CURS 5

INTERPOLARE POLINOMIALĂ. DERIVARE NUMERICĂ.

I. Interpolare polinomială

II. Derivare numerică.

I. INTERPOLARE POLINOMIALĂ

1 Introducere

1.1 Polinomul de interpolare

Problema: fie o funcție *f*, cunoscută prin valorile ei pe $(n+1)$ puncte distincte x_i, ca în tabelul următor:

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	f_0	f_1	f_2	$\cdots$	f_n

Punctele x_i se numesc *noduri* şi s-a notat $f_i = f(x_i),\ i = \overline{0,n}$.

Se cere să se găsească un polinom p_n de grad cel mult *n*, care să coincidă cu funcția *f* pe nodurile x_i (sau, al cărui grafic să treacă prin punctele (x_i, f_i)), adică:

$$p_n(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,n} \tag{0}$$

Se zice că p_n este *polinomul de interpolare* al funcției *f*, pe nodurile date. Un prim rezultat este dat de următoare propoziție:

Propoziția 1

Polinomul de interpolare (al funcției *f*, pe $n+1$ noduri) există şi este unic ■

Demonstrație:

(1) *Existența*: Existența se poate proba construind efectiv polinomul (aceasta se va face în paragrafele următoare). Aici, procedăm prin inducție asupra lui n: pentru $n = 0$, luăm ca polinom p_0 funcția constantă $p_0(x) = f_0$. Fie atunci p_{k-1} polinomul de interpolare pe nodurile $x_0, \ldots, x_{k-1}$, adică p_{k-1} este de grad $\le k-1$, şi

$$p_{k-1}(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0, k-1}. \tag{$*$}$$

Definim:

$$p_k(x) = p_{k-1}(x) + c_k(x - x_0)\ldots(x - x_{k-1})$$

Este evident că p_k satisface condițiile ($*$), şi atunci determinăm c_k astfel ca să avem şi

$$p_k(x_k) = f_k$$

Se obține ecuația

$$f_k = p_k(x_k) + c_k(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1}) \tag{$**$}$$

în care, coeficientul lui c_k este diferit de zero, nodurile x_i fiind presupuse distincte. Cu aceasta, existența lui p_n este demonstrată.

(2) *Unicitatea*: Fie p_n şi q_n două polinoame de interpolare ale lui f, unde $p_n \ne q_n$. Considerăm atunci polinomul $r_n = p_n - q_n$: r_n este de grad cel mult n şi avem $r_n(x_i) = 0, i = \overline{0, n}$, adică r_n are $(n+1)$ rădăcini. Contradicția demostrează unicitatea lui p_n ■

Observație

După demonstrația (1), rezultă că polinomul de interpolare are forma

$$p_n(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + \ldots + c_n(x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}) \tag{1}$$

unde $c_0 = f_0$ şi c_k rezultă din ($**$). Acesta este forma Newton a polinomului de interpolare. O expresie explicită a coeficienților c_k se va da în 3. Alte construcții ale polinomului de interpolare, duc la alte forme ale acestuia – v. 2. Propoziția 1 arată că polinomul de interpolare este unic determinat, adică: indiferent de forma sub care este dat p_n, dacă acesta este desvoltat în forma $p_n(x) = a_0 + a_1x + \ldots + a_nx^n$, coeficienții a_k vor fi aceeaşi ■

Din punct de vedere practic, polinomul de interpolare serveşte la aproximarea valorii funcției *f*, pe un punct *x* care nu este nod. Problema interpolării polinomiale se poate pune, mai general, astfel: cunoscând valorile funcției *f* şi derivatei f' (sau derivatelor până la ordinul *k*) pe noduri, să se determine polinomul care coincide cu funcția şi derivata (derivatele), pe nodurile date. Aceasta conduce la polinomul de interpolare al lui Hermite sau polinomul osculator.

Pe lângă problema aproximării funcțiilor, polinomul de interpolare intervine în multe alte probleme de analiză numerică: formule de cuadratură (calculul numeric al integralelor), derivare numerică, metode numerice pentru ecuații diferențiale, etc..

1.2 Formula de interpolare (cu rest)

Definim *formula de interpolare* prin

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x) \qquad (2)$$

în care $R_n(x)$ este restul formulei. Conform definiției lui p_n, avem:

$$R_n(x_i) = 0\,,\ i = \overline{0,n} \qquad (3)$$

În ceea ce urmează vom considera evaluarea restului pe un punct *x* care nu este nod. Introduce următorul polinom care va servi şi în paragrafele următoare:

$$\omega_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) \qquad (4)$$

Cu acesta avem:

Propoziția 2

Fie funcția *f* definită pe un interval $[A, B]$ şi având derivată de ordinul (*n*+1) în $[A, B]$, şi p_n polinomul de interpolare pe nodurile distincte $x_i \in [A, B]$, $i = \overline{0,n}$. Fie încă, $x \in [A, B]$ şi $a = \min(x_0, \ldots, x_n, x)$ şi $b = \max(x_0, \ldots, x_n, x)$. Atunci:

$\exists \xi \quad a < \xi < b$, astfel că

$$R_n(x) = \frac{\omega_n(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \qquad (5)$$

unde $\omega_n(x)$ este definit de (4) ■

Observație

Dacă $f^{(n+1)}$ este mărginită în [*A*, *B*], fie $| f^{(n+1)}(x) | \le M_{n+1}$, rezultă marginea erorii reprezentării funcției prin polinomul de interpolare, sub forma:

$| f(x) - p_n(x) | \le \frac{1}{(n+1)!} M_{n+1} | \omega(x) |$

În particular, dacă *a* şi *b* au semnificația din enunț, eroarea se poate mărgini prin:

$| f(x) - p_n(x) | \le \frac{1}{(n+1)!} M_{n+1} (b-a)^{n+1}$

■

1.3 Polinomul de interpolare Lagrange

Căutăm polinomul de interpolare sub forma

$$p_n(x) = f_0 l_0(x) + f_1 l_1(x) + \ldots + f_n l_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j l_j(x) \qquad (6)$$

în care l_j sunt polinoame de grad $\le n$, care depind de nodurile x_i dar nu depind de f_i, $i = \overline{0,n}$. Întrucât se cere ca $p_n(x_i) = f_i$, $i = \overline{0,n}$, rezultă că trebuie să avem

$$l_j(x_i) = \delta_{ji}, \qquad i = \overline{0,n}, \qquad (7)$$

unde δ_{ji} este simbolul Kronecker. Pentru $i \ne j$ rezulltă că l_j are ca rădăcină pe x_i, şi atunci, forma polinomului l_j va fi

$$l_j(x) = c(x - x_0)\ldots(x - x_{j-1})(x - x_{j-1})\ldots(x - x_n) = c\frac{\omega_n(x)}{x - x_j}, \qquad (8)$$

unde $\omega_n(x)$ este definit de (4).

