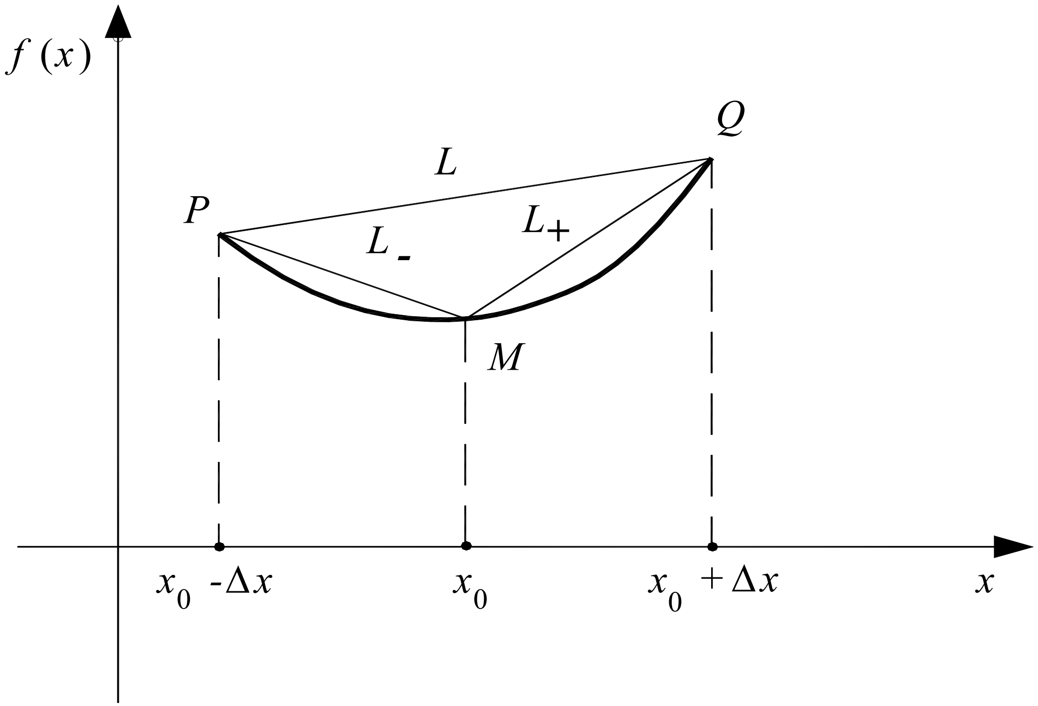
DERIVARE ŞI INTEGRARE NUMERICĂ

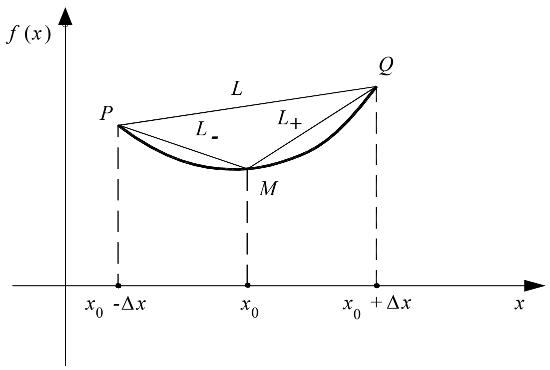
DERIVARE NUMERICĂ

Acest calcul are drept scop rezolvarea numerică a limitei: $$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

Aproximarea numerică a derivatei utilizând două puncte ale graficului funcţiei



Pentru valori mici ale diferenţei $\Delta x = x - x_0$ se poate aproxima valoarea derivatei funcţiei în punctul de abscisă x_0 fie cu panta dreptei MQ ($\boldsymbol{L_+}$) fie cu panta dreptei MP ($\boldsymbol{L_{--}}$) când $\Delta x < 0$.



$$\Delta x > 0 \quad \Rightarrow \quad f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

$$\Delta x < 0 \quad \Rightarrow \quad f'(x_0) = \frac{f(x_0 - \Delta x) - f(x_0)}{-\Delta x}$$

Se poate aproxima derivata şi prin panta dreptei PQ a cărei valoare este egală cu media aritmetică a pantelor dreptelor ($\boldsymbol{L_+}$) şi ($\boldsymbol{L_{--}}$), deci:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) + f(x_0 - \Delta x)}{2 \cdot \Delta x}$$

notând $\boldsymbol{h = 2\Delta x}$ se obţine în final relaţia:

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h}}$$

care reprezintă **formula de aproximare numerică a derivatei unei funcţii utilizând <u>două puncte</u> ale graficului**.

