5. Integrarea şi derivarea numerică

Fie $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ o funcţie integrabilă. Dacă putem găsi o primitivă F a funcţiei f, atunci conform *formulei Leibniz–Newton* avem

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) .$$

Dacă nu putem găsi o primitivă F a funcţiei f, atunci pentru calculul integralei $\int_a^b f(x)dx$ vom folosi o metodă numerică aproximativă.

O abordare firească este să aproximăm funcţia f printr–un polinom, de exemplu prin polinomul de interpolare a lui Lagrange şi să integrăm acest polinom.

Prin *formulă de integrare numerică (cuadratură numerică)* se înţelege o formulă de următorul tip

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + ... + A_n f(x_n) + R(f) \tag{1}$$

unde $\{ x_i \}$ se numesc noduri, iar $\{ A_i \}$ se numesc coeficienţi.

Funcţia w este o funcţie fixată, integrabilă, care se numeşte *funcţia pondere.* În multe cazuri $w(x)=1$, $(\forall)\ x \in [a,b]$. Despre funcţia f se presupune că este integrabilă pe $[a,b]$ şi definită în nodurile $\{ x_i \}$.

Cu $R(f)$ se notează *eroarea de aproximare a integralei.*

Definiţia 1. *Formula* (1) *se spune că este exactă pentru funcţia f dacă $R(f) = 0$, deci dacă*

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + ... + A_n f(x_n) .$$

Formula (1) *se spune că este de gradul m dacă:*

(i) *este exactă pentru orice polinom de grad cel mult m ;*

(ii) *există un polinom de gradul* $(m+1)$ *pentru care formula* (1) *nu este exactă.*

Teorema 1. *Pentru orice n noduri distincte,* $x_1, ..., x_n$, *există* n *constante* $A_1, A_2, ..., A_n$ *(care nu depind de* f*) astfel încât formula*

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + ... + A_n f(x_n) + R(f)$$

este exactă pentru orice polinom de grad cel mult $(n-1)$.

Demonstrație. Fie

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} L_i(x) f(x_i)$$

polinomul lui Lagrange, care interpolează funcția f în nodurile $\{x_i\}$, $i=\overline{1,n}$. Reamintim că

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Dacă notăm cu

$$E(f;x) = f(x) - P_{n-1}(x),$$

atunci

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} L_i(x) f(x_i) + E(f;x)$$

şi mai departe

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^{n}\left(\int_a^b w(x)L_i(x)dx\right) f(x_i) + \int_a^b w(x)E(f;x)dx .$$

Notăm cu

$$A_i = \int_a^b w(x)L_i(x)dx, \quad i=\overline{1,n}.$$

Evident A_i nu depind de f, ci de a, b, nodurile x_i şi de ponderea w.

Dacă notăm cu

$$R(f) = \int_a^b w(x)E(f;x)dx,$$

atunci

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + ... + A_n f(x_n) + R(f).$$

Dacă f este un polinom de grad cel mult $(n-1)$, atunci $E(f;x)=0$ şi deci $R(f)=0$ (Capitolul IV, §1, Observația 1). ❑

Există trei tipuri de formule de integrare numerică:

1. Formule *Newton–Côtes*,
2. Formule *Gauss*,
3. Formule *Romberg.*

În cele ce urmează vom prezenta primele două tipuri de formule.

§5.1. Formule Newton-Côtes

Presupunem intervalul $[a,b]$ finit, nodurile echidistante
$x_i = a+ih$, unde $h = \dfrac{b-a}{n}$ şi $w(x)=1$, pentru orice $x\in[a,b]$.

Fie $L_i(x) = \prod\limits_{\substack{i=0\\ j\neq i}}^{n} \dfrac{x-x_j}{x_i - x_j}$ şi fie P_n – polinomul Lagrange care interpolează funcţia f în nodurile $x_0, x_1, ..., x_n$. Avem

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)\ .$$

Dacă facem schimbarea de variabilă $x=a+t\cdot h$, atunci , aşa cum s–a văzut în § 4.1, avem

$$\widetilde{P}_n(t) = P_n(a+th) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i} C_n^i}{n!} \frac{\pi_{n+1}(t)}{t-i} f(x_i) \quad \text{şi}$$

$$\widetilde{E}(f;t) = \frac{\pi_{n+1}(t)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi_t)\,,$$

unde

$$\pi_{n+1}(t) = t(t-1)(t-2)...(t-n)\ .$$

În continuare avem

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b E(f;x)dx\ .$$

Cu schimbarea de variabilă $x=a+th$, obţinem

$$\int_a^b f(x)dx = \int_0^n \widetilde{P}_n(t)hdt + \int_0^n \widetilde{E}(f;t)hdt =$$

$$= h\sum_{i=0}^{n}\left(\frac{(-1)^{n-i} C_n^i}{n!} \int_0^n \frac{\pi_{n+1}(t)}{t-i} dt \right) f(x_i) + \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n \pi_{n+1}(t) f^{(n+1)}(\xi_t)dt\ .$$

Introducem notaţiile:

$$d_i = \frac{(-1)^{n-i} C_n^i}{n!} \int_0^n \frac{\pi_{n+1}(t)}{t-i} dt\,, \quad i=\overline{0,n} \tag{2}$$

şi

$$R(f) = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n \pi_{n+1}(t) f^{(n+1)}(\xi_t) dt \quad . \tag{3}$$

Numerele $\{ d_i \}$, $i = \overline{0,n}$, se numesc *coeficienţii Newton–Côtes.* Prin urmare avem

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + R(f) \tag{4}$$

unde $A_i = hd_i$, $i = \overline{0,n}$.

Primele trei formule Newton–Côtes au nume speciale.

Dacă n=1 obţinem *formula trapezelor*. În acest caz $h = b-a$,

$$d_0 = \frac{(-1)^1 C_1^0}{1!} \int_0^1 \frac{t(t-1)}{t} dt = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}\ , \ d_1 = \frac{(-1)^0 C_1^1}{1!} \int_0^1 \frac{t(t-1)}{t-1} dt = \int_0^1 tdt = \frac{1}{2}$$

Rezultă

$$A_1 = A_2 = \frac{h}{2} \quad .$$

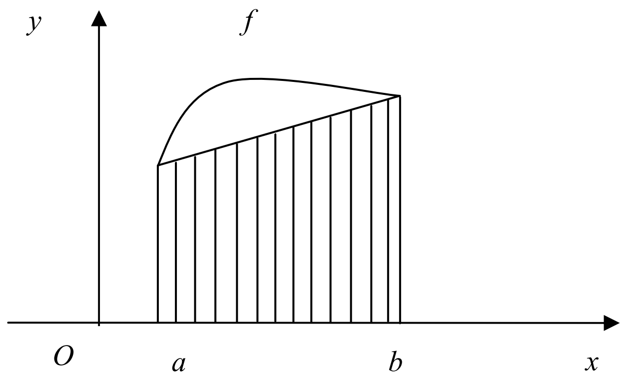
Formula trapezelor este

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] + R(f) \tag{5}$$

$$R(f) = \frac{h^3}{2} \int_0^1 f''(\xi_t)\, t\,(t-1) dt \quad .$$

Dacă $f \in C^2[a,b]$ şi notăm cu $M_2 = \sup\{ |f''(x)| \,;\, x \in [a,b] \}$ atunci

$$|R(f)| \le \frac{(b-a)^3 M_2}{2} \int_0^1 |\, t(t-1)\, | dt = \frac{(b-a)^3}{12} M_2 \tag{6}$$



Din punct de vedere geometric formula trapezelor (5) revine la a aproxima aria mulţimii plane mărginită de graficul funcţiei f, axa Ox şi dreptele $x = a$, $x= b$ cu aria trapezului haşurat în figură.