Punând condiția (7) pentru $j = i$, rezultă $1 = c\prod_{i=0,\, i\neq j}^{n}(x_j - x_i)$, sau

$$l_j(x) = \prod_{i=0,\, i\neq j}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)} \qquad (9)$$

Scriind $\omega_n(x) = (x - x_j)\prod_{i=0,\, i\neq j}^{n}(x - x_i)$, derivând în raport cu x şi punând $x = x_j$, rezultă

$$\omega_n'(x_j) = \prod_{i=0,\, i\neq j}^{n}(x_j - x_i). \qquad (10)$$

Cu aceasta, forma (8) a polinomului l_j se mai scrie:

$$l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_j)\omega_n'(x_j)} \qquad (11)$$

iar polinomul Lagrange ia forma explicită

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{f_j}{\omega_n'(x_j)} \frac{\omega_n(x)}{(x - x_j)} \qquad (12)$$

Observații

1) Polinoamele l_j se numesc *polinoamele fundamentale de interpolare*. Polinoamele fundamentale satisfac identitățile:

$$\sum_{j=0}^{n}(x_j)^k l_j(x) = x^k, \quad k = \overline{0, n} \qquad (13a)$$

$$\sum_{j=0}^{n} l_j(x) = 1 \qquad (13b)$$

Relația (13a) rezultă astfel: considerăm funcția $f(x) = x^k$, $0 \le k \le n$; polinomul $p_k(x) = x^k$ este de grad $\le n$ şi coincide cu funcția pe noduri; conform unicității, urmează că p_k este polinomul de interpolare; atunci, (13a) rezultă din (6). Relația (13b), este (13a) cu $k = 0$.

2) Fie **F** mulțimea funcțiilor definite pe un interval care conține nodurile $x_i,\ i = \overline{0, n}$.

Polinomul de interpolare sub forma lui Lagrange este dat de

$$p_n(x) = (L_n f)(x) \tag{14}$$

unde L_n este operatorul definit (pe mulțimea **F**) de

$$L_n f = \sum_{j=0}^{n} f_j l_j \tag{15}$$

Se verifică imediat, că operatorul L_n este liniar, adică, pentru $f, g \in \mathbf{F}$ şi $\alpha, \beta \in \mathbf{R}$, avem:

$$L_n(\alpha f + \beta g) = \alpha(L_n f) + \beta(L_n g) \tag{16}$$

În particular, dacă *f* este un polinom p_k de grad $k \le n$, avem:

$$L_n p_k = p_k \tag{17}$$

Relația (17) rezultă din unicitatea polinomului de interpolare.

Exercițiu: probați (17) ținând cont de (13a) şi (16).

■

2 Diferențe divizate şi polinomul de interpolare Newton

2.1 Diferențe divizate şi polinomul Newton cu diferențe divizate

Considerăm expresia (1) a polinomului de interpolare, şi definim polinoamele

$q_0(x) = 1$, $q_1(x) = x - x_0$, $q_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)$, … ,

sau, în general,

$$q_0(x) = 1; \quad q_k(x) = \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i), \quad k = \overline{1, n} \tag{18}$$

Observație: pentru $k \ge 1$, avem $q_k = \omega_{k-1}$, unde ω_n este definit de (4).

Polinomul de interpolare sub forma Newton se scrie atunci:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k q_k(x) \qquad (18')$$

Coeficientul c_k se numeşte *diferenţa divizată de ordinul k* (a funcţiei *f*, pe nodul x_k) şi se notează cu

$$c_0 = f[x_0]; \qquad c_k = f[x_0, x_1, \ldots, x_k],\ k \geq 1.$$

Cu aceasta, expresia (18) a polinomului de interpolare se scrie

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f[x_0, x_1, \ldots, x_k] q_k(x) \qquad (19)$$

sau explicit:

$$\begin{aligned} p_n(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \cdots \\ + (x - x_0) \ldots (x - x_{n-1}) f[x_0, \ldots, x_n] \end{aligned} \qquad (19')$$

Pentru a găsi expresia explicită a diferenţelor divizate, procedăm cum urmează: polinomul de interpolare fiind unic, egalăm coeficintul lui x^n din formele (19) şi (12). Rezultă:

$$c_n = f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \sum_{j=0}^{n} \frac{f_j}{\omega_n'(x_j)} \qquad (n \geq 1) \qquad (20)$$

Reamintim că $\omega_n'(x_j)$ este dat de (10), fiind produsul factorilor $(x_j - x_i)$, pentru $i \neq j, i = \overline{0, n}$.

O formulă a restului:

Să considerăm (*k*+2) noduri $x_0, \ldots, x_n, x_{n+1}$. Formula (18) devine:

$$p_{n+1}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} c_k q_k(x) = p_n(x) + c_{n+1} q_{n+1}(x)$$

Pentru $x = x_{n+1}$ avem $p_{n+1}(x_{n+1}) = f(x_{n+1})$ şi, utilizând şi $q_{n+1} = \omega_n$, rezultă:

$$f(x_{n+1}) = p_n(x_{n+1}) + c_{n+1} \omega_n(x_{n+1}),$$

în care $c_{n+1} = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}]$. Notăm acum *x* în loc de x_{n+1}, şi obţinem:

$$f(x) - p_n(x) = f[x_0, \dots, x_n, x]\omega_n(x) \tag{21}$$

care dă o altă formă a restului în formula de interpolare.

2.2 Proprietăți ale diferențelor divizate

O serie de proprietăți ale diferențelor divizate se dau în propozițiile care urmează.

***P1** – Simetrie*

Diferența divizată este o funcție simetrică de argumentele sale ■

Adică, considerând o permutare $(i_0, \dots, i_n)$ a numerelor (1, …, *n*), avem:

$$f[x_{i_0}, \dots, x_{i_n}] = f[x_0, \dots, x_n]$$

Acesta rezultă imediat din (20), ținând cont că $\omega'(x_j)$ este invariant la o permutate a lui (1, …, *n*).

