Derivare numerică. Metode Newton-Cotes.

Colaboratori: Andrei Stan, Radu Poenaru, Radu Constantinescu

February 17, 2025

Cuprins

1 Obiective laborator

În urma parcurgerii acestui laborator, studentul va fi capabil să:

- utilizeze metodele de derivare şi integrare numerică prezentate;
- înţeleagă diferenţele între diferitele versiuni ale acestor metode;
- situaţiile în care aceste metode sunt potrivite.

2 Noţiuni teoretice

Ne propunem să calculăm, în mod aproximativ, valorile $I[f] = \int\limits_a^b f(x)dx$ şi $D[f] = f^{(p)}(x_0)$, în condiţiile în care:

- funcţia f este continuă pe intervalul [a, b];
- primitiva F nu este cunoscută;
- funcţia f este cunoscută numai prin valorile $f(x_i)$, într-un număr restrâns de puncte x_i, $i = 0 : N$.

2.1 Derivare numerică

Întrucât derivata funcţiei f în punctul x_0 este definită ca

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

un mod evident de a aproxima $f'(x_0)$ este calculul

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

pentru valori mici ale lui h.

Vom analiza eroarea obţinută prin această metodă, cu ajutorul polinomului de interpolare Lagrange de grad 1, cunoscând valorile funcţiei în punctele x_0 şi $x_1 = x_0 + h$. Considerăm $f \in C^2[a, b]$ şi $x_0, x_1 \in [a, b]$.

$$f(x) = P_1(x) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(\xi(x))$$

$$f(x) = \frac{f(x_0)(x - x_0 - h)}{-h} + \frac{f(x_0 + h)(x - x_0)}{h} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2} f''(\xi(x)), \quad \xi(x) \in [a, b]$$

Derivând, se ajunge la

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + D_x \left[\frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2} f''(\xi(x)) \right]$$

$$= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \frac{2(x - x_0) - h}{2} f''(\xi(x)) + \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2} D_x(f''(\xi(x))).$$

Astfel,

$$f'(x) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

cu eroarea

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2}f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2}D_x(f''(\xi(x))).$$

Pentru $x = x_0$, formula se simplifică astfel (two-point formula):

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi), \xi \in [x_0, x_0+h].$$

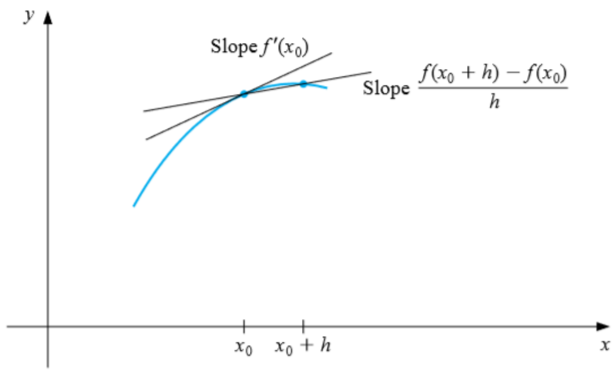

Figura 1: Interpretare geometrică pentru formula de derivare two-point.

Aplicând o tehnică similară, dar folosind polinomul Lagrange de grad 2, cunoscând valorile funcţiei în punctele x_0, x_0+h, x_0+2h şi considerând că există f''' pe un interval ce conţine aceste abscise, obţinem (three-point endpoint formula):

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_0+h)-f(x_0+2h)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi), \xi \in [x_0, x_0+2h].$$

Această formulă este utilă pentru aproximarea derivatei la capătul unui interval (ex: x_0), situaţie ce apare, spre exemplu, la interpolările cu spline-uri cubice tensionate.