Dacă n=2 obţinem *formula Simpson.* În acest caz $h = \dfrac{b-a}{2}$,

$$d_0 = \frac{(-1)^2 C_2^0}{2!} \int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t} dt = \frac{1}{2} \int_0^2 (t^2 - 3t + 2) dt = \frac{1}{3}$$

$$d_1 = \frac{(-1)^1 C_2^1}{2!} \int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t-1} dt = -\int_0^2 (t^2 - 2t) dt = \frac{4}{3}$$

$$d_2 = \frac{(-1)^0 C_2^2}{2!} \int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t-2} dt = \frac{1}{2} \int_0^2 (t^2 - t) dt = \frac{1}{3} .$$

Formula Simpson este

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b) \right] + R(f) \quad . \qquad (7)$$

Se poate arăta că dacă $f \in C^4[a,b]$ atunci

$$|R(f)| \le \frac{M_4 (b-a)^5}{2880} \qquad (8)$$

unde $M_4 = \sup\{ |f^{IV}(x)| ;\ x \in [\,a,b\,] \}$. În sfârşit, dacă n=3, atunci

$$h = \frac{b-a}{3} \ ;\ d_0 = d_3 = \frac{3}{8} \ ;\ d_1 = d_2 = \frac{9}{8} .$$

Se obţine *formula 3/8 a lui Simpson*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{8}\left[f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b) \right] + R(f) \quad . \qquad (9)$$

Pentru o mai bună aproximare a integralei se folosesc *formulele Nexwton–Côtes repetate.*

Dacă împărţim intervalul $[\ a,\ b\ ]$ în n subintervale egale şi aplicăm formula (5) fiecărui interval $[\,x_{i-1}, x_i\,]$, obţinem:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{2}\left[f(x_{i-1}) + f(x_i) \right] + R_i(f) \quad .$$

Cum $x_i - x_{i-1} = \dfrac{b-a}{n}$, $x_0 = a$ şi $x_n = b$ avem

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2n}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right] + R(f) \qquad (10)$$

unde

$$|R(f)| \le n\frac{M_2}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^3 = \frac{M_2}{12n^2}(b-a)^3 \ . \tag{11}$$

Formula (10) se numeşte *formula trapezelor repetată.*

Dacă împărţim intervalul $[a,b]$ în $2n$ subintervale egale şi aplicăm formula Simpson (7) fiecărui interval $[x_{2i-2},x_{2i}]$, obţinem *formula Simpson repetată*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6n}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i})\right] + R(f) \tag{12}$$

unde

$$|R(f)| \le \frac{M_4}{2880n^4}(b-a)^5 \ . \tag{13}$$

Dacă notăm cu

$$\sigma_n^T = \frac{b-a}{2n}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right]$$

şi cu

$$\sigma_n^S = \frac{b-a}{6n}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i})\right],$$

atunci se poate arăta că σ_n^T şi σ_n^S sunt sume Riemann, sau combinaţii liniare de sume Riemann ataşate funcţiei f şi că

$$\lim_{n\to\infty} \sigma_n^T = \int_a^b f(x)dx, \quad \lim_{n\to\infty} \sigma_n^S = \int_a^b f(x)dx \ .$$

Calculul aproximativ al integralelor definite folosind pachetul de programe MATLAB

În MATLAB se află programate metodele trapezelor, Simpson şi 3/8 Simpson (funcţiile trapz, quad şi quad8).

Pentru calculul integralelor definite cu formula trapezelor trebuie să se cunoască X, vectorul absciselor şi Y, vectorul (matricea) valorilor funcţiei (funcţiilor) corespunzătoare absciselor date de X.

Secvenţa de apelare este: Z=trapz(X), când se calculează o singură integrală şi Z este un număr, valoarea integralei, sau Z =trapz(X,Y), când se calculează mai multe integrale deodată şi Z este vectorul valorilor integralelor calculate. Această funcţie consideră h=1, iar atunci când $h \neq 1$, se înmulţeşte cu h funcţia *trapz*, aşa cum se va vedea în exemplul următor.

Exemplul 1. Să se calculeze valoarea aproximativă a integralei $\int_{0.5}^{2.5} \sin(x^2)dx$, folosind funcţia MATLAB *trapz* , şi luând pasul h=0.1 .

Fişierul de tip *m* cu care se realizează această cerinţă este:

```
% Calculul integralelor cu metoda trapezelor
function z=trapez
x=.5:0.1:2.5;       %limita inferioara: pasul: limita superioara
y=sin(x.^2);        % integrandul
z=0.1*trapz(y);   % se inmulteste cu pasul, implicit pasul fiind 1
disp('Valoarea aproximativa a integralei');
```

Apelarea se face scriind *trapez*, iar valoarea afişată este 0.3924 .

Pentru calculul integralelor definite cu una din formulele Simpson trebuie să se cunoască *X*, vectorul absciselor şi să se creeze un fişier de tip *m* care conţine secvenţa de definire a funcţiei de integrat. Funcţiile quad şi *quad*8 se apelează cu una din formele:

quad('f',a,b)	quad8('f',a,b)
quad('f',a,b,err)	quad8('f',a,b,err)
quad('f',a,b,err,urma)	quad8('f',a,b,err,urma)

unde: *f* - este numele unui fişier funcţie (de tip *m*) care conţine descrierea funcţiei de integrat;

a, b - sunt limitele de integrare;

err - eroarea relativă admisă între doi paşi consecutivi (implicit este 10^{-3});

urma - dacă este diferită de zero, se afişează pe ecran valorile intermediare.

Dacă nu se cunoaşte expresia analitică a funcţiei, ci doar *X* , vectorul absciselor, şi *Y*, vectorul valorilor funcţiei în aceste puncte, atunci se interpolează funcţia şi se consideră fişierul *f*, de tip *m*, care conţine funcţia de interpolare, după care se calculează integrala din această funcţie.

Pentru exemplul de mai sus se creează fişierul *f* cu funcţia de integrat:

```
% Fisierul cu functia de integrat numit f de tip m
function g=f(x)
g=sin(x.^2);   % integrandul
```

după care se apelează cu secvenţa: *quad*('f',0.5,2.5,0.00001) şi se va afişa valoarea 0.3890 . Am considerat eroarea relativă dintre doi paşi consecutivi 10^{-5}.

unde: *f* - este numele unui fişier funcţie (de tip *m*) care conţine descrierea funcţiei de integrat;

a, b - sunt limitele de integrare;

err - eroarea relativă admisă între doi paşi consecutivi (implicit este 10^{-3});

urma - dacă este diferită de zero, se afişează pe ecran valorile intermediare.

Dacă nu se cunoaşte expresia analitică a funcţiei, ci doar *X* , vectorul absciselor, şi *Y*, vectorul valorilor funcţiei în aceste puncte, atunci se interpolează funcţia şi se consideră fişierul *f*, de tip *m*, care conţine funcţia de interpolare, după care se calculează integrala din această funcţie.

Pentru exemplul de mai sus se creează fişierul *f* cu funcţia de integrat:

% Fisierul cu functia de integrat numit f de tip m

```
function g=f(x)
g=sin(x.^2);   % integrandul
```

după care se apelează cu secvența: *quad*('f',0.5,2.5,0.00001) şi se va afişa valoarea 0.3890. Am considerat eroarea relativă dintre doi paşi consecutivi 10^{-5}.

§5.2. Formule Gauss

Aşa cum am văzut în Teorema 1, pentru orice n noduri distincte $x_1, ..., x_n$, există n constante $A_1, ..., A_n$, astfel încât formula

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + ... + A_n f(x_n) + R(f) \quad (1)$$

este exactă pentru orice polinom de grad cel mult $(n-1)$. În anumite cazuri, această formulă este exactă şi pentru polinoame de grad mai mare.

De exemplu, formula Simpson, care corespunde la 3 noduri echidistante, este exactă pentru polinoame de grad cel mult 3.

În cele ce urmează vom stabili care este gradul maxim de exactitate al formulei (1). Vom arăta că pentru n noduri, gradul maxim de exactitate este $(2n-1)$ şi această se întâmplă pentru formula Gauss, când nodurile sunt rădăcinile unor polinoame ortogonale.

De acum înainte vom presupune că $0 \le w$, w este continuă pe $[a,b]$ şi $w(x) = 0$ numai pentru un număr finit de puncte din $[a,b]$.

Definiția 1. *Dacă*

$$\int_a^b w(x)f(x)g(x)dx = 0$$

atunci spunem că funcțiile f şi g sunt ortogonale pe $[a, b]$ în raport cu ponderea w.

Teorema 1. *Pentru orice $n \in N$, există un polinom P_n^*, de gradul n, care este ortogonal pe $[a, b]$ în raport cu ponderea w, pe orice polinom de grad cel mult $(n-1)$. Acest polinom este unic în afara unui factor constant de multiplicare nenul.*

Demonstrație.