Această expresie poate fi utilizată şi pentru obţinerea unei relaţii de calcul pentru **derivata de ordinul 2** a unei funcţii:

$$f''(x_0) = \frac{f'\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + f'\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0) + f(x_0 - h) - f(x_0)}{h^2}$$

Rezultă deci:

$$\boxed{f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2 \cdot f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}}$$

Aproximarea numerică a derivatei utilizând trei puncte ale graficului funcţiei

Notăm abscisele celor trei puncte astfel: $x_{-1} = x_0 - h_1$; x_0 ; $x_{+1} = x_0 + h_2$
şi exprimăm derivata funcţiei în punctul de abscisă ca o combinaţie liniară a valorilor funcţiei calculate pentru cele trei abscise:

$$f'(x_0) = p_{-1} \cdot f(x_{-1}) + p_0 \cdot f(x_0) + p_{+1} \cdot f(x_{+1})$$

Coeficienţii reali p_{-1} ; p_0 ; p_{+1} se determină punând condiţia ca relaţia de calcul care se obţine să fie exactă pentru funcţii de gradul 0, 1 şi 2 adică să fie îndeplinite relaţiile:

Gradul 0	$f(x) = 1$	$\rightarrow$	$f'(x_0) = 0$
Gradul 1	$f(x) = x - x_0$	$\rightarrow$	$f'(x_0) = 1$
Gradul 2	$f(x) = (x - x_0)^2$	$\rightarrow$	$f'(x_0) = 0$

Prin înlocuire se obţine sistemul:

$$\begin{cases} p_{-1} + p_0 + p_{+1} = 0 \\ -h_1 \cdot p_{-1} + h_2 \cdot p_{+1} = 1 \\ h_1^2 \cdot p_{-1} + h_2^2 \cdot p_{+1} = 0 \end{cases}$$

care are soluţiile:

$$p_{-1} = \frac{-h_2^2}{h_1 \cdot h_2 \cdot (h_1 + h_2)} \qquad p_0 = \frac{h_2^2 - h_1^2}{h_1 \cdot h_2 \cdot (h_1 + h_2)} \qquad p_{-1} = \frac{h_1^2}{h_1 \cdot h_2 \cdot (h_1 + h_2)}$$

Ca urmare se obţine următoarea relaţie de calcul a derivatei:

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{-h_2^2 \cdot f(x_0 - h_1) + (h_2^2 - h_1^2) \cdot f(x_0) + h_1^2 \cdot f(x_0 + h_2)}{h_1 \cdot h_2 \cdot (h_1 + h_2)}}$$