Pentru aproximarea derivatei unei funcţii într-un punct interior unui interval, este recomandată folosirea următoarei formule (obţinută cu ajutorul polinomului de interpolare Lagrange de grad 2, în punctele x_0-h, x_0, x_0+h (three-point midpoint formula):

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0+h)-f(x_0-h)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi), \xi \in [x_0-h, x_0+h].$$

2.1.1 Observaţie

În tehnicile de derivare numerică, reducerea pasului h duce la reducerea erorii teoretice, însă cu costul creşterii erorilor de rotunjire. Pentru a ilustra acest comportament, vom examina formula:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0+h)-f(x_0-h)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi), \xi \in [x_0-h, x_0+h].$$

Dacă în evaluările $f(x_0+h)$ şi $f(x_0-h)$ apar erorile ϵ_+ şi ϵ_-, notând cu $\tilde{f}(x_0+h)$ şi $\tilde{f}(x_0-h)$ valorile calculate efectiv, avem relaţiile:

$$f(x_0+h) = \tilde{f}(x_0+h) + \epsilon_+$$

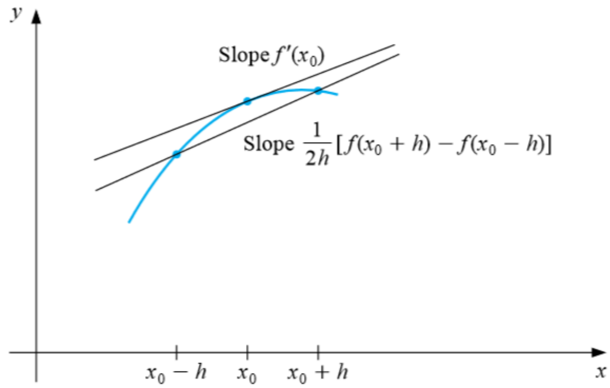

Figura 2: Interpretare geometrică pentru formula de derivare three-point midpoint.

$$f(x_0 - h) = \tilde{f}(x_0 - h) + \epsilon_-$$

Astfel, presupunând că erorile ϵ_+ şi ϵ_- sunt mărginite de $\epsilon > 0$ şi că f''' este marginită de $M > 0$, eroarea totală a aproximării devine:

$$\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 - h)}{2h} \right| \leq \frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M.$$

Pentru a reduce termenul $\frac{h^2}{6}M$ este necesară reducerea lui h, care duce însă la creşterea termenului $\frac{\epsilon}{h}$ (specific erorii de rotunjire), acest termen ajungând să domine calculele.

2.2 Integrare numerică

Definim o metodă aproximativă de integrare astfel:

$$I_N[f] = \sum_{i=0}^{N} A_i f(x_i).$$

O astfel de metodă este convergentă dacă:

$$\lim_{N \to \infty} |I[f] - I_N[f]| = 0.$$

2.2.1 Metode Newton-Cotes

Pentru o formulă de integrare aproximativă putem scrie

$$\int_a^b f(x)w(x)dx = \sum_{i=0}^{N} A_i f(x_i) + R_N.$$

În metodele de tip Newton-Cotes, abscisele x_i se aleg echidistante în intervalul $[a, b]$

$$x_i = a + i\frac{(b - a)}{N}, i = 0 : N.$$

Coeficienţii A_i se determină impunând ca formula aproximativă să fie exactă ($R_N = 0$) dacă f aparţine unei anumite clase de funcţii (de exemplu, polinoame de grad $\leq N$). Astfel, vom aproxima funcţia prin polinomul ei de interpolare Lagrange

$$P_N(x) = \sum_{i=0}^{N} f(x_i) l_i(x), \quad l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{N} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}.$$

În acest fel, obţinem $A_i = \int\limits_a^b l_i(x) w(x) dx$.

Deoarece eroarea polinomului de interpolare respectă $|f(x) - P_N(x)| \leq \frac{\left|f^{(N+1)}(\xi)\right|}{(N+1)!} |(x - x_0)...(x - x_N)|$, cu $\xi \in [a, b]$, prin integrare obţinem expresia erorii în metodele Newton-Cotes:

$$R_N \leq \frac{\left|f^{(N+1)}(\xi)\right|}{(N+1)!} \int\limits_a^b |(x - x_0)...(x - x_N)| \, w(x) dx.$$

Datorită instabilităţii interpolării polinomiale se folosesc polinoame de interpolare de grad mic.