Demonstrația este constructivă. Vom arăta că se pot determina $a_0, a_1, ..., a_n$ astfel încât

$$\int_a^b w(x)\left(a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n\right)Q(x)\,dx = 0$$

pentru orice polinom Q de grad cel mult $(n-1)$.

Observăm că dacă f este ortogonal pe g atunci λf este ortogonal pe g. Rezultă că putem presupune $a_n = 1$. Observăm de asemenea că dacă f este ortogonal pe g_1 şi g_2, atunci f este ortogonal pe $\alpha_1 g_1+\alpha_2 g_2$, oricare ar fi constantele α_1 şi α_2. Rezultă că este suficient să determinăm $a_0, a_1, ..., a_{n-1}$ astfel încât pentru orice $m\in\{0, 1, ..., n-1\}$ să avem:

$$\int_a^b w(x)\left(a_0 + a_1 x + ... + a_{n-1}x^{n-1} + x^n\right) x^m dx = 0 \qquad (2)$$

Dacă introducem notaţia

$$\int_a^b w(x)x^k dx = c_k \qquad (3)$$

atunci, dându–i lui m pe rând valorile 0, 1, ..., $(n-1)$ în relaţia (2) obţinem:

$$\begin{cases} a_0c_0 + a_1c_1 + ... + a_{n-1}c_{n-1} = -c_n \\ a_0c_1 + a_1c_2 + ... + a_{n-1}c_n = -c_{n+1} \\ \vdots \\ a_0c_{n-1} + a_1c_n + ... + a_{n-1}c_{2n-2} = -c_{2n-1} \end{cases} \qquad (4)$$

Problema ar fi rezolvată dacă am arăta că $\det C \neq 0$, unde

$$C = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-1} \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n-1} & c_n & \cdots & c_{2n-2} \end{pmatrix}.$$

Presupunem prin absurd că $\det C = 0$. Atunci există $\lambda_0, \lambda_1, ..., \lambda_{n-1}$ nu toţi nuli, astfel încât

$$\begin{cases} \lambda_0c_0 + \lambda_1c_1 + ... + \lambda_{n-1}c_{n-1} = 0 \\ \lambda_0c_1 + \lambda_1c_2 + ... + \lambda_{n-1}c_n = 0 \\ \vdots \\ \lambda_0c_{n-1} + \lambda_1c_n + ... + \lambda_{n-1}c_{2n-2} = 0 \end{cases}. \qquad (5)$$

Înlocuind expresiile coeficienţilor c_k daţi de relaţiile (3) în (5) rezultă:

$$\begin{cases} \int_a^b w(x)\left(\lambda_0 + \lambda_1 x + ... + \lambda_{n-1}x^{n-1}\right)dx = 0 \\ \vdots \\ \int_a^b w(x)\left(\lambda_0 x^{n-1} + \lambda_1 x^n + ... + \lambda_{n-1}x^{2n-2}\right)dx = 0 \end{cases}. \qquad (6)$$

Amplificând pe rând, prima relaţie cu λ_0, a doua cu λ_1, şi aşa mai departe, şi adunându–le, rezultă

$$\int_a^b w(x)\left[\lambda_0 + \lambda_1 x + \ldots + \lambda_{n-1}x^{n-1}\right]^2 dx = 0 \qquad (7)$$

Din (7) rezultă:

$$w(x)\,[\lambda_0+\lambda_1 x+ \ldots +\lambda_{n-1}x^{n-1}]^2 = 0$$

pentru orice $x\in[a,b]$. Cum w se anulează numai într-un număr finit de puncte din $[a,b]$, rezultă $\lambda_0+\lambda_1 x+ \ldots+\lambda_{n-1}x^{n-1}=0$. Am ajuns astfel la o contradicție. Aşadar, $\det C \neq 0$ deci sistemul (4) admite soluție unică.

Dacă notăm cu $\overset{*}{a}_0, \overset{*}{a}_1, \ldots, \overset{*}{a}_{n-1}$ soluția sistemului (4), atunci

$$P_n^*(x) = \overset{*}{a}_0 + \overset{*}{a}_1 x + \ldots + \overset{*}{a}_{n-1}x^{n-1} + x^n$$

şi cu aceasta teorema este demonstrată. ❑

Polinoamele ortogonale $\{P_n^*\}$ au diferite denumiri în funcție de ponderea w şi de intervalul $[a,b]$.

Intervalul	Ponderea	Numele polinomului P_n^*
$[-1,1]$	$w(x)=1$	Polinomul Legendre
$[-1,1]$	$w(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	Polinomul Cebîşev de speța I
$[-1,1]$	$w(x)=\sqrt{1-x^2}$	Polinomul Cebîşev de speța II
$(-\infty,\infty)$	$w(x)=e^{-x^2}$	Polinomul Hermite
$[0,\infty)$	$w(x)=e^{-x}$	Polinomul Laguerre
$[-1,1]$	$w(x)=(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$, $\alpha,\beta>-1$	Polinomul Jacobi

În continuare vom exemplifica cum se pot construi polinoamele ortogonale $\{P_n^*\}$ cu ajutorul Teoremei 1.

Fie $[a,b] = [-1,1]$ şi $w(x)=1$.

$$c_k = \int_{-1}^{1} x^k dx = \left.\frac{x^{k+1}}{k+1}\right|_{-1}^{1} = \begin{cases} \dfrac{2}{k+1} & \text{pentru } k \text{ par} \\ 0 & \text{pentru } k \text{ impar} \end{cases} \qquad (8)$$

Să construim de exemplu polinomul Legendre de gradul 3. Sistemul (4) devine:

$$\begin{cases} c_0 a_0 + c_1 a_1 + c_2 a_2 = -c_3 \\ c_1 a_0 + c_{21} a_1 + c_3 a_2 = -c_4 \\ c_2 a_0 + c_3 a_1 + c_4 a_2 = -c_5 \end{cases} \tag{9}$$

Înlocuind (8) în (9) rezultă

$$\begin{cases} 2a_0 + \frac{2}{3}a_2 = 0 \\ \frac{2}{3}a_1 = -\frac{2}{5} \\ \frac{2}{3}a_0 + \frac{2}{5}a_2 = 0 \end{cases}$$

care admite soluția: $a_0 = a_2 = 0$; $a_1 = -\frac{3}{5}$. Aşadar, $P_3^*(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$.

Primele şase polinoame Legendre sunt:

1 ; x ; $x^2 - \frac{1}{3}$; $x^3 - \frac{3}{5}x$; $x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$; $x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{15}{63}x$

Fie $[a,b] = [-1,1]$ şi $w(x)= \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$.

$$c_0 = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx = \arcsin x\Big|_{-1}^{1} = \pi \ ; \ c_1 = \int_{-1}^{1} \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}dx = 0 \ .$$

Pentru calculul coeficienților $c_k = \int_{-1}^{1} \frac{x^k}{\sqrt{1-x^2}}dx$, facem schimbarea de variabilă $x = \sin t$ şi obținem

$$c_k = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin^k x dx = \frac{k-1}{k}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin^{k-2} x dx = \frac{k-1}{k}c_{k-2} \, .$$

Rezultă $c_k = 0$ pentru orice k impar şi

$$c_2 = \frac{\pi}{2}; \ c_4 = \frac{3}{4}\cdot\frac{\pi}{2}; \ c_6 = \frac{5}{6}\cdot\frac{3}{4}\cdot\frac{\pi}{2} \quad \text{etc.}$$

Să determinăm polinomul Cebîşev de speța I, T_3^* . Sistemul (4) devine

$$\begin{cases} \pi a_0 + \frac{\pi}{2}a_2 = 0 \\ \frac{\pi}{2}a_1 = -\frac{3\pi}{8} \\ \frac{\pi}{2}a_0 + \frac{\pi}{4}a_2 = 0 \end{cases}$$

care admite soluția: $a_0 = a_2 = 0$, $a_1 = -\frac{3}{4}$. Aşadar $T_3^* = x^3 - \frac{3}{4}x$.

În Capitolul IV, §3 am arătat că polinomul Cebîşev de gradul trei este: $T_3(x)=4x^3-3x$. După cum am precizat în Teorema 1, polinomul ortogonal se determină în afara unui factor constant de multiplicare.