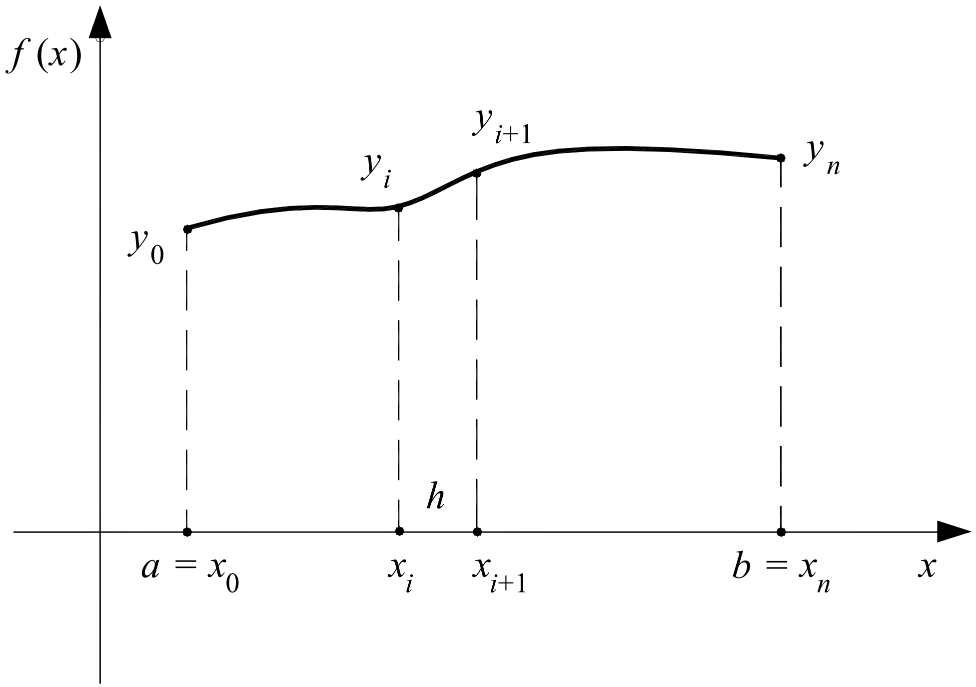
INTEGRARE NUMERICĂ

Calculul are drept scop determinarea numerică a valorii integralei definite:

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

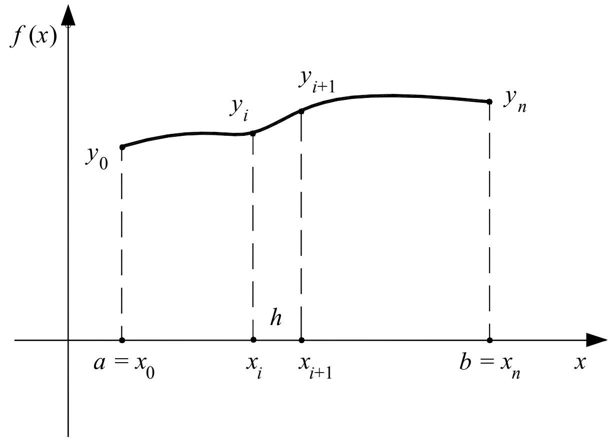
Metoda trapezelor

Calculul constă în aproximarea suprafeţei cuprinsă între graficul funcţiei, axa orizontală şi verticalele duse în dreptul absciselor *a* şi *b,* prin suma unor suprafeţe elementare în formă de trapez, care rezultă prin împărţirea intervalului [*a*, *b*] într-un număr *n* de subintervale.



Rezultă trapeze de înălţime: $h = \dfrac{b-a}{n}$

Astfel se aproximează liniar funcţia pe fiecare subinterval. Ca urmare se va face aproximarea:



$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) \cdot \mathrm{d}x \cong \frac{h}{2} \cdot (y_i + y_{i+1})$$

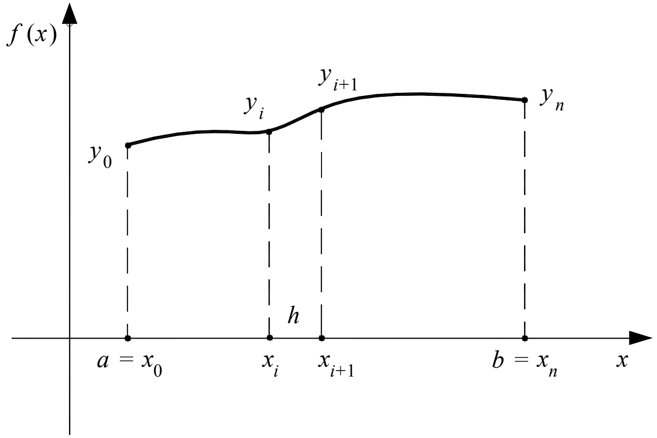
Această aproximare permite determinarea valorii integralei prin relaţia:

$$I = \sum_{i=0}^{n} I_i = \frac{h}{2} \cdot (y_0 + y_1 + y_1 + y_2 + y_2 + \cdots + y_{n-1} + y_{n-1} + y_n)$$

Prin urmare relaţia de calcul a integralei definite, prin metoda trapezelor, va fi următoarea:

$$I = \frac{h}{2} \cdot (y_0 + 2 \cdot y_1 + 2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_3 + \cdots + 2 \cdot y_{n-2} + 2 \cdot y_{n-1} + y_n)$$

Pentru a putea evalua **eroarea de trunchiere** se va utiliza relaţia de dezvoltare în serie Taylor a funcţiei ***f*(*x*)**. Din relaţia de dezvoltare vom păstra termenii până la derivata de ordinul 2, adică primii trei termeni.