Astfel, pentru $N = 1$ se obţine *formula trapezelor*:

$$\int\limits_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{h^3 f''(\xi)}{12}, \quad h = b - a.$$

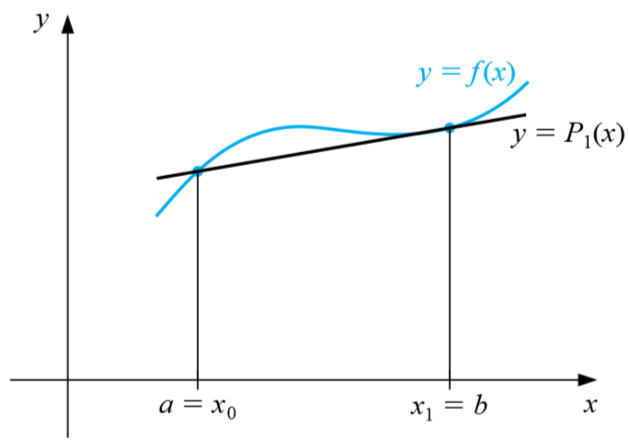

Figura 3: Interpretare geometrică pentru formula trapezelor.

Pentru $N = 2$, se obţine *formula Simpson* (Figure 2):

$$\int\limits_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90}, \quad h = b - a.$$

Aceste formule folosesc puţine puncte, ceea ce ne determină să aproximăm integrala ca o sumă de integrale calculate pe intervale mai mici

$$\int\limits_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \int\limits_{x_0}^{x_1} f(x) dx + ... + \int\limits_{x_{N-1}}^{x_N} f(x) dx.$$

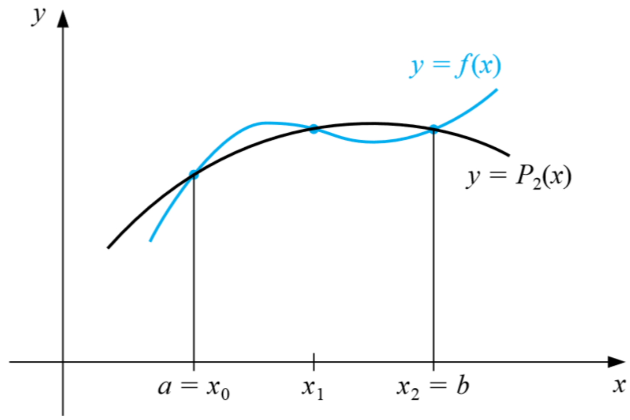

Figura 4: Interpretare geometrică pentru formula Simpson.

Astfel, obţinem:

- *formula compusă a trapezelor*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih)\right], \quad h = \frac{(b-a)}{N}$$

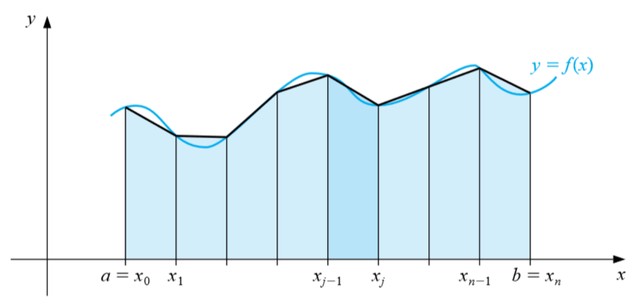

Figura 5: Interpretare geometrică pentru formula compusă a trapezelor.

- *formula compusă Simpson*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(a) + f(b) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(x_{2i})\right], \quad h = \frac{(b-a)}{N}, x_i = a + ih$$

3 Probleme rezolvate

3.1 Problema 1

a) Folosind formula de derivare two-point, aproximaţi derivata funcţiei $f(x) = sin(x)$ în punctele $x_0 = 0.2$, $x_1 = 0.5$, $x_2 = 0.9$.