Observăm că avem $T_3 = 4\,T_3^*$ şi în general $T_n=2^{n-1}\,T_n^*$, $n \in \mathbb{N}$.

Teorema 2. *Fie* P_n^* *un polinom de gradul* n *care este ortogonal pe intervalul* $[a,b]$ *în raport cu ponderea* w*, pe orice polinom de grad mai mic ca* n*. Atunci zerourile polinomului* P_n^* *sunt reale, simple şi aparțin intervalului* $[a, b]$.

Demonstrație.

Fie x_i, $i = \overline{1,k}$, zerourile polinomului P_n^* şi fie m_i ordinul de multiplicitate al zeroului x_i. Rezultă

$$P_n^*(x) = (x - x_1)^{m_1} \cdot \ldots \cdot (x - x_k)^{m_k},$$

unde $m_1 + m_2 + \ldots + m_k = n$. Presupunem că numerotarea zerourilor s–a făcut astfel încât $x_1, \ldots, x_l$, $l \le k$ sunt zerouri reale, aparțin intervalului $[a, b]$ şi au ordinele de multiplicitate impare.

Dacă $l = n$, teorema este demonstrată.

Să presupunem că $l < n$. Considerăm atunci polinomul

$$Q_l(x)=(x-x_1)(x-x_2)\ldots(x-x_l).$$

(Dacă $l = 0$, atunci alegem $Q_0 = 1$). Rezultă că polinomul produs $P_n^*(x)Q_\ell(x)$ păstrează semn constant pe $[a,b]$, deci

$$\int_a^b w(x)P_n^*(x)Q_\ell(x)dx \neq 0,$$

ceea ce contrazice faptul că P_n^* este ortogonal pe Q_l. ❑

Prin *formulă de cuadratură Gauss* se înțelege orice formulă

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + \ldots + A_n f(x_n) + R(f) \quad , \qquad (1)$$

unde nodurile $x_1, x_2, \ldots, x_n$ sunt zerourile polinomului P_n^* care este ortogonal pe $[a, b]$, în raport cu ponderea w, pe orice plinom de grad mai mic ca n. Vom avea astfel formule de cuadratură de tip Gauss–Legendre, Gauss–Cebîşev, Gauss–Hermite etc.

Teorema 3. *Orice formulă de cuadratură de tip Gauss are gradul de exactitate* $2n-1$.

Demonstraţie. Din Teorema 1 din introducerea în Capitolul V , ştim că formula (1) este exactă pentru polinoame de grad mai mic ca n. Fie Q_m un polinom de gradul m, unde $m\in\{ n, n+1, ..., (2n-1) \}$. Din teorema împărţirii avem

$$Q_m(x) = Q_{m-n}(x)\cdot P_n^*(x) + R_{n-1}(x),$$

unde R_{n-1} este un polinom de gradul $n-1$. Fie x_k, $k=\overline{1,n}$, zerourile polinomului P_n^*. Evident, rezultă

$$Q_m(x_k) = R_{n-1}(x_k), \quad k=\overline{1,n}. \tag{10}$$

În continuare avem:

$$\int_a^b w(x)Q_m(x)dx = \int_a^b w(x)P_n^*(x)Q_{m-n}(x)dx + \int_a^b w(x)R_{n-1}(x)dx .$$

Deoarece P_n^* este ortogonal pe Q_{m-n} rezultă:

$$\int_a^b w(x)Q_m(x)dx = \int_a^b w(x)R_{n-1}(x)dx \quad .$$

Ţinând seama că formula (1) este exactă pentru R_{n-1} obţinem

$$\int_a^b w(x)Q_m(x)dx = A_1R_{n-1}(x_1) + ... + A_nR_{n-1}(x_n).$$

În sfârşit, ţinând seama şi de (10) rezultă

$$\int_a^b w(x)Q_m(x)dx = A_1Q_m(x_1) + ... + A_nQ_m(x_n),$$

deci formula (1) este exactă pentru orice polinom de grad mai mic ca $2n$.

Pe de altă parte dacă notăm cu $g = (P_n^*)^2$, atunci g este un polinom de grad $2n$ şi restul

$$R(g) = \int_a^b w(x)g(x)dx - \sum_{i=1}^n A_i g(x_i) = \int_a^b w(x)g(x)dx > 0 .$$

Aşadar, formula (1) nu este exactă pentru g, deci gradul de precizie al acestei formule este $2n-1$. ❑

Observaţia 1. *Orice formulă de cuadratură care are gradul de precizie* $(2n-1)$ *este o formulă Gauss.*

Într–adevăr, considerăm formula

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = A_1f(z_1) + A_2f(z_2) + ... + A_nf(z_n) + R(f) \tag{11}$$

cu gradul de exactitate $(2n-1)$. Notăm cu

$$U_n(x)=(x-z_1)...(x-z_n).$$

Dacă Q este un polinom de grad mai mic ca n, atunci polinomul produs U_nQ, are gradul cel mult $2n-1$ şi formula (11) este exactă pentru acest polinom. Rezultă

$$\int_a^b w(x)U_n(x)Q(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i U_n(z_i)Q(z_i) = 0 .$$

Rezultă că U_n este un polinom de gradul n, care este ortogonal, în raport cu ponderea w, pe orice polinom de grad cel mult $(n-1)$. Din Teorema 1 rezultă că $U_n = c\,P_n^*$ şi deci că $z_1, ..., z_n$ sunt zerourile polinomului P_n^*. Aşadar, formula (11) este o formulă Gauss.

Observaţia 2. *Coeficienţii A_k din formula Gauss sunt pozitivi.*

Într–adevăr, fie x_k, $k = \overline{1,n}$, zerourile polinomului P_n^*, şi fie

$$Q_j(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^n \left(x - x_j\right)^2 .$$

Evident, gradQ_j = $2n-2$ şi $Q_j(x_i) = 0$ dacă $i\neq j$. Deoarece $Q_j \geq 0$ şi formula (1) este exactă pentru Q_j rezultă

$$0 < \int_a^b w(x)Q_j(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i Q_j(x_i) = A_j Q_j(x_j),$$

deci $A_j > 0$.

În particular, obţinem

$$A_j = \frac{\int_a^b w(x)Q_j(x)dx}{Q_j(x_j)}, \quad j=\overline{1,n} \quad . \tag{12}$$

Formula (12) permite calculul coeficienţilor din formula Gauss.

Teorema 4. *Fie $x_i^{(n)}$, $i=\overline{1,n}$, zerourile polinomului P_n^* şi fie $A_i^{(n)}$, $i=\overline{1,n}$, coeficienţii din formula Gauss corespunzătoare.*

Dacă $f: [a,b] \to R$ este continuă şi $I_n = \sum_{i=1}^n A_i^{(n)} f(x_i^{(n)})$, atunci

$$\lim_{n\to\infty} I_n = \int_a^b w(x)f(x)dx .$$

Demonstraţie. Din teorema Weierstrass (Capitolul IV, Teorema 4) rezultă că pentru orice $\varepsilon > 0$ există un polinom P_ε astfel încât

$$\left|f(x) - P_\varepsilon(x)\right| < \varepsilon \quad \text{pentru orice} \quad x \in [a, b] .$$

Fie $n >$ grad P_ε. Atunci formula Gauss este exactă pentru P_ε şi avem:

$$\left|\int_a^b w(x)f(x)\,dx - I_n\right| = \left|\int_a^b w(x)f(x)\,dx - \sum_{i=1}^n A_i^{(n)} f(x_i^{(n)})\right| \le$$

$$\le \left|\int_a^b w(x)\left[f(x) - P_\varepsilon(x)\right]dx + \sum_{i=1}^n A_i^{(n)}\left[P_\varepsilon(x_i^{(n)}) - f(x_i^{(n)})\right]\right| \le$$

$$\le \int_a^b w(x)\left|f(x) - P_\varepsilon(x)\right| dx + \sum_{i=1}^n A_i^{(n)}\left|P_\varepsilon(x_i^{(n)}) - f(x_i^{(n)})\right| <$$

$$< \varepsilon\left(\int_a^b w(x)\,dx + \sum_{i=1}^n A_i^{(n)}\right) = 2\varepsilon\int_a^b w(x)dx \;.$$

Am folosit faptul că $\int_a^b w(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i^{(n)}$.