***P2** – Formulă de recurență*

Avem formula

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} \tag{22}$$ ■

***Consecința 2.1** - Calculul practic al diferențelor divizate:*

Notând nodurile cu $x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}$, (22) devine:

$$f[x_j, \dots, x_{j+n}] = \frac{f[x_{j+1}, \dots, x_{j+n}] - f[x_j, \dots, x_{j+n-1}]}{x_{j+n} - x_j} \tag{22'}$$

şi $f[x_j] = f_j$. Utilizând notația simplificată $f_{j\,j+1\dots j+n} = f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}]$, (21') se scrie:

$$f_{j\,j+1\dots j+n} = \frac{f_{j+1\dots j+n} - f_{j\dots j+n-1}}{x_{j+n} - x_j} \tag{22''}$$

Astfel, obținem diferențele de ordinul 1, 2, 3, etc.:

1: $\quad f_{01} = \dfrac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$; $\qquad f_{12} = \dfrac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}$; $\qquad f_{23} = \dfrac{f_3 - f_2}{x_3 - x_2}$;

2: $f_{012} = \dfrac{f_{12} - f_{01}}{x_2 - x_0}$; $\quad f_{123} = \dfrac{f_{23} - f_{12}}{x_3 - x_1}$;

3: $f_{0123} = \dfrac{f_{123} - f_{012}}{x_3 - x_0}$;

Etc.

Diferențele divizate se pot așeza în următorul tabel – exemplu pentru 4 noduri:

$$\begin{array}{ll|lll} x_0 & f_0 & f_{01} & f_{012} & f_{0123} \\ x_1 & f_1 & f_{12} & f_{123} & \\ x_2 & f_2 & f_{23} & & \\ x_3 & f_3 & & & \end{array}$$

Primele două coloane sunt datele problemei. Coloana a doua reprezintă și diferențele de ordinul 0; diferențele de ordinul 1, 2, 3 sunt în coloanele 3, 4, 5. Tabloul are structura triunghiulară: datele nu permit calculul diferențelor $f_{j\ldots j+n}$ cu j+n = 4 (care implică nodul x_4). Polinomul de interpolare Newton, pentru exemplul din tabel, este:

$$p_4(x) = \\ f_0 + f_{01}(x - x_0) + f_{012}(x - x_0)(x - x_1) + f_{0123}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \qquad (23)$$

astfel că coeficienții lui se găsesc în prima linie din tabel (începând cu coloana 2).

Pentru calculul practic al coeficienților polinomului Newton, notăm coeficienții ca în tabloul de mai jos, unde indicele *j* corespunde nodului, iar indicele *k* ordinului diferenței:

$$\begin{array}{ll|lll} x_0 & c_{00} & c_{01} & c_{02} & c_{03} \\ x_1 & c_{10} & c_{11} & c_{12} & \\ x_2 & c_{20} & c_{21} & & \\ x_3 & c_{30} & & & \end{array} \qquad (24)$$

Corespondența este:

$$c_{jk} = f_{j\,j+1\ldots j+k} \qquad (24')$$

Cu aceasta, (23) se scrie:

$$p_4(x) = \\ c_{00} + c_{01}(x - x_0) + c_{02}(x - x_0)(x - x_1) + c_{03}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \qquad (23')$$

Coeficienţii c_{jk} se calculează prin recurenţă, cu formula care derivă din (21") şi (24'):

$$c_{jk} = \frac{c_{j+1,\,k-1} - c_{j,\,k-1}}{x_{j+k} - x_j}.$$

Un program Fortran care implementează calculul coeficienţilor şi a valorii polinomului pe punctul *z*, este dat în ANA/Interpolare/Newton.

■

Exemplu

Considerăm tabelul (23) pentru diferenţele funcţiei $f(x) = (x-1)^3$ pe nodurile

{-1, 0, 1, 2}:

$$\begin{array}{rr|rrr} -1 & -8 & 7 & -3 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & . \\ 1 & 0 & 1 & . & . \\ 2 & 1 & . & . & . \end{array}$$

Polinomul de interpolare (22') este

$$p_4(x) = -8 + 7(x+1) - 3(x+1)x + (x+1)x(x-1).$$

Se verifică imediat că, $p_4(x) = (x-1)^3$ ■

***Propoziţia 3** – Proprietatea de medie*

Fie $x_0, \ldots, x_k$, (*k*+1) puncte *distincte*, $[a,b]$ intervalul *minim* care conţine aceste puncte, şi funcţia *f* definită pe [*a*, *b*] şi având derivată de ordinul *k*, continuă în (a,b).

Atunci, există un punct $\xi = \xi(x_0, \ldots, x_k)$, $\xi \in (a,b)$, astfel că

$$f[x_0, \ldots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!} \qquad (25)$$

■

Demonstrație:

Egalând resturile din (21) şi din (5) – Propoziția 2, obținem:

$$f[x_0,\ldots,x_n,x]=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

în care $\xi\in(a,b)$ şi depinde de x şi de $x_0,\ldots,x_n$. P3 rezultă punând $n=k$-1 şi $x=x_k$

■

Consecința 3.1 – *Diferența divizată pe puncte confundate*

Dacă f este definită pe [a, b] şi are derivată de ordinul k continuă în (a, b), atunci

$\forall x,x_0,\ldots x_k\in(a,b)$

$$\lim_{x_0,\ldots,x_k\to x} f[x_0,\ldots,x_k]=\frac{f^{(k)}(x)}{k!} \tag{25'}$$

■

Cu $x_0,\ldots,x_k\to x$, rezultă că avem şi $\xi\to x$, unde ξ este definit în P3 ■

Din (25') rezultă că, în ipotezele din Consecință, putem scrie:

$$f[\underbrace{x,x,\ldots,x}_{k+1}]=\frac{f^{(k)}(x)}{k!} \tag{26}$$

Aceasta formulă constituie *definiția* diferenței divizate pentru cazul în care punctele toate punctele x_i sunt confundate – v. 3.3.

Propoziția 4 – *Formula Hermite – Gennochi*

Dacă f are derivate continue până la ordinul n inclusiv, pe intervalul (a, b) care conține nodurile distincte $x_0,\ldots,x_n$, atunci

$$f[x_0,\ldots,x_n]=\int\cdots\int_{S_n} f^{(n)}(t_0x_0+\ldots+t_nx_n)dt_1\ldots dt_n \tag{27}$$

în care S_n este *simplex*-ul:

$$S_n = \left\{ (t_0, t_1, \ldots, t_n) \in \mathbf{R}^{n+1} \mid t_i \geq 0, \sum_{i=0}^{n} t_i = 1 \right\} \tag{27'}$$

■

Demonstrația se face prin inducție asupra lui n – v. Atkinson (1978), Kincaid & Chenney (1996).

