, \quad h = b - c = c - a = \frac{(b-a)}{2}$$

Iar polinomul de interpolare Lagrange de ordin doi este cel cu care se aproximează funcția de sub integrala definită, $f(x) = L_2(x) + R_2(x)$. Deci integrala definită va fi:

$$\underbrace{\int_a^b f(x)dx}_{I_{Simpson}(f)} = \underbrace{\int_a^b L_2(x)dx}_{I_{Simpson}(L_2)} + \underbrace{\int_a^b R_2(x)dx}_{Eroare_{Simpson}}; \quad (10)$$

unde $x_0 = a < \xi < x_1 = b$ restul și polinomul de interpolare Lagrange de ordin II sunt:

$$R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!} (x-a)(x-c)(x-b);$$

$$L_2(x) = \sum_{i=0}^2 l_i(x) \cdot f(x_i) \stackrel{x_0=a}{\underbrace{\frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)}}} f(a) + \underbrace{\frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)}}_{x_1=b} f(c) + \frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} f(b) \quad (11)$$

Deci formula lui Simpson se va scrie:

$$I_{Simpson}(f) = \int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)}{6} (f(a) + 4 \cdot f(c) + f(b)) - \underbrace{\frac{(b-a)^5}{2880} \cdot f'''(\xi)}_{Eroare_{Simpson}} \quad (12)$$

Dacă există $M_3 > 0$ astfel încât $|f'''(x)| \leq M_3$ pentru orice $x \in [a, b]$ atunci are loc relația:

$$|Eroare_{Simpson}| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \cdot M_3 \quad (13)$$

Metoda de integrare generalizată a lui Simpson pe perechi de subintervale

Formula generalizată a lui Simpson reprezintă aplicarea repetată a formulei clasice a lui Simpson pe m subintervale de lungime $2h$, obținute prin divizarea intervalului $[a, b]$ în $n=2m$ părți



egale, definite de punctele $x_i, i=0,1,2,\dots,n$ în care se cunosc valorile funcției $f(x)$. Cele m subintervale de forma $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, $i=1,2,\dots,m$ cu $x_0 = a, x_n = b$ și pasul de discretizare $h = \frac{(b-a)}{n}$. Aplicând pentru fiecare subinterval formula clasică a lui Simpson se obține:

$$I_{SimpsonGen}(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6m} \left[f(x_0) + f(x_{2m}) + 4 \cdot \sum_{k=1}^m f(x_{2k-1}) + 2 \cdot \sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k}) \right] - \underbrace{\frac{(b-a)^5}{2880 \cdot m^4} \cdot f^{(4)}(\xi)}_{Eroarea_{Simpson}} \quad (14)$$

Dacă presupunem că există $M_4 > 0$ astfel încât $|f^{(4)}(x)| \leq M_4$ pentru orice $x \in [a, b]$ atunci are loc relația:

$$|Eroarea_{SimpsonGen}| \leq \frac{(b-a)^5}{2880 \cdot m^4} \cdot M_4 \quad (15)$$

Derivarea numerică bazată pe polinomul de interpolare Lagrange

Derivata funcției f în punctul x_0 este:

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (16)$$

Această formulă ne dă o aproximație a derivatei funcției prin calcularea termenului $\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$ pentru valori ale lui h foarte mici, dar acest mod de calcul al derivatei comportă erori mari de calcul.

Specific acestei metode este înlocuirea derivatelor funcției $f : [a, b] \rightarrow R$ (derivabilă pe $[a, b]$ și a căror valori $y_i = f(x_i)$ sunt cunoscute în nodurile de interpolare x_0, \dots, x_n din $[a, b]$) cu cele ale polinomului de interpolare cu care se aproximează funcția.

De regulă se aproximează derivatele în punctele x_0, \dots, x_n (noduri) în care valoarea funcției este cunoscută, dar se pot utiliza și pentru alte puncte din intervalul $[a, b]$.