Aşadar,

$$\lim_{n\to\infty} I_n = \int_a^b w(x)f(x)dx$$

şi cu aceasta teorema este demonstrată. ❑

Exemplu. *Formula Gauss–Legendre cu trei noduri*

Polinomul Legendre de gradul trei este

$$P_3^*(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

şi are zerourile

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}};\;\; x_2 = 0;\;\; x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}} \;.$$

Vom avea

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = A_1 f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + A_2 f(0) + A_3 f(\sqrt{\frac{3}{5}}) + R(f) \;. \qquad (13)$$

Punând condiția ca formula (13) să fie exactă pentru 1, x şi x^2 obținem sistemul:

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + A_3 = 2 \\ -\sqrt{\frac{3}{5}}A_0 + \sqrt{\frac{3}{5}}A_3 = 0 \\ \frac{3}{5}A_0 + \frac{3}{5}A_3 = \frac{2}{3} \end{cases}$$

care admite soluția: $A_0 = A_3 = \dfrac{5}{9}$ şi $A_1 = \dfrac{8}{9}$.

Formula Gauss–Legendre de ordinul trei este

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{5}{9} f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\sqrt{\frac{3}{5}}) + R(f).$$

§5.3. Integrarea numerică a integralelor duble

Fie $f: D \subset \mathrm{R}^2 \to \mathrm{R}$ o funcție continuă, unde D=[a,b]× [c,d] este un dreptunghi. Atunci:

$$\iint_D f(x,y)dxdy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy \right) dx \tag{1}$$

Pentru fiecare integrală simplă putem aplica o formulă de integrare numerică. De exemplu, dacă aplicăm formula trapezelor obținem

$$\begin{aligned} &\iint_D f(x,y)dxdy \cong \int_a^b \frac{d-c}{2} [f(x,c) + f(x,d)] dx = \\ &= \frac{b-a}{2} \frac{d-c}{2} [f(a,c) + f(a,d) + f(b,c) + f(b,d)] \end{aligned}.$$

Așadar, *formula trapezelor* pentru integrala (1) este

$$\iint_D f(x,y)dxdy = \frac{(b-a)(d-c)}{4} [f(a,c) + f(a,d) + f(b,c) + f(b,d)] + R(f). \tag{2}$$

În mod asemănător, *formula Simpson* va fi

$$\begin{aligned} &\iint_D f(x,y)dxdy = \frac{(b-a)(d-c)}{36} [f(a,c) + f(a,d) + f(b,c) + f(b,d) + \\ &4[f(a,y_1) + f(b,y_1) + f(x_1,c) + f(x_1,d) + 16 f(x_1,y_1)] + \widetilde{R}(f) \end{aligned} \tag{3}$$

unde $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $y_1 = \frac{c+d}{2}$.

Pentru o mai bună aproximare a integralei se folosesc formulele repetate.

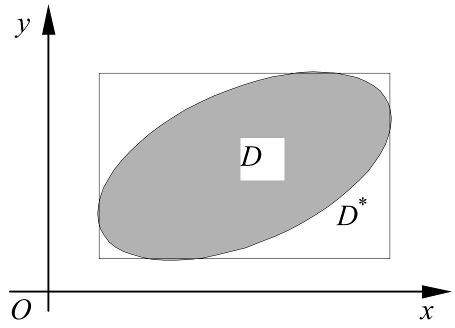
Dacă domeniul de integrare nu este un dreptunghi, atunci se construiește un dreptunghi D^*, cu laturile paralele cu axele de coordonate și care include dreptunghiul D. Considerăm funcția auxiliară

$$f^*(x,y)=\begin{cases} f(x,y) & \text{dacă} \quad (x,y)\in D \\ 0 & \text{dacă} \quad (x,y)\in D^* \backslash D \end{cases}$$

Integrala pe D se va aproxima cu

$$\iint_D f(x,y)dxdy \cong \int_{D^*} f^*(x,y)dxdy,$$

iar ultima integrală se calculează cu una din formule (2) sau (3).



§5.4. *Diferențe divizate. Polinomul de interpolare al lui Newton*

Fie $P_n(x;x_0,...,x_n)$ polinomul Lagrange care interpolează funcția $f:[a,b]\to \mathrm{R}$ în nodurile $x_0,...,x_n$ şi fie

$$Q(x)=P_n(x;x_0,...,x_{n-1},x_n)-P_{n-1}(x;x_0,...,x_{n-1}) \qquad (1)$$

Evident, Q este un polinom de gradul n, care se anulează în nodurle $x_0, x_1, \ldots,$ x_{n-1}, deoarece $Q(x_i) = f(x_i) - f(x_i) = 0$, pentru orice $i=\overline{0,n-1}$. Rezultă că polinomul Q este de forma:

$$Q(x) = a(x-x_0)\ \ldots\ (x-x_n)\ . \qquad (2)$$

Coeficientul a se numeşte *diferența divizată de ordinul* n corespunzătoare nodurilor $x_0, x_1, \ldots, x_n$ şi funcției f şi se notează cu $f[x_0, x_1, ..., x_n]$.

Aşadar, avem:

$$Q(x) = (x-x_0)\ \ldots\ (x-x_n) f[x_0, x_1, ..., x_n] \qquad (3)$$

Din (1) rezultă, pe de o parte, că $f[x_0, x_1, ..., x_n]$ este coeficientul lui x^n în polinomul lui Lagrange $P_n(x; x_0, x_1, \ldots, x_n)$, iar pe de altă parte că avem relația:

$$P_n(x; x_0, x_1, ..., x_n) = P_{n-1}(x; x_0, x_1, ..., x_{n-1}) +$$
$$+(x-x_0)...(x-x_{n-1}) f[x_0, \ldots , x_n] \qquad (4)$$

Particularizându-l pe n obținem:

$P_0(x;x_0) = f(x_0)$

$P_1(x;x_0, x_1) = f(x_0) + (x-x_0) f[x_0, x_1]$

$P_2(x;x_0, x_1, x_2) = f(x_0) + (x-x_0) f[x_0, x_1] + (x-x_0)(x-x_1) f[x_0, x_1, x_2]$

. . . .

$P_n(x) = f(x_0) + (x-x_0) f[x_0, x_1] + ... + (x-x_0)...(x-x_{n-1}) f[x_0, x_1, ..., x_n]$ (5).

Forma (5) a polinomului de interpolare poartă numele de *polinomul de interpolare al lui Newton.*

În continuare prezentăm principalele proprietăți ale diferențelor divizate.

1) Diferența divizată de ordinul n este invariantă la permutarea nodurilor, adică:

$$f[x_0, x_1, ..., x_n] = f[x_{i_0}, x_{i_1}, ..., x_{i_n}].$$

Într-adervăr ştim că polinomul de interpolare al lui Lagrange are forma:

$$\begin{aligned} P_n(x;x_0,...,x_n) &= \frac{(x-x_1)\cdot ... \cdot (x-x_n)}{(x_0-x_1)\cdot ... \cdot (x_0-x_n)} f(x_0) + \cdots + \\ &+ \frac{(x-x_0)\cdot ... \cdot (x-x_{n-1})}{(x_n-x_1)\cdot ... \cdot (x_n-x_{n-1})} f(x_n) \end{aligned} \tag{6}$$

Egalând coeficientul lui x^n din (3) şi (6) obținem:

$$f[x_0,x_1,...,x_n] = \frac{f(x_0)}{(x_0-x_1)...(x_0-x_n)} + ... + \frac{f(x_n)}{(x_n-x_0)...(x_n-x_{n-1})} \tag{7}$$

Cum expresia din membrul drept al relației (7) este simetrică în raport cu cu nodurile $x_0, x_1, ..., x_n$, rezultă că diferența divizată dordinul n, $f[x_0, x_1, ..., x_n]$ este invariantă în raport cu permutarea nodurilor.