2.3 Extinderea diferențelor divizate la puncte non-distincte

Relația (27) constituie o altă reprezentare a diferențelor divizate, care poate fi luată ca *definiție* a acestora. Aceasta coincide cu definițiile date anterior, în cazul când punctele $x_0, \ldots, x_n$ sunt distincte. Extinderea constă în faptul că, odată cu definiția (27), argumentele pot să nu mai fie considerate distincte. Întrucât integrandul în (27) este o funcție continuă de argumentele $x_0, \ldots, x_n$, rezultă că și diferența divizată din membrul I va fi o funcție continuă de aceste argumente. Astfel, avem:

Consecința 4.1

Fie f continuă și având derivată $f^{(n)}$ continuă pe $[a, b]$. Fie $x_0, \ldots, x_k$, $k \leq n$, conținute în $[a, b]$ și considerăm diferența divizată $f[x_{0,} \ldots, x_k]$ definită de (27) pentru $n = k$. Atunci:

Diferența divizată $f[x_{0,} \ldots, x_k]$ este o funcție continuă de argumentele $x_0, \ldots, x_k$ (dintre care unele pot coincide), și care se reduce la definițiile anterioare în cazul argumentelor distincte ■

Propoziția 3 de mai sus, poate fi generalizată la cazul argumentelor non-distincte:

Consecința 4.2

Dacă f are derivată $f^{(n)}$ continuă pe $[a, b]$ și $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$, nefiind în mod necesar distincte, atunci

$$f[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

unde $\min(x_0,\dots,x_n) \le \xi \le \max(x_0,\dots,x_n)$ ■

Demonstrația se face pe baza teoremei de medie a integralei definite şi relației (25) – v. Isaacson & Keller (1965). În particular, se regăseşte (26) ■

Reprezentarea (22) – Propoziția 2, a diferențelor divizate, se extinde la cazul punctelor non-distincte, prin:

Consecința 4.3

Dacă f are derivată $f^{(n)}$ continuă pe $[a, b]$ şi $x_0,\dots,x_n \in [a,b]$ (nefiind în mod necesar distincte) şi $x \in [a,b]$, x fiind distinct de oricare x_i, atunci:

$$f[x, x_0,\dots,x_n] = \frac{f[x, x_1,\dots,x_n] - f[x_0, x_1,\dots,x_n]}{x - x_0}$$

■

Vezi alte proprietăți în Isaacson & Keller (1965).

3 Interpolare pe noduri echidistante. Formule cu diferențe finite.

3.1 Diferențe înainte şi polinomul Gregory-Newton

Considerăm şirul de noduri echidistante cu pasul $h > 0$:

$$x_j = x_0 + jh, \qquad j = 0, \pm 1, \pm 2,\dots \tag{28}$$

unde x_0 este un nod fixat arbitrar.

Definim *diferența înainte* (progresivă), a funcției f pe punctul x cu pasul h, prin:

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) \tag{29a}$$

Operatorul Δ definit de (29a) se zice operatorul diferență înainte (mai general, dacă se face referire explicită la pasul h, operatorul se notează Δ_h). Pentru r întreg, $r \ge 0$, definim diferențelele de ordin superior prin formula de recurență:

$$\Delta^{r+1} f(x) = \Delta^r(\Delta f(x)) = \Delta^r f(x+h) - \Delta^r f(x), \tag{29b}$$

unde $\Delta^0 f = f$ şi $\Delta^1 = \Delta$.

Exemplu:

$\Delta^2 f(x) = \Delta f(x+h) - \Delta f(x) = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)$ ■

Pentru nodurile echidistante (28), notăm

$$f_j = f(x_j) = f(x_0 + jh) \tag{30}$$

şi avem:

$$\Delta f_j = f_{j+1} - f_j, \quad \Delta^{r+1} f_j = \Delta^r(\Delta f_j). \tag{30'}$$

În particular, exemplul de mai sus devine: $\Delta^2 f_j = f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_j$. Observăm că diferența $\Delta^r f_j$ implică nodurile $x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+r}$. Se verifică imediat că Δ^r este un operator liniar, adică

$$\Delta^r(\alpha f_j + \beta g_j) = \alpha\Delta^r f_j + \beta\Delta^r g_j,$$

pentru oricare două funcții *f*, *g* şi orice scalari α, β. Se verifică de asemenea că avem:

$$\Delta^r(\Delta^s f_j) = \Delta^s(\Delta^r f_j) = \Delta^{r+s} f_j.$$

Proprietăți ale diferențelor

P1 – *Expresia diferenței de ordinul r*

$$\Delta^r f(x) = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} f[x + (r-k)h] \tag{31}$$

unde $\binom{r}{k} = \dfrac{r(r-1)\dots(r-k+1)}{k!}$ este coeficientul binomial ■

Demonstrația se face prin inducție asupra lui *r*. Sau, prin observația că diferența este o combinație liniară de valorile funcției *f* pe nodurile $x + ih$, $i = \overline{0, r}$, cu coeficienți care nu depind de *f*: se particularizează atunci *f*, luând $f(x) = e^x$. Exercițiu!

Observație

În formula (31), suma este ordonată descrescător în raport cu indicele (r-k). Punând $i = r\text{-}k$, (31) se mai scrie:

$$\Delta^r f(x) = \sum_{i=0}^{r} (-1)^{r-i} \binom{r}{i} f(x+ih) \tag{31'}$$

în care suma este ordonată crescător în raport indicele i al nodului.

Luând $x = x_j$, cu notația (30), formulele (31) și (31') devin:

$$\Delta^r f_j = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} f_{j+r-k} \tag{32}$$

$$\Delta^r f_j = \sum_{i=0}^{r} (-1)^{r-i} \binom{r}{i} f_{j+i} \tag{32'}$$

P2 – *Diferențele unui polinom*

a) Dacă p_m este un polinom de grad m, diferența $\Delta^r p_m$ este un polinom de grad m-r.

b) Avem: $\Delta^r x^r = r!\,h^r$ (33)

■

Demonstrație:

a) Fie $p_m = \sum_{k=0}^{m} a_k x^k$, conform liniarității operatorului diferență, rezultă

$\Delta^r p_m = \sum_{k=0}^{m} a_k \Delta^r x^k$. Avem, $\Delta x^k = (x+h)^k - x^k = \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k}{j} h^{k-j} x^j$, rezultă că Δx^k este un polinom de grad k-1. Continuând, rezultă că:

$\Delta^r x^k$ = polinom de gradul r-k, pentru $r \ge k$, (∗)

$\Delta^r x^k = 0$ – pentru $r > k$. (∗∗)

În particular, $\Delta^k x^k$ = constant (polinom de grad 0). Astfel rezultă:

$$\Delta^r p_m = \sum_{k=r}^{m} a_k \Delta^r x^k ,$$

care este un polinom de grad *m*-*r*.

b) Avem $\Delta x^r = \sum_{j=0}^{k-2} \binom{k}{j} h^{k-j} x^j + rhx^{r-1}$, în care primul termen este un polinom de grad

(*k*-2). Aplicând operatorul Δ^{r-1} şi ținând cont de (∗∗), rezultă

$$\Delta^r x^r = \Delta^{r-1}(\Delta x^r) = rh\Delta^{r-1}(x^{r-1})$$

care, aplicată succesiv, conduce la concluzia 'b'

■

P4 *– Relația între diferențele divizate şi diferențele înainte, pe noduri echidistante*

Pentru nodurile echidistante $x_j = x_0 + jh,\ j = \overline{0,k}$ şi $k \geq 0$, avem:

$$f[x_0,\ldots,x_k] = \frac{1}{k!\,h^k}\Delta^k f_0 \qquad (34)$$

■

(Demonstrația se face prin inducție.)