Pentru a obține formule de derivare generale aproximative se presupun $n+1$ noduri distincte x_0, x_1, \dots, x_n într-un interval I și funcția $f \in C^{n+1}(I)$ și conform formulei de interpolare Lagrange avem:

$$f(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x) \cdot f(x_k) + R_n(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x) \cdot f(x_k) + \frac{(x-x_0) \cdot \dots \cdot (x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x)) \quad (17)$$

pentru $\xi(x) \in I$. Derivând expresia funcției f este:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \sum_{k=0}^n \left[\frac{d(l_k(x))}{dx} \cdot f(x_k) \right] + \frac{d \left[\frac{(x-x_0) \cdot \dots \cdot (x-x_n)}{(n+1)!} \right]}{dx} f^{(n+1)}(\xi(x)) + \frac{(x-x_0) \cdot \dots \cdot (x-x_n)}{(n+1)!} \cdot \frac{d[f^{(n+1)}(\xi(x))]}{dx} \quad (18)$$



Apar probleme legate de estimarea erorii de trunchiere datorită necunoașterii termenului $\frac{d[f^{(n+1)}(\xi(x))]}{dx}$. În acest scop se alege x ca fiind unul dintre nodurile x_j în care funcția se cunoaște,

iar formula devine:

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^n \left[\frac{d(l_k(x_j))}{dx} \cdot f(x_k) \right] + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_j))}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n (x_j - x_k) \quad (19)$$

(formula de aproximare a derivatei pentru $n+1$ puncte)

Observație: Formula de aproximare a derivatei pentru trei puncte de evaluare devine foarte utilă dacă ele sunt echidistante: $x_1 = x_0 + h$; $x_2 = x_0 + 2h$, $h \neq 0$, se obțin formule pentru aproximarea derivatei în punctul x_0 :

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0) \quad (20)$$

unde: $x_0 < \xi_0 < x_0 + 2h$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_1) \quad (21)$$

unde: $x_0 - h < \xi_1 < x_0 + h$

Deși erorile în ambele formule de mai sus sunt de ordinul $O(h^2)$ totuși eroarea în relația a două este aproximativ jumătate din eroarea introdusă de prima relație. Asta pentru că relația a doua utilizează date din ambele părți a lui x_0 și prima relație numai dintr-o parte. Funcția f trebuie evaluată numai în două puncte dacă se utilizează relația a doua, și dacă se utilizează prima relație funcția trebuie evaluată în trei puncte.

Aproximarea derivatei utilizând prima formulă se utilizează în apropierea capetelor intervalului pentru că informațiile referitoare la f în afara intervalului nu sunt cunoscute.

Derivarea numerică utilizând dezvoltarea în serie Taylor

Metoda permite aproximarea valorilor derivatelor funcției în punctele $x_i \in [a, b]$, $i = \overline{1, n}$ în care valoarea funcției f este cunoscută. Se consideră cele $n+1$ puncte echidistante, $x_{i+1} = x_i + \alpha h$, echidistanța între noduri existând pentru cazul $\alpha=1$ adică pasul de discretizare este $h = x_{i+1} - x_i$.

Pornind de la dezvoltarea în serie Taylor a funcției f în jurul punctului x_i și neglijând termenii care urmează după cel care conține derivata de ordin II (f admite derivate cel puțin până la ordinul 3) se obține:

$$f(x) \cong f(x_i) + \frac{x-x_i}{1!} f'(x_i) + \frac{(x-x_i)^2}{2!} f''(x_i) + \underbrace{\frac{(x-x_i)^3}{3!} f'''(x_i + tx)}_{R_3 - \text{se neglijeaza}}, \quad t \in (0,1) \quad (21)$$



Derivând și particularizând relația pentru $x = x_{i+1}$ și $x = x_{i-1}$ apoi scăzând cele două relații obținute rezultă derivata de ordinul I $f'(x_i)$ iar adunând relațiile se determină derivata de ordin II $f''(x_i)$:

$$\begin{aligned} f'(x_i) &\cong \frac{1}{2h} [f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})] \\ f''(x_i) &\cong \frac{1}{h^2} [f(x_{i-1}) - 2 \cdot f(x_i) + f(x_{i+1})] \end{aligned} \quad , i = \overline{2, n-1} \quad (22)$$