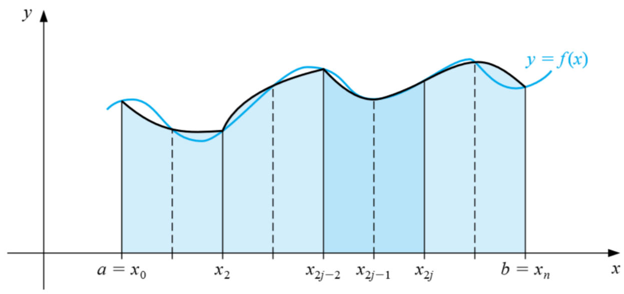

Figura 6: Interpretare geometrică pentru formula compusă Simpson.

b) Calculaţi eroarea de aproximare în punctul $x_0 = 0.5$ şi găsiţi o margine superioară teoretică pentru aceasta folosind formula erorii.

Soluţie: a)

```
function diffs = lab11Pr1(func, xi)
  N = length(xi);
  diffs = zeros(1,N);
  fxi = func(xi);

  for i = 1 : N-1
    diffs(i) = D2P(fxi(i), fxi(i+1), xi(i+1)-xi(i));
  endfor

  diffs(N) = diffs(N-1);
endfunction
```

Listing 1: Metoda de derivare two-point.

Date de intrare:	**Date de ieşire:**
$@sin,\ xi = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.5 \\ 0.9 \end{bmatrix}$	$diffs = \begin{bmatrix} 0.93585 \\ 0.79310 \\ 0.79310 \end{bmatrix}$

b) În punctul $x_0 = 0.5$, eroarea de aproximare este $Err = cos(0.5) - diffs(1) = 0.025$.

În punctul $x_0 = 0.5$, pentru formula utilizată, forma erorii este $|Err(\xi)| = \left|\frac{h}{2} f''(\xi)\right| = |0.05 \cdot sin(\xi)|$, cu $\xi \in [0.5, 0.6] \Rightarrow \max\limits_{\xi \in [0.5,0.6]} Err(\xi) = \max\limits_{\xi \in [0.5,0.6]} 0.05 \cdot sin(\xi) = 0.05 \cdot sin(0.6) = 0.0282$. Se verifică faptul că marginea teoretică încadrează eroarea efectivă în acest caz.

3.2 Problema 2

a) Scrieţi două funcţii OCTAVE care calculează derivata unei funcţii într-un punct x_0 dat, folosind formulele three-point midpoint, respectiv three-point endpoint. fx este un vector ce conţine valorile funcţiei în punctele necesare fiecărei metode.

b) Folosiţi aceste funcţii pentru a completa tabelul ($f(x) = e^{3x}$):

x	f(x)	f'(x)
2.3	992.27	
2.5	1808.04	
2.7	3294.47	

Soluţie:./

```
function fp = DMid(fx, h)
  fp = (fx(2)-fx(1))/(2*h);
endfunction
```

Listing 2: Metoda de derivare three-point midpoint.

```
function fp = DEnd(fx, h)
  fp = -(3*fx(1) - 4*fx(2) + fx(3))/(2*h);
endfunction
```

Listing 3: Metoda de derivare three-point endpoint.

```
function diffs = lab11Pr2(func, xi)
  N = length(xi);
  diffs = zeros(1,N);
  fxi = func(xi);
  h = xi(2) - xi(1);

  diffs(1) = DEnd(fxi(1:3), h);
  diffs(N) = DEnd(fxi(N:-1:N-2), h);

  for i = 2 : N-1
    diffs(i) = DMid([fxi(i-1), fxi(i+1)], h);
  endfor
endfunction
```

Listing 4: lab11Pr2.m.

Date de intrare:	**Date de ieşire:**
$f\_e3x,\ xi = \begin{bmatrix} 2.3 \\ 2.5 \\ 2.7 \end{bmatrix}$	$diffs = \begin{bmatrix} 2402.2 \\ 5755.5 \\ -9108.8 \end{bmatrix}$

unde $f\_e3x = @(x)\ e.\hat{}(3 * x)$.