Polinomul Gregory-Newton

Cu expresia (34) a diferențelor divizate, polinomul de interpolare sub forma Newton (19), ia forma:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!\,h^k} q_k(x)\Delta^k f_0 \qquad (35)$$

unde polinoamele q_k sunt definite de (18) prin:

$$q_0(x) = 1; \quad q_k(x) = \prod_{j=0}^{k-1}(x - x_j), \quad k = \overline{1,n}.$$

Definim variabila *reală s* prin:

$$x = x_0 + sh,\ s = (x - x_0)/h \tag{36}$$

Ținând cont de $x_j = x_0 + jh$, avem: $x - x_j = (s - j)h$ şi polinomul $q_k(x)$ se scrie:

$$q_k(x) = q_k(x_0 + sh) = h^k \prod_{j=0}^{k-1} (s - j) = h^k s(s-1)\ldots(s-k+1), \quad k \geq 1$$

Cu aceasta, polinomul (35) ia forma

$$p_n(x) = \overline{p}_n(s) = \sum_{k=0}^{n} \frac{s(s-1)\ldots(s-k+1)}{k!} \Delta^k f_0$$

Notăm coeficientul diferenței, prin:

$$\binom{s}{k} = \frac{s(s-1)\ldots(s-k+1)}{k!},\ k \geq 1; \qquad \binom{s}{0} = 1 \tag{37}$$

Coeficientul $\binom{s}{k}$ generalizează expresia coeficientului binomial, la care se reduce pentru *s* = întreg pozitiv. Cu aceasta, polinomul de interpolare ia forma:

$$\overline{p}_n(s) = \sum_{k=0}^{n} \binom{s}{k} \Delta^k f_0 \tag{38}$$

în care,

$$s = (x - x_0)/h. \tag{38'}$$

Polinomul (38) se numeşte polinomul de interpolare Gregory-Newton. Explicit, avem:

$$\overline{p}_n(s) = f_0 + s\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_0 + \binom{s}{3}\Delta^3 f_0 + \ldots + \binom{s}{n}\Delta^n f_0 \tag{38''}$$

Exemplu

Reluăm exemplul din 3, în care valorile sunt date pentru funcția $f(x) = (x-1)^3$, pe nodurile: -1, 0, 1, 2. Avem $x_0 = -1$, $h = 1$, $n = 3$, şi calculăm diferențele înainte

Δf_i, $\Delta^2 f_i$, $\Delta^3 f_0$, în tabelul următor:

$$
\begin{array}{l|cccc}
f & \Delta & \Delta^2 & \Delta^3 \\
\hline
f_0 = -8 & & & \\
 & \Delta f_0 = 7 & & \\
f_1 = -1 & & \Delta^2 f_0 = -6 & \\
 & \Delta f_1 = 1 & & \Delta^3 f_0 = 6 \\
f_2 = 0 & & \Delta^2 f_1 = 0 & \\
 & \Delta f_2 = 1 & & \\
f_3 = 1 & & &
\end{array}
\qquad (39)
$$

Coeficienții polinomului Newton (38) (cu nodul de plecare x_0) sunt situați pe *diagonala descendentă* care pleacă din f_0. Rezultă:

$$\overline{p}_3(s) = -8 + s7 + \tfrac{1}{2}s(s-1)(-6) + \tfrac{1}{6}s(s-1)(s-2)6 = (s-2)^3$$

Cu $x_0 = -1$, $s = x+1$, se verifică: $\overline{p}_3(s) = (x-1)^3$ ■

3.2 Diferențe înapoi şi polinomul de interpolare Newton cu diferențe înapoi

Definim *diferența înapoi* (regresivă), a funcției *f* pe punctul *x* cu pasul *h*, prin:

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-h) \qquad (40)$$

şi diferențele de ordin superior, prin:

$$\nabla^{r+1} f(x) = \nabla^r(\Delta f(x)) = \nabla^r f(x+h) - \nabla^r f(x) \qquad (41)$$

Între diferențele înainte şi înapoi există relația:

$$\nabla f(x) = \Delta f(x-h)$$

şi prin recurență se arată că

$$\nabla^r f(x) = \Delta^r f(x - rh) \tag{42}$$

sau, cu notația (29):

$$\nabla^r f_j = \Delta^r f_{j-r} \,. \tag{42'}$$

Procedăm analog cu 4.1, utilizând nodurile $x_0, x_{-1}, \ldots, x_{-n}$, unde $x_{-j} = x_0 - jh$, $j = \overline{0, n}$. Punând $x = x_0 + sh$, avem $x - x_{-j} = (s + j)h$. Avem:

$$q_k(x) = \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_{-j}) = \prod_{j=0}^{k-1} (s + j)h$$

$$q_k(x_0 + sh) = h^k (s)(s+1)\ldots(s+k-1) = h^k (-1)^k (-s)(-s-1)\ldots(-s-k+1)$$

polinomul de interpolare ia forma:

$$p_n(x) = \overline{p}_n(s) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{-s}{k} \nabla^k f_0 \tag{43}$$

în care,

$$s = (x - x_0)/h \,. \tag{43'}$$

Polinomul (43) este forma polinomului Newton, cu diferențe înapoi. Explicit:

$$\overline{p}_n(s) = f_0 + s\nabla f_0 + \binom{-s}{2}\nabla^2 f_0 - \binom{-s}{3}\nabla^3 f_0 + \ldots + (-1)^n \binom{-s}{n}\nabla^n f_0 \tag{43''}$$

Exemplu

Reluăm exemplul anterior, din 4.2. Nodurile sunt 2, 1, 0, -1, şi valorile *f* sunt: 1, 0, -1, -8. Avem (diferențele se pot calcula într-un tabel analog cu (39)):

$$\nabla f_0 = 1; \quad \nabla f_1 = 1, \quad \nabla f_2 = 7$$
$$\nabla^2 f_0 = 0; \quad \nabla^2 f_1 = -6$$
$$\nabla^3 f_0 = 6$$

Cu acestea, polinomul (43) devine:

$$\overline{p}_3(s) = 1 + s1 + \tfrac{1}{2}(-s)(-s-1)0 - \tfrac{1}{6}(-s)(-s-1)(-s-2)6 = (1+s)^3$$