Pentru punctul de abscisă $\boldsymbol{x_i}$ se obţine:

$$f_1(x) = f(x_i) + (x - x_i) \cdot f'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2} \cdot f''(x_i)$$

Pentru punctul de abscisă $\boldsymbol{x_{i+1}}$ se obţine:

$$f_2(x) = f(x_{i+1}) + (x - x_{i+1}) \cdot f'(x_{i+1}) + \frac{(x - x_{i+1})^2}{2} \cdot f''(x_{i+1})$$

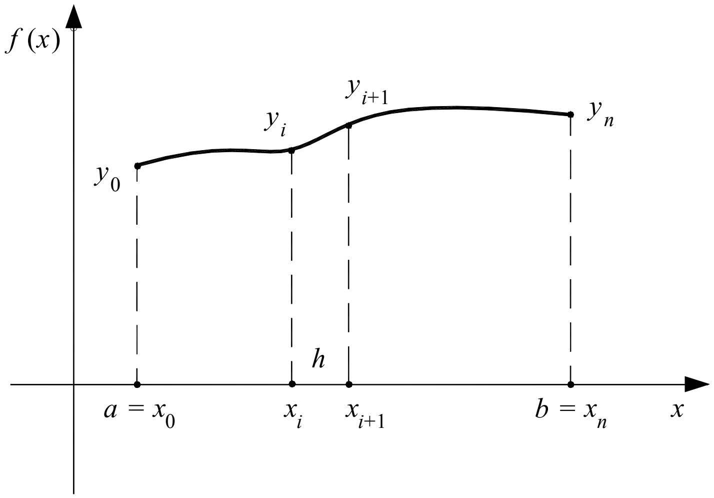
Pentru simplificare se vor introduce notaţiile:

$$f_1(x) = y_i + (x - x_i) \cdot y_i' + \frac{(x - x_i)^2}{2} \cdot y_i''$$

$$f_2(x) = y_{i+1} + (x - x_i - h) \cdot y_{i+1}' + \frac{(x - x_i - h)^2}{2} \cdot y_{i+1}''$$

$$f_1(x) = y_i + (x - x_i)\cdot y_i' + \frac{(x - x_i)^2}{2}\cdot y_i''$$

$$f_2(x) = y_{i+1} + (x - x_i - h)\cdot y_{i+1}' + \frac{(x - x_i - h)^2}{2}\cdot y_{i+1}''$$



Pe intervalul $[x_i , x_{i+1}]$ aproximăm funcţia prin expresia:

$$f(x) = \frac{f_1(x) + f_2(x)}{2}$$

ca urmare rezultă:

$$f(x) = \frac{y_i + y_{i+1}}{2} + (x - x_i)\cdot\frac{y_i' + y_{i+1}'}{2} - \frac{h}{2}\cdot y_{i+1}' + \frac{(x - x_i)^2}{4}\cdot\left(y_{i+1}'' + y_i''\right) - \frac{(x - x_i)\cdot h}{2}\cdot y_{i+1}'' + \frac{h^2}{4}\cdot y_{i+1}''$$

Utilizând această expresie se recalculează valoarea integralei pe intervalul $[x_i , x_{i+1}]$:

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\cdot \mathrm{d}x$$

După efectuarea calculelor şi reducerea termenilor asemenea se obţine:

$$I_i = \frac{h}{2}\cdot\left(y_{i+1} + y_i\right) - \frac{h^2}{4}\cdot\left(y_{i+1}' - y_i'\right) - \frac{h^3}{6}\cdot\left(y_{i+1}'' - 2\cdot y_i''\right)$$

$$I_i = \frac{h}{2} \cdot (y_{i+1} + y_i) - \frac{h^2}{4} \cdot (y'_{i+1} - y'_i) - \frac{h^3}{6} \cdot (y''_{i+1} - 2 \cdot y''_i)$$