2) $f[x_0,...,x_n] = \dfrac{f[x_1,...,x_n] - f[x_0,...,x_{n-1}]}{x_n - x_0}$

Pentru a demonstra această proprietate observăm pentru început că polinomul lui Lagrange verifică următoarea relație:

$$P_n(x;x_0,...,x_n) = \frac{(x-x_0)P_{n-1}(x;x_1,...x_n) - (x-x_n)P_{n-1}(x;x_0,x_1,...x_{n-1})}{x_n - x_0} \tag{8}$$

Într-adevăr, dacă notăm cu $R(x)$ membrul drept al relației (6) obținem:

$$R(x_0) = -\frac{(x_0-x_n)}{x_n-x_0} f(x_0) = f(x_0)$$

$$R(x_n) = -\frac{(x_n - x_0)}{x_n - x_0} f(x_n) = f(x_n)$$

Pentru nodurile $x_i, i = \overline{1, n-1}$ avem

$$R(x_i) = -\frac{(x_i - x_0)f(x_i) - (x_i - x_n)f(x_i)}{x_n - x_0} = f(x_i)$$

Aşadar, $R(x_i) = f(x_i), i = \overline{0,n},$ deci $R(x) \equiv P_n(x; x_0, ..., x_n)$ conform unicităţii polinomului de interpolare Lagrange. Egalând coeficientul lui x^n din membrul stâng al relaţiei (8) cu coeficientul lui x^n din membrul drept al acestei relaţii obţinem $f[x_0, ..., x_n] = \dfrac{f[x_1, ..., x_n] - f[x_0, ..., x_{n-1}]}{x_n - x_0}$.

3) Dacă f este de clasă C^{n+1}, atunci pentru orice $t \in [a,b]$, $t \neq x_i$, $i = \overline{0,n}$ avem $f[x_0, x_1, ..., x_n, t] = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi_t)}{(n+1)!}$, unde $\xi_t \in [a,b]$.

Într-adevăr, fie $P_{n+1}(x) = P_{n+1}(x; x_0, ..., x_n, t)$ polinomul Lagrange care interpolează funcţia f în nodurile $x_0, ..., x_n, t$. Atunci avem

$$P_{n+1}(x) = P_n(x) + (x-x_0) \ldots (x-x_n) f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t].$$

Deoarece $P_{n+1}(t) = f(t)$ rezultă că eroarea în punctul t este

$$E(f;t) = f(t) - P_n(t) = (t-x_0) \ldots (t-x_n) f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t]. \tag{9}$$

Pe de altă parte din Teorema 2, §4.1 ştiim că dacă f este de clasă C^{n+1}, atunci există $\xi_t \in [a,b]$ astfel încât

$$E(f;t) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_t)}{(n+1)!}(t-x_0)\ldots(t-x_n) \tag{10}$$

Din (9) şi (10) rezultă

$$f[x_0, x_1, ..., x_n, t] = \frac{f^{(n+1)}(\xi_t)}{(n+1)!}, \quad \text{unde} \quad \xi_t \in [a, b]. \tag{11}$$

4) ***Teorema 1 (Hermite–Gennochi).*** *Fie* $x_0, x_1, \ldots, x_n$, $(n+1)$ *puncte distincte din intervalul* (a, b) *şi fie* $f \in C^{(n)}(a,b)$. *Atunci:*

$$f[x_0, x_1, ..., x_n] = \int_{T_n} \ldots \int f^{(n)}(t_0 x_0 + t_1 x_1 + \ldots + t_n x_n) dt_1 \ldots dt_n$$

unde $T_n = \left\{ (t_1,\dots,t_n) \in R^n \,\middle|\, t_i \geq 0,\ i=\overline{1,n},\ \sum_{i=1}^{n} t_i \leq 1 \right\}$, *iar* $t_0 = 1 - \sum_{i=1}^{n} t_i$.

Demonstrație. Fie $T_1 = [0, 1]$ iar $t_0 = 1-t_1$.

$$\int_0^1 f'(t_0x_0 + t_1x_1)dt_1 = \int_0^1 f'[x_0 + t_1(x_1 - x_0)]dt_1 = \frac{1}{x_1 - x_0} f[x_0 + t_1(x_1 - x_0)]\Big|_0^1 =$$

$$= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1]$$

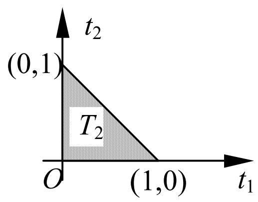
$T_2 = \{ (t_1,t_2) \mid t_1+t_2 \leq 1,\ t_1 \geq 0,\ t_2 \geq 0 \}$, iar $t_0 = 1-t_1-t_2$.

$$\iint_{T_2} f''(x_0t_0 + x_1t_1 + x_2t_2)dt_1dt_2 = \int_0^1 \left(\int_0^{1-t_1} f''(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + t_2(x_2 - x_0))dt_2 \right) dt_1 =$$

$$= \int_0^1 \left(\frac{1}{x_2 - x_0} f'(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + t_2(x_2 - x_0))\Big|_0^{1-t_1} \right) dt_1 =$$

$$= \frac{1}{x_2 - x_0} \left[\int_0^1 f'(x_2 + t_1(x_1 - x_2))dt_1 - \int_0^1 f'(x_0 + t_1(x_1 - x_0))dt_1 \right] =$$

$$= \frac{1}{x_2 - x_0} (f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]) = f[x_0, x_1, x_2]$$



În continuare demonstrația se face prin inducție matematică.

Trecerea de la T_n la T_{n+1} este asemănătoare cu trecerea de la T_1 la T_2. ❑

Corolarul 1. *Dacă* $f \in C^{n+2}(a,b)$ *. Atunci există*

$$\frac{d}{dx} f[x_0, \dots, x_n, x] = f[x_0, \dots, x_n, x, x].$$

Demonstrație. Din Teorema 1 rezultă

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] = \int \dots \int_{T_{n+1}} f^{(n+1)}(t_0x_0 + t_1x_1 + \dots + +t_{n+1}x)dt_1 \dots dt_n dt_{n+1} \quad (12)$$

Membrul drept este o integrală cu parametru şi anume cu parametrul x. Deoarece $f^{(n+1)}$ este de clasă C^1 rezultă că această integrală este derivabilă, deci că există $\frac{d}{dx} f[x_0,...,x_n,x]$. Mai departe, ţinând seama de (7) şi (9) rezultă:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} f[x_0,...,x_n,x] &= \lim_{h\to 0} \frac{f[x_0,...,x_n,x+h]-f[x_0,...,x_n,x]}{h} = \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{f[x_0,...,x_n,x+h]-f[x,x_0,...,x_n]}{h} = \\
&= \lim_{h\to 0} f[x,x_0,...,x_n,x+h] = f[x,x_0,...,x_n,x] = \\
&= f[x_0,...,x_n,x,x]
\end{aligned}$$

❑

§5.5. Derivarea numerică

Aproximarea numerică a derivatelor se foloseşte de regulă în două situaţii. Prima situaţie se referă la calculul derivatelor unei funcţii dată printr–un tabel de valori. A doua situaţie se referă la aproximarea derivatelor în cadrul metodelor numerice de rezolvare a ecuaţiilor diferenţiale sau cu derivate parţiale.

O cale firească de abordare a derivării numerice, este aceea de a aproxima derivata funcţiei f prin derivata polinomului Lagrange $P_n(x;x_0,...,x_n)$ care interpolează funcţia f în nodurile $x_0, x_1, ..., x_n$. În continuare notăm derivata numerică a funcţiei f cu $D_h f$ şi o definim prin:

$$D_h f(x) \underset{\overline{\overline{}}}{\text{def}} P_n'(x;x_0,...,x_n) \quad . \tag{1}$$

Aşadar folosim aproximarea $f'(x) \approx D_h f(x)$.

Pentru $n=1$ avem $P_1(x;x_0,x_1) = f(x_0) + (x-x_0) f[x_0,x_1]$ deci

$$f'(x) \approx P_1'(x;x_0,x_1) = f[x_0,x_1] = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}, \forall x$$

Aşadar, pentru două noduri avem aproximarea:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \tag{2}$$

Pentru $n = 2$ avem

$P_2(x; x_0, x_1, x_2) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2]$ deci

$P_2'(x; x_0, x_1, x_2) = f[x_0, x_1] + [2x - (x_0 + x_1)] f[x_0, x_1, x_2], \ \forall x$

Dacă presupunem în plus că nodurile sunt echidistante rezultă:

$$\begin{aligned} P_2'(x_0; x_0, x_1, x_2) &= f(x_0, x_1) + (x_0 - x_1) f[x_0, x_1, x_2] = \\ &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} - (x_1 - x_0) \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \\ &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - h \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}}{2h} = \\ &= \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h} \end{aligned}$$

Aşadar, pentru trei noduri echidistante avem aproximarea:

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h} \tag{3}$$

În continuare ne propunem să evaluăm eroarea la derivarea numerică. Dacă notăm cu $U_n(x) = (x - x_0) \ ... \ (x - x_n)$, atunci din relațiile (10) şi (11) de la §5.4 rezultă $E(f;x) = f(x) - P_n(x;\, x_0, ..., x_n) = U_n(x) f[x_0, ..., x_n, x]$.