Cu $x_0 = 2$, $s = x - 2$, se verifică: $\overline{p}_3(s) = (x-1)^3$ ■

Observație

Se observă că diferențele înapoi pe punctul $x = 2$, se găsesc în tabelul (39), pe *diagonala ascendentă* care pleacă din f_3. Aceasta are loc pentru următoarele: considerând nodurile în secvența crescătoare $x_j = x_0 + jh,\ j = \overline{0, n}$, nodul de referință pentru diferențele înapoi este x_n, şi polinomul (42") se scrie:

$$\overline{p}_n(s) = f_n + s\nabla f_n + \binom{-s}{2}\nabla^2 f_n - \binom{-s}{3}\nabla^3 f_n + \ldots; \qquad s = (x - x_0)/h.$$

Conform (42') avem $\nabla^k f_n = \Delta^k f_{n-k}$. În cazul exemplului, avem $n = 3$ şi rezultă:

$\nabla f_3 = \Delta f_2$, $\nabla^2 f_3 = \Delta^2 f_1$, $\nabla^3 f_3 = \Delta^3 f_0$ ■

3.3 Operatori diferență şi calcul simbolic

Pentru noduri echidistante cu pasul h, se introduc următorii operatori (pentru funcția f, pe punctul x):

1) Identitate: $If(x) = f(x)$

2) Deplasare: $Ef(x) = f(x+h)$

3) Diferență înainte: $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$

4) Diferență înapoi: $\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$

5) Diferență centrală: $\delta f(x) = f(x + \frac{h}{2}) - f(x - \frac{h}{2})$

Se verifică imediat că operatorii 1 – 5 sunt liniari, adică, notând unul din operatori cu A, avem (pentru scalari arbitrari a, b, şi funcții arbitrare f, g):

$$A(\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha Af(x) + \beta Ag(x)$$

Suma a doi operatori, şi produsul a doi operatori, se definesc respectiv prin:

$$(A+B)f(x) = Af(x) + Bf(x); \quad (AB)f(x) = A(Bf(x))$$

În conformitate cu definiția produsului, puterile intregi k, ale unui operator A, se definesc recurent prin:

$A^0 = I; \quad A^k = AA^{k-1}, k \geq 1.$

Mai definim, pentru s = *real*:

$$E^s f(x) = f(x + sh)$$

şi avem (pentru s, t = reali): $E^s E^t f(x) = E^t E^s f(x)$.

Relații între operatori

Din definiții rezultă următoarele relații între operatori:

$$\Delta = E - I \qquad (44)$$

$$\nabla = I - E^{-1} \qquad (45)$$

$$\nabla = \Delta E^{-1} \qquad (46)$$

$$\delta = E^{1/2} - E^{-1/2} \qquad (47a)$$

$$\delta = \Delta E^{1/2} \qquad (47b)$$

Cu acestea, se pot deduce mai multe formule (unele demonstrate direct în paragrafele anterioare). Astfel, din (44) pentru r = întreg, avem:

$$\Delta^r = (E - I)^r = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} E^{r-k} I^k$$

Cu aceasta, ținând cont de $I^k f(x) = f(x)$ şi $E^{r-k} f(x) = f[x + (r-k)h]$, rezultă:

$$\Delta^r f(x) = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} f[x + (r-k)h] \qquad (48)$$

care reproduce formula (31). Analog, din (45) avem:

$$\nabla^r = (I - E^{-1})^r = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} I^{r-k} E^k$$

cu care, rezultă:

$$\nabla^r f(x) = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} f(x - kh) \qquad (49)$$

Din (46) avem:

$$\nabla^r = \Delta^r E^{-r}$$

care conduce la:

$$\nabla^r f(x) = \Delta^r f(x - rh),$$

care reproduce (42).

Formule care implică diferențele centrale:

Din (47a) avem

$$\delta^r = (E^{1/2} - E^{-1/2})^r = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} E^{m/2-k}$$

care, aplicată la $f(x)$ dă:

$$\delta^r f(x) = \sum_{k=0}^{r} (-1)^k \binom{r}{k} f[x + (\tfrac{m}{2} - k)h]$$

Dacă luăm r = par, $r = 2p$, rezultă

$$\delta^{2p} f(x) = \sum_{k=0}^{2p} (-1)^k \binom{2p}{k} f[x - ph + (2p - k)h],$$

Utilizând (48) pentru $r = 2p$ şi $x \mapsto x - ph$, rezultă că avem relația:

$$\delta^{2p} f(x) = \Delta^{2p} f(x - ph)$$

astfel că diferențele centrale *de ordin par* se pot exprima prin diferențe înainte.

3.4 Alte polinoame de interpolare

Vom da alte forme ale polinomului de interpolare – pentru unele detalii v. Stancu (1977).

Polinoamele de interpolare Gauss

Presupunem că vrem să aproximăm valoarea funcției într-un punct apropiat de x_0. Se consideră atunci, un număr *par* de noduri (echidistante cu h), fie acesta $(2n+2)$, n

situate la stânga şi n+1 la dreapta nodului x_0 : $x_{-n}, x_{-n+1}, \ldots x_{-1}; x_0; x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$.

Nodurile se iau în secvenţa următoare:

$$x_0; x_1, x_{-1}; \ldots, x_n, x_{-n}; x_{n+1} \qquad (*)$$

şi utilizăm polinomul Newton dat de (19'). Acesta se scrie:

$$p_{2n+1}(x) = f_0 + (x-x_0)f_{0,1} + (x-x_0)(x-x_1)f_{0,1,-1} + (x-x_0)(x-x_1)(x-x_{-1})f_{0,1,-1,2}$$
$$+ \ldots + (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)(x-x_{-n})f_{0,1,-1,\ldots,n,-n,n+1}$$

Punem ca înainte $x = x_0 + sh$ şi avem $x - x_i = (s-i)h$. Ţinem cont de de proprietatea de simetrie a diferenţelor divizate şi de expresia acestora pe noduri echidistante (34). Astfel, rezultă:

$$x - x_0 = sh, \ \ldots,$$

$$(x-x_0)(x-x_1)(x-x_{-1})\ldots(x-x_{n-1})(x-x_{-n+1})(x-x_n) = (s+n-1)\ldots(s-n)h^{2n},$$

$$(x-x_0)(x-x_1)(x-x_{-1})\ldots(x-x_n)(x-x_{-n}) = (s+n)\ldots s \ldots(s-n)h^{2n+1}.$$

$$f_{0,1} = \frac{1}{h}\Delta f_0, \ f_{0,1,-1} = f_{-1,0,1} = \frac{1}{2!\,h^2}\Delta^2 f_{-1}, \ \ldots,$$

$$f_{0,1,-1,\ldots,n,-n} = f_{-n,\ldots,0,\ldots,n} = \frac{1}{(2n)!\,h^{2n}}\Delta^{2n} f_{-n},$$

$$f_{0,1,-1,\ldots,n,-n,n+1} = f_{-n,\ldots,0,\ldots,n,n+1} = \frac{1}{(2n+1)!\,h^{2n+1}}\Delta^{2n+1} f_{-n}.$$

Înlocuind expresiile de mai sus în $p_{2n+1}(x)$, se obţine:

$$p_{2n+1}(x) = G^F_{2n+2}(s) =$$
$$f_0 + s\Delta f_0 + \sum_{k=1}^{n}\left[\binom{s+k-1}{2k}\Delta^{2k} f_{-k} + \binom{s+k}{2k+1}\Delta^{2k+1} f_{-k}\right] \qquad (50a)$$

unde indicele polinomului G este numărul de noduri (indicele polinomului p este gradul acestuia).