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) \cdot \mathrm{d}x \cong \frac{h}{2} \cdot (y_i + y_{i+1})$$

În relaţia obţinută, primul termen corespunde valorii calculate prin metoda trapezelor. Ca urmare eroarea de trunchiere produsă la această metodă poate fi apreciată ca fiind egală cu:

$$e_{Ti} = -\frac{h^2}{2} \cdot (y'_{i+1} - y'_i) - \frac{h^3}{6} \cdot (y''_{i+1} - 2 \cdot y'_i)$$

Pentru valori mici ale lui ***h*** primul termen are valoarea dominantă. Vom presupune că eroarea de trunchiere are expresia:

$$e_{Ti} = K \cdot h^2 \cdot (y'_{i+1} - y'_i)$$

Presupunând derivatele de ordinul unu ca fiind aproximativ constante pe intervalul de integrare, eroarea de trunchiere poate fi aproximată prin relaţia:

$$\boxed{e_T = c \cdot h^2}$$

unde ***c*** reprezintă o constantă.

$$h = \frac{b-a}{n}$$

$$k = \frac{b-a}{m}$$

Evaluarea erorii de trunchiere se poate face pe baza următorului raţionament:
Presupunem:
I valoarea exactă a integralei;
$\boldsymbol{I_h}$ valoarea integralei calculate prin metoda trapezelor utilizând pasul ***h***;
$\boldsymbol{I_k}$ valoarea integralei calculate prin metoda trapezelor utilizând pasul ***k***.
Următoarele relaţii pot fi scrise:

$$I = I_h + c \cdot h^2 \qquad\qquad I = I_k + c \cdot k^2$$

Prin scădere se obţine: $c = \dfrac{I_h - I_k}{k^2 - h^2}$

Valoarea integralei se poate scrie sub forma:

$$I = I_h + \frac{I_h - I_k}{k^2 - h^2} \cdot h^2$$

sau:

$$I = I_h + \frac{I_h - I_k}{\dfrac{k^2}{h^2} - 1}$$

Rezultat care dă o mai bună aproximare a valorii integralei ***I***.

Metoda Simpson

Metoda este similară metodei trapezelor deoarece presupune divizarea intervalului de integrare în subintervale iar funcţia de integrat trebuie evaluată la capetele acestor subintervale.

Permite o aproximare mai bună a valorii integralei deoarece pe când în metoda trapezelor s-a folosit o dreaptă (polinom de gradul 1) pentru aproximarea ariei unui interval mic (rezultând un trapez) în metoda Simpson este utilizată o parabolă (polinom de gradul 2) pentru aproximarea ariei corespunzătoare la două intervale adiacente.

Formula de calcul a integralei se obţine cu ajutorul relaţiei obţinute la metoda trapezelor. Presupunem numărul de subintervale *n*, din relaţia , ca fiind par şi alegem . Scriind relaţia dată de metoda trapezelor respectiv pentru subintervalele *h* şi *k* obţinem

$$I_h = \frac{h}{2} \cdot \left(y_0 + 2 \cdot y_1 + 2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_3 + 2 \cdot y_4 + 2 \cdot y_5 + \cdots \right)$$

respectiv

$$I_k = h \cdot \left(y_0 + 2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_4 + 2 \cdot y_6 + \cdots \right)$$

Pentru $k = 2 \cdot h$ relaţia:

$$I = I_h + \frac{I_h - I_k}{\frac{k^2}{h^2} - 1}$$ devine: $$I = I_h + \frac{I_h - I_k}{4 - 1} = \frac{1}{3} \cdot (4 \cdot I_h - I_k)$$

Înlocuind :

$$I_h = \frac{h}{2} \cdot (y_0 + 2 \cdot y_1 + 2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_3 + 2 \cdot y_4 + 2 \cdot y_5 + \cdots)$$

$$I_k = h \cdot (y_0 + 2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_4 + 2 \cdot y_6 + \cdots)$$