Ținând seama acum şi de Corolarul 1 obținem:

$$f'(x) - D_h f(x) = U_n'(x) f[x_0, ..., x_n, x] + U_n(x) f[x_0, ..., x_n, x, x].$$

Aplicând din nou relația (10) din §5.4 rezultă

$$f'(x) - D_h f(x) = U_n'(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} + U_n(x) \frac{f^{(n+2)}(\tilde{\xi}_x)}{(n+2)!} \tag{4}$$

Pentru $n = 1$, $U_1(x) = (x - x_0)(x - x_1)$ şi $U_1'(x) = 2x - (x_0 + x_1)$. Aşadar în acest caz

$$f'(x_0) - D_h f(x_0) = U_1'(x_0) \frac{f''(\xi_{x_0})}{2!} + 0 \frac{f'''(\tilde{\xi}_{x_0})}{3!} = -\frac{h}{2} f''(\xi_{x_0}) \tag{5}$$

În concluzie, în cazul a două noduri avem $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{h}$ şi eroarea este dată de relația

$$f'(x_0) - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2} f''(\xi_{x_0}) \qquad (6)$$

unde $\xi_{x_0} \in (x_0, x_1)$.

În cazul a 3 noduri echidistante $n = 2$ avem:

$$f'(x_0) - P_2' f(x_0; x_0, x_1, x_2) = \frac{f'''(\xi_{x_0})}{3!} U_2'(x_0) + \frac{f^{iv}(\tilde{\xi}_{x_0})}{4!} U_2(x_0)$$

cum $U_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$ rezultă pe de o parte că $U_2(x_0) = 0$ iar pe de altă parte că $U_2'(x) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = 2h^2$.

Aşadar eroarea de aproximare a derivatei va fi:

$$f'(x_0) - P_2' f(x_0; x_0, x_1, x_2) = \frac{h^2}{3} f'''(\xi_{x_0}), \text{ unde } \xi_{x_0} \in (x_0, x_2).$$

În concluzie, în cazul a 3 noduri echidistante derivata se aproximează cu expresia:

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h} = D_h f(x_0)$$

iar eroarea care se face este $f'(x_0) - D_h f(x_0) = \dfrac{h^2}{3} f'''(\xi_{x_0})$ (7)

În sfârşit să vedem cum se poate aproxima derivata de ordinul 2.

În cazul a 3 noduri echidistante avem

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= P_2''(x_0; x_0, x_1, x_2) = 2f[x_0, x_1, x_2] = \\ &= \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} \end{aligned} \qquad (8)$$

Se poate arăta că eroarea în acest caz este

$$f''(x_0) - P_2''(x_0) = -\frac{h^2}{12} f^{IV}(\xi_{x_0}), \text{ unde } \xi_{x_0} \in (x_0, x_2) \qquad (9)$$

Derivarea numerică în MATLAB.

MATLAB permite aproximarea derivatei numerice a unei funcții folosind diferențele divizate, prin intermediul funcției *diff.*

Exemplu 1.

Să se aproximeze derivata funcției $f(x) = \ln(x^4+x^2+1)$ pe intervalul [0.5, 2.5] în puncte echidistante ($h = 0.1$) folosind MATLAB. Secvența care realizeză această aproximare este:

```
% Calculul derivatei numerice
x = 0.5:0.1:2.5; % punctele in care se face aproximarea
f(x) = log(x.^4+x.^2+1); % functia a carei derivata se doreste
disp('Valorile derivatei');
df = diff(log(x.^4+x.^2+1))./diff(x)
```

Se va afisa:

Valorile derivatei

1.2657 1.4967 1.6947 1.8499 1.9597 2.0270 2.0579 2.0600 2.0406
2.0060 1.9612 1.9100 1.8552 1.7989 1.7423 1.6866 1.6323 1.5798
1.5293 1.4809

Pentru calculul derivatei folosind diferențele centrate se poate scrie secvența MATLAB:

```
% Calculul derivatei numerice folosind diferentele divizate
x=0.55:0.1:2.5;  % punctele in care se face aproximare
g=log(x. ^4+x. ^2+1; % functia a carei derivata se doreste
dg=g(3:length(g))–g(1:length(g)–2);
dx=x(3:length(x))–x(1:length(x)–2);
disp(‘Valorile derivatei’);
dy=dg./dx  %  derivata in punctele  x=0.6 ,  0.7  pana la 2.4
```

Se afişează rezultatele:

Valorile derivatei

1.3812 1.5957 1.7723 1.9048 1.9934 2.0424 2.0589 2.0503 2.0233
1.9836 1.99356 1.8826 1.8270 1.7706 1.7145 1.6595 1.6060 1.5545
1.5051

Pentru a folosi polinomul de interpolare Newton pentru calculul derivatelor de ordinul întâi şi doi pentru funcţia de mai sus, se poate scrie secvenţa MATLAB:

```
% Calculul derivatelor de ordinul intai si doi
% folosind polinomul de interpolare Newton in x(1)
x=0.5.0.1:1.3;
h=x(2)–x(1);
y=log(x.^4+x.^2+1); % functia ale carei derivate se aproximative
        se calculeaza
d1y=diff(y);
d2(y)=diff(d2y);
d3y=diff(d2y);
d4(y)=diff(d3y);
d1f=(1/h)*(d1y(1)–d2y(1)/2+d3y(1)/3–d4y(1)/4),
d2f=(1/h^2)*(d2y(1)–d3y(1)+(11/12)*d4y(1));
disp('Derivata de ordinul intai in x(1)');
disp(d1f);
disp('Derivata de ordinul doi in x(1)');
disp(d2f);
```

Se afişează rezultatele:
Derivata de ordinul intai in $x(1)$
1.1416
Derivata de ordinul doi in $x(1)$
2.5519

Exemplul 2. Fie funcţia dată prin tabelul de valori:

x_i	0	2
$f(x_i)$	1	5

Să se calculeze $f'(0)$ folosind derivata polinomului de interpolare al lui Lagrange.

Aproximând funcţia cu polinomul de interpolare al lui Lagrange, conform (2) rezultă

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \quad , \quad f'(x_0) \approx \frac{5-1}{2} = 2 \ .$$

Exemplul 3. Fie funcția dată prin tabelul de valori:

x_i	2	4	6
$f(x_i)$	3	11	27

Să se calculeze $f'(2)$ şi $f''(2)$.

Aproximând funcția cu polinomul de interpolare al lui Lagrange, conform (3) rezultă

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h} \quad , \quad f'(2) = \frac{-3\cdot 3+4\cdot 11-27}{2\cdot 2} = 2 \quad .$$

De asemenea conform (8)

$$f''(x_0) = \frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{h^2} \quad , \quad f''(2) = \frac{27-2\cdot 11+3}{4} = 2 \, .$$

Exerciţii

Folosind metoda trapezelor să se calculeze valoarea aproximativă a următoarelor integrale:

1. $\int_{\frac{\pi}{12}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx$, considerând $n = 5$ subintervale egale.

R. $h = \frac{\pi}{12}$, $x_i = \frac{\pi}{12} + i \cdot \frac{\pi}{12}$, $i = \overline{1,4}$, $a = \frac{\pi}{12}$, $b = \frac{\pi}{2}$, I=1.003 .

2. $\int_{\frac{\pi}{10}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx$, considerând $n = 4$ subintervale egale.

R. $h = \frac{\pi}{10}$, $x_i = \frac{\pi}{10} + i \cdot \frac{\pi}{10}$, $i = \overline{1,3}$, $a = \frac{\pi}{10}$, $b = \frac{\pi}{2}$, I=0.86398 .