Dacă luăm un număr *impar* de noduri, eliminând în (∗) nodul x_{n+1}, se obţine

$$p_{2n}(x) = G_{2n+1}^F(s) =$$

$$f_0 + s\Delta f_0 + \sum_{k=1}^{n-1}\left[\binom{s+k-1}{2k}\Delta^{2k} f_{-k} + \binom{s+k}{2k+1}\Delta^{2k+1} f_{-k}\right] + \binom{s+n-1}{2n}\Delta^{2n} f_{-n} \qquad \text{(50b)}$$

Polinoamele (50a, b) sunt <u>polinoamele de interpolare Gauss – *înainte*</u>, cu număr impar, respectiv par, de noduri. Ele se scriu explicit:

$$G_m^F = f_0 + \binom{s}{1}\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_{-1} + \binom{s+1}{3}\Delta^3 f_{-1} + \binom{s+1}{4}\Delta^4 f_{-2} + \ldots$$

unde ultimul termen depinde de cazul $m = 2n+2$ sau $m = 2n+1$.

Dacă luăm nodurile $(x_{-n-1}), x_{-n}, x_{-n+1}, \ldots x_{-1}; x_0; x_1, \ldots, x_n$ în secvența:

$$x_0; x_{-1}, x_1; \ldots, x_{-n}, x_n; (x_{-n-1}) \qquad (**)$$

se obțin <u>polinoamele de interpolare Gauss – *înapoi*</u>, cu număr de noduri impar, respectiv par (inclusiv x_{-n-1}):

$$G_{2n+1}^B(s) = f_0 + \sum_{k=1}^{n}\left[\binom{s+k-1}{2k-1}\Delta^{2k-1} f_{-k} + \binom{s+k}{2k}\Delta^{2k} f_{-k}\right] \qquad \text{(51a)}$$

$$G_{2n+2}^B(s) = G_{2n+1}^B(s) + \binom{s+n}{2n+1}\Delta^{2n+1} f_{-n-1} \qquad \text{(51b)}$$

De exemplu, explicit, avem:

$$G_{2n+1}^B(s) = f_0 + \binom{s}{1}\Delta f_{-1} + \binom{s+1}{2}\Delta^2 f_{-1} + \binom{s+1}{3}\Delta^3 f_{-2} + \binom{s+2}{4}\Delta^4 f_{-2} + \ldots$$

Polinoamele Stirling

Se definesc prin media aritmetică a polinoamelor Gauss – înainte, respectiv – înapoi:

$$S_{2n+1}(s) = \tfrac{1}{2}[G_{2n+1}^F(s) + G_{2n+1}^B(s)] \qquad \text{(52a)}$$

$$S_{2n+2}(s) = \tfrac{1}{2}[G_{2n+2}^F(s) + G_{2n+2}^B(s)] \qquad \text{(52b)}$$

Polinoamele Bessel

Se definesc prin:

Media aritmetică a polinomului Gauss – înainte cu punct de plecare x_0, şi polinomului Gauss – înapoi cu punct de plecare x_1. Pentru acesta din urmă, secvența nodurilor se obține adăugând o unitate indicilor din (**):

$x_1; x_0, x_2; x_{-1}, x_3; \ldots; x_{-n+1}, x_{n+1}; (x_{-n})$. Astfel, avem:

a) Polinomul Bessel – număr *par* de noduri:

$$\begin{aligned} B_{2n+2}(s) &= \tfrac{1}{2}(f_0 + f_1) + \sum_{k=1}^{n+1} \frac{s - \frac{1}{2}}{2k-1} \binom{s+k-2}{2k-2} \Delta^{2k-1} f_{1-k} \\ &+ \tfrac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \binom{s+k-1}{2k} (\Delta^{2k} f_{-k} + \Delta^{2k} f_{1-k}) \end{aligned} \tag{53a}$$

Acesta coincide cu funcția pe nodurile: $x_{-n}, x_{-n+1}, \ldots x_{-1}; x_0; x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$.

b) Polinomul Bessel – număr *impar* de noduri:

Formula de mai sus, în care prima sumă se face de la $k = 1$ la $k = n$. Avem:

$$B_{2n+2}(s) = B_{2n+1}(s) + \frac{s - \frac{1}{2}}{2n+1} \binom{s+n-1}{2n} \Delta^{2n+1} f_{-n} \tag{53b}$$

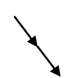
Pentru alte desvoltări – v. Stancu (1977).

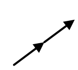
3.5 Diagrama romburilor pentru interpolare

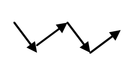
Considerăm tabloul diferenţelor înainte ale funcţiei *f*, pe noduri echidistante. În exemplul de mai jos sunt indicate numai diferenţele care se pot calcula plecând de la valorile date $f_{-2}, \ldots, f_3$: s-a notat, simplificat, $\Delta_j^r = \Delta^r f_j$.

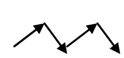
$$
\begin{array}{ccccccccc}
f_{-2} \\
 & \ddots \\
 & & \Delta_{-2} \\
 & \iddots & & \ddots \\
f_{-1} & & & & \Delta^2_{-2} \\
 & \ddots & & \iddots & & \ddots \\
 & & \Delta_{-1} & & & & \Delta^3_{-2} \\
 & \iddots & & \ddots & & \iddots & & \ddots \\
f_0 & & & & \Delta^2_{-1} & & & & \Delta^4_{-2} \\
 & \ddots & & \iddots & & \ddots & & \iddots \\
 & & \Delta_0 & & & & \Delta^3_{-1} \\
 & \iddots & & \ddots & & \iddots & & \ddots \\
f_1 & & & & \Delta^2_0 & & & & \Delta^4_{-1} \\
 & \ddots & & \iddots & & \ddots & & \iddots \\
 & & \Delta_1 & & & & \Delta^3_0 \\
 & \iddots & & \ddots & & \iddots \\
f_2 & & & & \Delta^2_1 \\
 & \ddots & & \iddots \\
 & & \Delta_2 \\
 & \iddots \\
f_3
\end{array}
$$