Obţinem:

$$\boxed{I = \frac{h}{3} \cdot (y_0 + 4 \cdot y_1 + 2 \cdot y_2 + 4 \cdot y_3 + 2 \cdot y_4 + 4 \cdot y_5 + 2 \cdot y_6 \cdots)}$$

relaţie care reprezintă formula de calcul a lui **Simpson**.
Observaţie: Pentru ambele metode prezentate cu cât numărul de puncte în care se evaluează funcţia este mai mare (pasul de integrare este mai mic) cu atât rezultatul este mai precis.

Metoda Gauss

Metoda permite reducerea numărului de puncte în care se evaluează funcţia la două. Aplicarea metodei presupune efectuarea unei schimbări de variabilă astfel încât intervalul

$[a, b]$ să fie reprezentat pe intervalul $[-1, 1]$

Schimbarea de variabilă va fi următoarea:

$$\frac{u-(-1)}{1-(-1)}=\frac{x-a}{b-a}$$

Rezultă:

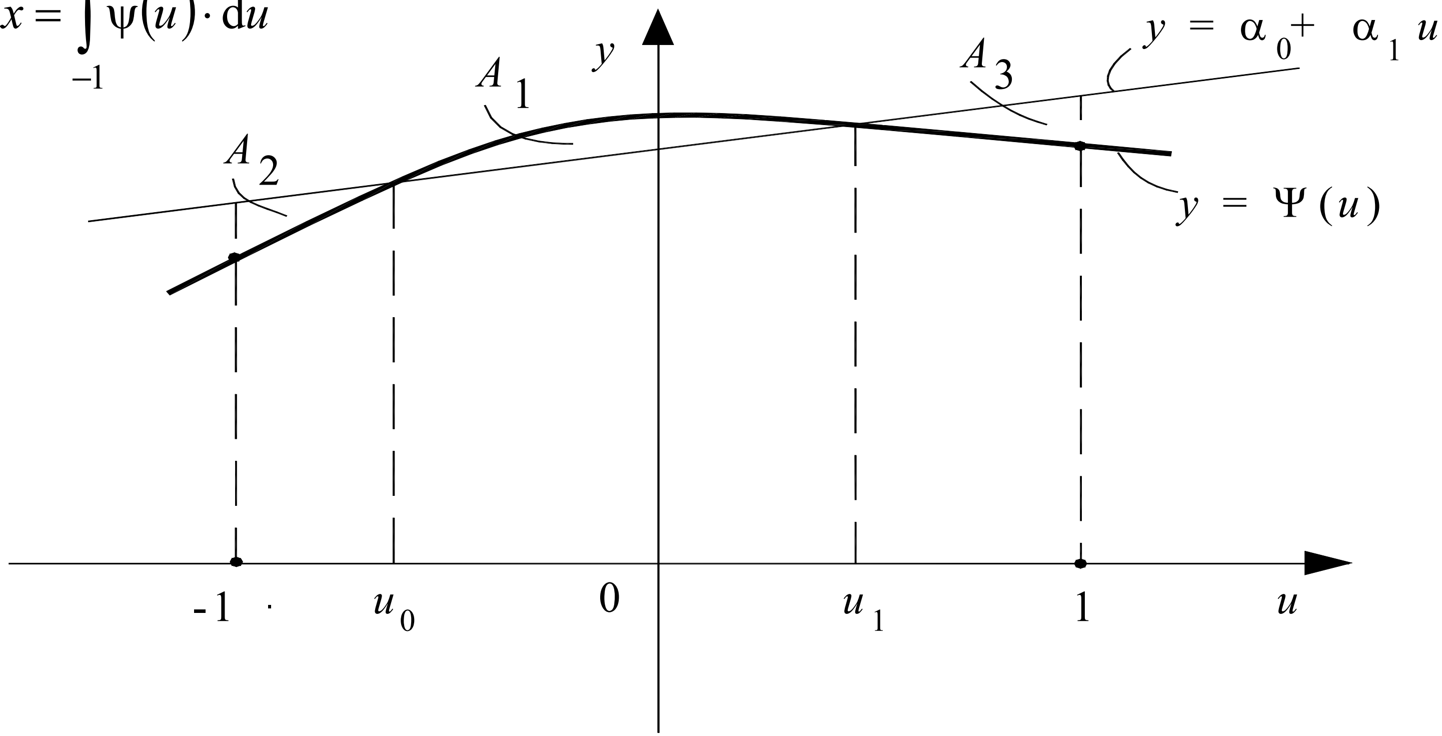
$$u=\frac{2}{b-a}\cdot x-\frac{b+a}{b-a}$$