În interpretarea geometrică, prin această relație pentru calculul aproximativ al primei derivate a unei funcții, se aproximează panta tangentei în punctul x_i la curba $y=f(x)$, cu panta corzii ce unește punctele $(x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i+1}, y_{i+1})$. Rezultatul pentru derivata a doua este numai orientativ el fiind afectat de erori importante.

În primul punct al domeniului pentru $i=1$, se folosește formula de derivare:

$$f'(x_1) = \frac{-3f(x_1) + 4f(x_2) - f(x_3)}{x_3 - x_1} \quad (23)$$

Iar în ultimul punct pentru $i=n$:

$$f'(x_n) = \frac{3f(x_n) - 4f(x_{n-1}) + f(x_{n-2})}{x_n - x_{n-2}} \quad (24)$$

Însă aceste formule sunt sensibil mai puțin precise și mai puțin fundamentale decât formula generală, acesta fiind și motivul pentru ca în punctele extreme ale domeniului să nu se calculeze derivata, dacă nu este neapărat necesar (dacă nu se cere în concluzia aplicației).

Eroarea de trunchiere la calculul primei derivate a funcției în punctul de abscisă x_i se poate aprecia utilizând dezvoltarea în serie Taylor cu 4 termeni:

$$\text{Eroarea} = \frac{h^2 (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))}{12} = \frac{h^2 (f'''(\xi))}{6} \quad (25)$$

unde: $x_{i-1} < \xi < x_{i+1}$ astfel încât $f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) = 2f'''(\xi)$.

Eroarea se micșorează odată cu reducerea pasului h adică a diferenței dintre abscisele a două noduri consecutive, dar totuși prin micșorarea distanței h poate duce și la reducerea diferenței $f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})$ ceea ce ar putea duce la creșterea erorii de rotunjire.

Dacă nodurile nu sunt echidistante adică $x_{i+1} = x_i + \alpha h$, $\alpha \neq 1$ se obține:

$$\begin{aligned} f'(x_i) &\cong \frac{1}{(\alpha+1)h} [f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})] \\ f''(x_i) &\cong \frac{1}{h^2} \frac{2}{\alpha(\alpha+1)} [\alpha f(x_{i-1}) - (1+\alpha)f(x_i) + f(x_{i+1})] \end{aligned} \quad (26)$$

Pentru derivatele de ordin mai mare decât 2 se procedează asemănător, calculele fiind mai complicate. De exemplu pentru ordinul 3 se reține în dezvoltarea Taylor încă un termen și se obține:

$$f'''(x_i) \cong \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{2h^3} \quad (27)$$



Se observă că toate relațiile conțin puncte aflate de ambele părți ale lui x_i , fiind centrale. Se pot deduce și relații unilaterale care utilizează puncte aflate numai de o parte sau alta a lui x_i mai puțin precise decât cele centrale.

Derivarea numerică poate genera erori mari datorită imposibilității reducerii pasului de discretizare h sub o anumită valoare limită, determinată bineînțeles și de erorile de rotunjire.

Derivarea numerică este o operație critică și de aceea este bine să fie evitată pe cât posibil, deoarece chiar dacă aproximanta este bună, nu rezultă că derivata aproximantei este o aproximație bună a derivatei. Deci derivata polinomului de interpolare care este panta tangentei la graficul polinomului în punctul x_0 , poate să difere considerabil în mărime de derivata funcției pe care o aproximează. Aceste diferențe cresc foarte mult dacă derivatele sunt de ordin superior.

Formulele de derivare numerică sunt foarte utile pentru deducerea unor metode numerice, în special pentru ecuații diferențiale ordinare și ecuații cu derivate parțiale.