3.3 Problema 3

a) Folosind formula compusă Simpson pentru N = 4, aproximaţi integrala $\int\limits_3^5 xlog(x)dx$.

b) Folosind formula compusă a trapezelor pentru N = 4, aproximaţi integrala $\int\limits_1^3 e^{3x}dx$.

Soluţie:

```
function F = compositeSimpson(fx, a, b)
  N = length(fx)-1;
  h = (b-a)/N;
  F = (h/3)*(fx(1) + fx(N+1) + 4*sum(fx(2:2:N)) + 2*sum(fx(3:2:N-1)));
endfunction
```

Listing 5: Formula compusă Simpson.

```
function F = compositeTrapezoidal(fx, a, b)
  N = length(fx)-1;
  h = (b-a)/N;
  F = (h/2)*(fx(1) + fx(N+1) + 2*sum(fx(2:N)));
endfunction
```

Listing 6: Formula compusă a trapezelor.

```
function rez = lab11Pr3(func, a, b, N, method)
  step = (b-a)/N;
  xi = (a:step:b);
  fxi = func(xi);
  rez = method(fxi, a, b);
endfunction
```

Listing 7: lab11Pr3.m.

Date de intrare:	**Date de ieşire:**
$f\_xlogx, a = 3, b = 5, N = 4, @compositeSimpson$	$rez = 11.174$
$f\_e3x, a = 1, b = 3, N = 4, @compositeTrapezoidal$	$rez = 3181.5$

unde $f\_xlogx = @(x)\ x.*log(x)$, $f\_e3x = @(x)\ e.\hat{}(3*x)$.

3.4 Problema 4

Determinaţi valoarea maximă a lui $h = b - a$, $b > a$, astfel încât aproximarea integralei $\int\limits_a^b \frac{1}{x+4}dx$, folosind metoda trapezelor, să nu poată avea o eroare mai mare decât 10^{-4}, conform erorii din formulă. Se cunoaşte $a = 1$.

Soluţie: Aproximând integrala dată cu formula trapezelor, valoarea absolută a erorii va avea forma

$$|Err(\xi)| = h^3\frac{|f''(\xi)|}{12}, \quad \xi \in [a, b].$$

Trebuie ca $|Err(\xi)| \leq 10^{-4}$, $\forall \xi \in [a, b] \Rightarrow h^3\frac{|f''(\xi)|}{12} \leq 10^{-4}, \quad \forall \xi \in [a, b]$.

Cum $f''(\xi) = \frac{2}{(x+4)^3}$ şi $a = 1 \Rightarrow \frac{h^3}{6}\frac{1}{(\xi+4)^3} \leq 10^{-4}, \quad \forall \xi \in [1, b]$.

Deoarece $\max\limits_{\xi\in[1,b]} \frac{1}{(\xi+4)^3} = \frac{1}{5^3} \Rightarrow \frac{h^3}{750} \leq 10^{-4} \Rightarrow h \leq 0.4217$.

4 Probleme propuse

4.1 Problema 1

a)Aproximaţi integrala $I = \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{sin(x)}{x}dx$ prin metoda Simpson folosind 3 puncte.

b) Se dă $f : [a, b] \times [c, d] \to \mathbb{R}$. Calculaţi $I = \int\limits_a^b\int\limits_c^d f(x, y)dxdy$.

4.2 Problema 2

Calculaţi pasul h astfel încât, aproximând $\int_0^{\frac{\pi}{2}} sin(x)dx$ prin metoda trapezelor, eroarea să fie mai mică decât $\varepsilon = \beta \cdot 10^{-t}$.

4.3 Problema 3

Calculaţi aproximativ integrala $\int_0^1 ln(1+x^2)dx$, folosind formula compusă a trapezelor pentru $N = 4$.

4.4 Problema 4

Pentru formula de integrare de tip Newton-Cotes, $\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N} A_i f(x_i)$, să se arate că $a_i = \int_a^b w(x)l_i(x)dx$, în care l_i reprezintă multiplicatorii din formula de interpolare Lagrange.