respectiv:

$$\mathrm{d}u=\frac{2}{b-a}\cdot \mathrm{d}x$$

Prin urmare va fi îndeplinită o egalitate de forma:

$$I = \int_a^b f(x) \cdot \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \psi(u) \cdot \mathrm{d}u$$



Metoda constă în determinarea unei drepte $y = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot u$

pentru care să se obţină aceeaşi valoare a integralei pentru intervalul $[-1, 1]$

adică să fie îndeplinită egalitatea:

$$I = \int_{-1}^{1} \psi(u) \cdot \mathrm{d}u = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u) \cdot \mathrm{d}u$$

Grafic această condiţie revine la egalitatea dintre aria S_1 cuprinsă între graficul funcţiei şi dreaptă, aflată deasupra dreptei şi aria S_2 cuprinsă între graficul funcţiei şi dreaptă, aflată sub dreaptă.

Pentru a calcula integrala utilizând numai două evaluări ale funcţiei se mai pune condiţia:

$$\boxed{I = \int_{-1}^{1} \psi(u)\cdot \mathrm{d}u = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u)\cdot \mathrm{d}u = A_1 \cdot \psi(u_0) + A_2 \cdot \psi(u_1)}$$

Valorile reale ale mărimilor $\alpha_0, \quad \alpha_1, \quad A_1, \quad A_2, \quad u_0, \quad u_1$

se obţin punând condiţia de a se obţine un **rezultat exact în cazul unui polinom de gradul 3**.

Se alege un polinom de gradul 3 având următoarea formă particulară:

$$\psi(u) = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot u + (u - u_0)\cdot(u - u_1)\cdot(\beta_0 + \beta_1 \cdot u)$$

Valorile u_0 şi u_1 se obţin punând condiţia de a fi îndeplinită egalitatea:

$$I = \int_{-1}^{1} \left(\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u + (u - u_0)\cdot(u - u_1)\cdot(\beta_0 + \beta_1 \cdot u)\right)\cdot \mathrm{d}u = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u)\cdot \mathrm{d}u$$

care, după reducerea termenilor asemenea, devine:

$$\int_{-1}^{1} (u - u_0) \cdot (u - u_1) \cdot (\beta_0 + \beta_1 \cdot u) \cdot \mathrm{d}u = 0$$

În continuare se pune condiţia ca această egalitate să fie îndeplinită oricare ar fi valorile coeficienţilor β_0 şi β_1 . Ca urmare:

Pentru perechea de valori $\beta_0 = 1$ şi $\beta_1 = 0$ se obţine egalitatea:

$$\int_{-1}^{1} (u - u_0) \cdot (u - u_1) \cdot \mathrm{d}u = 0$$

care devine:

$$\int_{-1}^{1} u^2 \cdot \mathrm{d}u + (u_0 + u_1) \cdot \int_{-1}^{1} u \cdot \mathrm{d}u + u_0 \cdot u_1 \cdot \int_{-1}^{1} \mathrm{d}u = 0$$

iar după rezolvarea integralelor: $\frac{2}{3} + 2 \cdot u_0 \cdot u_1 = 0$

adică: $u_0 \cdot u_1 = -\frac{1}{3}$

Pentru perechea de valori $\beta_0 = 0$ şi $\beta_1 = 1$ se obţine egalitatea:

$$\int_{-1}^{1} \left(u - u_0\right) \cdot \left(u - u_1\right) \cdot u \cdot \mathrm{d}u = 0$$ care devine:

$$\int_{-1}^{1} u^3 \cdot \mathrm{d}u + \left(u_0 + u_1\right) \cdot \int_{-1}^{1} u^2 \cdot \mathrm{d}u + u_0 \cdot u_1 \cdot \int_{-1}^{1} u \cdot \mathrm{d}u = 0$$

iar după rezolvarea integralelor: $-\frac{2}{3} \cdot \left(u_0 + u_1\right) = 0$ adică: $u_0 + u_1 = 0$

$$I = \int_{-1}^{1} \psi(u) \cdot \mathrm{d}u = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u) \cdot \mathrm{d}u = A_1 \cdot \psi(u_0) + A_2 \cdot \psi(u_1)$$

Prin urmare se obţine sistemul de ecuaţii:

$$\begin{cases} u_0 + u_1 & = & 0 \\ u_0 \cdot u_1 & = & -\dfrac{1}{3} \end{cases}$$

care are soluţiile: $u_0 = -\dfrac{\sqrt{3}}{3}$ şi $u_1 = \dfrac{\sqrt{3}}{3}$

Coeficienţii A_1 şi A_2 se obţin punând condiţia de a fi îndeplinită egalitatea:

$$I = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u) \cdot \mathrm{d}u = A_1 \cdot \psi(u_0) + A_2 \cdot \psi(u_1)$$

care se poate scrie sub forma:

$$\alpha_0 \int_{-1}^{1} \mathrm{d}u + \alpha_1 \int_{-1}^{1} u \cdot \mathrm{d}u = A_1 \cdot \psi(u_0) + A_2 \cdot \psi(u_1)$$

$$I=\int_{-1}^{1}\psi(u)\cdot \mathrm{d}u=\int_{-1}^{1}(\alpha_0+\alpha_1\cdot u)\cdot \mathrm{d}u=A_1\cdot\psi(u_0)+A_2\cdot\psi(u_1)$$

Deoarece:

$$\psi(u_0)=\alpha_0+\alpha_1\cdot u_0 \qquad \text{şi} \qquad \psi(u_1)=\alpha_0+\alpha_1\cdot u_1$$

după rezolvarea integralelor, egalitatea devine:

$$2\cdot\alpha_0=A_1\cdot(\alpha_0+\alpha_1\cdot u_0)+A_2\cdot(\alpha_0+\alpha_1\cdot u_1)$$

După înlocuirea valorilor $u_0=-\dfrac{\sqrt{3}}{3}$ şi $u_1=\dfrac{\sqrt{3}}{3}$

şi gruparea termenilor se obţine egalitatea:

$$\alpha_0\cdot(A_1+A_2)+\frac{\sqrt{3}}{3}\cdot\alpha_1\cdot(-A_1+A_2)=2\cdot\alpha_0$$

În continuare se pune condiţia ca această egalitate să fie îndeplinită oricare ar fi valorile coeficienţilor α_0 şi α_1 . Ca urmare:

$$\alpha_0 \cdot (A_1 + A_2) + \frac{\sqrt{3}}{3} \cdot \alpha_1 \cdot (-A_1 + A_2) = 2 \cdot \alpha_0$$

Pentru perechea de valori $\alpha_0 = 1$ şi $\alpha_1 = 0$ se obţine egalitatea:

$$A_1 + A_2 = 2$$

Pentru perechea de valori $\alpha_0 = 0$ şi $\alpha_1 = 1$ se obţine egalitatea:

$$-A_1 + A_2 = 0$$

.

Deci se obţine sistemul:

$$\begin{cases} A_2 + A_1 = 2 \\ A_2 - A_1 = 0 \end{cases}$$

care are soluţiile: $A_1 = 1$ şi $A_2 = 1$

În consecinţa formula de integrare prin metoda Gauss va avea expresia:

$$I = \int_{-1}^{1} \psi(u) \cdot \mathrm{d}u = \int_{-1}^{1} (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot u) \cdot \mathrm{d}u = A_1 \cdot \psi(u_0) + A_2 \cdot \psi(u_1)$$

$$\boxed{I = \psi\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \psi\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)}$$