3. $\int_0^3 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$, *considerând* $n = 4$ *subintervale egale.*

R. $h = \frac{3}{4} = 0.75$, $x_i = 3 \cdot i$, $i = \overline{1,3}$, $a = 0$, $b = 3$, $I = 2.24845$.

Pentru fiecare din cele trei exerciţii de mai sus să se calculeze valoarea aproximativă a integralei dublând valoarea lui n .

Să se calculeze valoarea aproximativă a următoarelor integrale folosind metoda lui Simpson, considerând m , *numărul de subintervale egale, specificat în fiecare caz în parte:*

5. $\int_{\frac{\pi}{10}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx$ $(m = 8)$

R. $n = 4$, $h = \frac{\pi}{20}$, $x_i = \frac{\pi}{10} + i \cdot \frac{\pi}{20}$, $i = \overline{1,7}$, $a = \frac{\pi}{10}$, $b = \frac{\pi}{2}$,
$I = 0.8452$.

6. $\int_{\frac{\pi}{12}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx$ (m = *8*)

R. $n = 4$, $h = \frac{5\pi}{96}$, $x_i = \frac{\pi}{12} + i \cdot \frac{\pi}{96}$, $i = \overline{1,7}$, $a = \frac{\pi}{12}$, $b = \frac{\pi}{2}$,
I = *1.00966* .

7. $\int_0^3 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$, (m = *8*)

R. $h = \frac{3}{8} = 0.375$, $x_i = \frac{3}{8} \cdot i$, $i = \overline{1,7}$, a = *0* , b = *3* , I = *2.24991* .

8. Fie funcția dată prin tabelul de valori:

x_i	0	2
$f(x_i)$	-1	3

Să se calculeze $f'(0)$ folosind derivata polinomului de interpolare al lui Lagrange.

R. $f'(0) = 2$

9. Fie funcția dată prin tabelul de valori:

x_i	0	1	2
$f(x_i)$	1	4	15

Să se calculeze $f'(0)$ şi $f''(0)$ folosind derivata polinomului de interpolare al lui Lagrange.

R. $f'(0) = -1$, $f''(0) = 8$

10. Fie funcția dată prin tabelul de valori:

x_i	0	2	4
$f(x_i)$	1	9	65

Să se calculeze $f'(0)$ şi $f''(0)$ folosind derivata polinomului de interpolare al lui .

R. $f'(0) = -8$, $f''(0) = 12$

11. Folosind formula Gauss–Legendre de ordinul 4, să se calculeze valoarea aproximativă a integralei $\int_0^3 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$.

R. În general pentru calculul aproximativ al integralelor $\int_a^b f(x)dx$ *se face schimbarea de variabilă* $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, *pentru a avea limitele de integrare –1 şi 1 şi astfel se obţine formula*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \quad . \tag{2}$$

Se ajunge la integrala $\frac{3}{2}\int_{-1}^{1} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{3t+3}{2}\right)^2} dt$ *căreia i se poate aplica formula Gauss–Legendre de ordinul 4. Polinomul Legendre de gradul 4 este* $P_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$ *, are rădăcinile* $x_1 = -0.8611$, $x_2 = -0.34$, $x_3 = 0.34$, $x_4 = 0.8611$. *Coeficienţii* A_i *formula Gauss–Legendre de ordinul 4 sunt:*

$A_1 = 0.34785 = A_4$, $A_2 = 0.65215 = A_3$. $I = 1.25018$.

12. Folosind formula Gauss–Legendre de ordinul 5, să se calculeze valoarea aproximativă a integralei $\int_0^2 \cos x^2 dx$.

R. Se face schimbarea de variabilă $x = t+1$, *pentru a avea limitele de integrare –1 şi 1 şi astfel se ajunge la integrala* $\int_{-1}^{1} \cos(t+1)^2 dt$ *căreia i se poate aplica formula Gauss–Legendre de ordinul 5. Polinomul Legendre de gradul 5 este* $P_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{15}{63}x$, *are rădăcinile* $x_1 = -0.90618$, $x_2 = -0.53847$, $x_3 = 0$, $x_4 = 0.53847$, $x_5 = 0.90618$. *Coeficienţii* A_i *formula Gauss–Legendre de ordinul 5 sunt:*

$A_1 = 0.23693 = A_5$, $A_2 = 0.47863 = A_4$, $A_3 = 0.56889$. $I = 0.46123$.

13. Să se determine valoarea aproximativă a integralei $\int_0^1 \sin x^2 dx$ *folosind formula Gauss–Legendre de ordinul 3.*

R. *Înlocuind* x *cu* t+*1* *integrala devine* $\int_{-1}^{1} \sin(t+1)^2\, dx$ *şi acesteia i se poate aplica formula Gauss–Legendre de ordinul 3. Ţinând seama de Exemplul din Capitolul 5 §2 se obţine* I=*0.31028* .

Să se calculeze valoarea aproximativă a următoarelor integrale duble:

14. $\iint_D e^{-\left(x^2+y^2\right)} dxdy$, *mulţimea de integrare fiind precizată de*

a) D = $\{ (x,y) \in R^2 \,/\, |x| \le 0.5 ,\ |y| \le 1 \}$,

b) D = $\{ (x,y) \in R^2 \,/\, x^2+y^2 \le 4 ,\ x \ge 0 ,\ y \ge 0 \}$

folosind formula trapezelor cu n = *4* *subintervale egale pe axa* Ox *şi* m = *4* *subintervale egale pe axa* Oy.

R. *Pentru calculul integralei* I = $\iint_D f(x,y)dxdy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy \right) dx$ *unde* D = $[a, b] \times [c, d]$ *se foloseşte formula trapezelor repetată*

$$I = \frac{h \cdot k}{4} \{ f(a,c) + f(a,d) + f(b,c) + f(b,d) +$$

$$+ 2\left[\sum_{j=1}^{m-1} f(a,y_j) + \sum_{j=1}^{m-1} f(b,y_j) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,c) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,d) + \right] +$$

$$+ 4 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{m-1} f(x_i,y_j) \ \} \qquad (1)$$

unde

$h = \dfrac{b-a}{n}$, $k = \dfrac{d-c}{m}$, $x_i = a + ih$, $i = \overline{1,n\text{-}1}$, $y_j = c + jk$, $j = \overline{1,m\text{-}1}$

a) a = *–0.5* , b = *0.5* , c = *–1* , d = *1* , h = *0.25* , k = *0.5* , I = *1.33754*

b) *Se trece la coordonate polare pentru a transforma sfertul de disc de rază 2 din cadranul întâi într–un dreptunghi*

$$\begin{cases} x = \rho \cdot \cos\theta & \theta \in \left[0, \dfrac{\pi}{2}\right] \\ y = \rho \cdot \sin s\theta & \rho \in [0, 2] \end{cases}$$

, *iar iacobianul este* J = ρ

şi se aplică formula de mai sus integralei

$$I = \iint_D e^{-\left(x^2+y^2\right)} dxdy = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\int_0^2 \rho \cdot e^{-\rho^2} d\rho \right) d\theta$$

şi rezultă I = *0.73332* .

15. $\iint_D \frac{\ln\left(x^2+y^2\right)}{x^2+y^2} dxdy$, *mulţimea de integrare fiind precizată de*

a) D = *{ (*x,y*)* $\in R^2$ */ 1*≤x≤*2 , 0*≤y≤*2 } ,*

b) D = *{ (*x,y*)* $\in R^2$ */ 1*≤x^2+y^2≤*4 , 0*≤x , *0*≤y *}*

folosind formula trapezelor cu n = *2* *subintervale egale pe axa* Ox *şi* m = *4* *subintervale egale pe axa* Oy.

R. *a) Înlocuind în formula (1)*

$$a = 1\ ,\ b = 2\ ,\ c = 0\ ,\ d = 2\ ,\ h = 0.5 = k \quad \text{şi} \quad f(x,y) = \frac{\ln\left(x^2+y^2\right)}{x^2+y^2}$$

se obţine I = *0.636* .

b) *Trecând la coordonate polare se aplică formula (1) pentru*

$$a = 1\ ,\ b = 2\ ,\ c = 0\ ,\ d = \frac{\pi}{2}\ ,\ f(\rho,\theta) = \frac{2\ln\rho}{\rho}$$

şi se obţine I = *0.73976* .