Diferențele implicate în formulele polinoamelor de interpolare se iau din diagramă, pe următoarele căi:

- Gregory-Newton – înainte: diagonala descendentă: 

- Gregory-Newton – înpoi: diagonala ascendentă: 

- Gauss – înainte: zigzag, primul pas descendent: 

- Gauss – înapoi: zigzag, primul pas ascendent: 

- Stirling: orizontala care începe de la f_0 - pentru diferențele de ordin par; media diferențelor de ordin impar situate deasupra şi dedesubtul acestei orizontale:

$$\begin{array}{ccccccc} & \Delta_{-1} & & \Delta^3_{-2} & & & \\ f_0 & & \Delta^2_{-1} & & \Delta^4_{-2} & \ldots & \\ & \Delta_0 & & \Delta^3_{-1} & & & \end{array}$$

- Bessel: orizontala care începe *între* f_0 şi f_1 - pentru diferențele de ordin impar; media diferențelor de ordin par situate deasupra şi dedesubtul acestei orizontale:

$$\begin{array}{cccccccc} f_0 & & \Delta^2_{-1} & & \Delta^4_{-2} & & \\ & \Delta_0 & & \Delta^3_{-1} & & \Delta^5_{-2} & \ldots \\ f_1 & & \Delta^2_0 & & \Delta^4_{-1} & & \end{array}$$

Diagrama poate fi completată şi cu coeficienții diferențelor – v. Ralston & Rabinowitz (1978), Curtis (1978).

4 Interpolare Hermite

Problema interpolării Hermite se pune în modul următor: considerăm n+1 noduri $x_0, x_1, \ldots, x_n$ şi presupunem că pe nodul x_i sunt date valorile funcției *f* şi a derivatelor lui *f* până la ordinul $k_i - 1$:

$$f(x_i) = c_{i0}, f'(x_i) = c_{i1}, \ldots, f^{(k_i-1)}(x_i) = c_{i,k_i-1}; \quad i = 0,1,\ldots,n \qquad (54)$$

Fie m+1 numărul condițiilor (54), adică

$$k_0 + k_1 + \ldots + k_n = m + 1 \qquad (54')$$

Căutăm polinomul *p*, *de grad minim* care satisface condițiile (54). Acesta va fi un polinom de grad cel mult *m*, având *m*+1 coeficienți care se determină din sistemul *liniar*

$$p^{(j)}(x_i) = c_{ij}, \quad j = \overline{0, k_i - 1}; \quad i = \overline{0, n} \qquad (55)$$

unde $p^{(0)}(x) = p(x)$.

Propoziția 1

Polinomul Hermite care satisface (55) există şi este unic ■

Construcția efectivă a polinomului Hermite se poate face în forma Newton sau Lagrange. Vom considera prima variantă. Pentru a doua, v. de exemplu Kincaid & Chenney (1996), Ralston & Rabinowitz (1978).

Pentru construcție considerăm polinomul Newton scris pentru nodurile $x_i, i = \overline{0, n}$, unde nodul x_i apare de k_i ori, adică:

$$\underbrace{x_0, \ldots, x_0}_{k_0}; \underbrace{x_1, \ldots, x_1}_{k_1}; \quad \cdots \quad ; \underbrace{x_n, \ldots, x_n}_{k_n} \tag{58}$$

Notăm, pentru claritate, lista (58) a nodurilor cu:

$$y_0, y_1 \ldots, y_{k_0 - 1}; y_{k_0}, \ldots, y_{(k_0 + k_1) - 1}; \cdots; y_{(k_0 + \ldots + k_{n-1})}, \ldots, y_{m+1} \tag{58'}$$

unde numărul total de noduri este $k_0 + k_1 + \ldots + k_n = m + 1$, şi corespondența cu nodurile x_i este:

$$y_j = x_0, \quad 0 \le j \le k_0 - 1;$$

$$y_j = x_1, \quad k_0 \le j \le (k_0 + k_1) - 1;$$

Etc.

Polinomul Newton pentru nodurile (58') este:

$$p(x) = \sum_{j=0}^{m+1} f[y_0, \ldots, y_j] q_j(x) \tag{59}$$

unde:

$$q_j(x) = \prod_{i=0}^{j-1} (x - y_i), \; q_0(x) = 1, \tag{60}$$

iar coeficienții sunt diferențele divizate *cu repetiție*, definite în 3.2.

Exemplu

Fie nodurile x_0, x_1, cu multiplicitățile 2, 3, adică se cere ca polinomul să reproducă valorile: $f(x_0), f'(x_0), f(x_1), f'(x_1), f''(x_1)$. Considerăm polinomul Newton pentru nodurile x_0, x_0, x_1, x_1, x_1. Avem:

$q_0(x) = 1$; $q_1(x) = (x - x_0)$; $\qquad q_2(x) = (x - x_0)^2$;

$q_3(x) = (x - x_0)^2 (x - x_1)$; $\qquad q_4(x) = (x - x_0)^2 (x - x_1)^2$.

$$\begin{aligned} p(x) = {} & f_0 + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 \\ & + f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2 (x - x_1) + f[x_0, x_0, x_1, x_1, x_1](x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \end{aligned}$$

în care:

$f[x_0, x_0] = f'(x_0)$;

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

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

în care:

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

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

Folosind o notație simplificată, polinomul se scrie:

$$\begin{aligned} p(x) = {} & f_0 + f_{00}(x - x_0) + f_{001}(x - x_0)^2 \\ & + f_{0011}(x - x_0)^2 (x - x_1) + f_{00111}(x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \end{aligned}$$

Calculul diferențelor se conduce, de exemplu, în tabelul următor: în coloana 1 se dau nodurile; în coloana 2 – valorile funcției şi derivatelor; în coloanele 3 – 6 , se calculează diferențele divizate; diferența pe *k* noduri coincidente se ia egală cu derivata de ordinul (*k*–1) pe nod, împărțită cu (*k*–1)!.

$$
\begin{array}{cc|cccc}
x_0 & f_0 & f_{00}=f_0' & f_{001} & f_{0011} & f_{00111} \\
x_0 & f_0' & f_{01} & f_{011} & f_{0111} & \\
x_1 & f_1 & f_{11}=f_1' & f_{111}=\frac{1}{2}f_1'' & & \\
x_1 & f_1' & & & & \\
x_1 & f_1'' & & & &
\end{array}
$$

Exemplu numeric: considerăm nodurile 1, 2 (cu multiplicități 2, 3) şi funcția $f(x)=(x-1)^4$. Tabelul de calcul este dat mai jos. În acesta: valorile subliniate sunt f_{00}, f_{11} şi f_{111}, calculate prin derivatele pe x = 1 şi x = 2; celelalte diferențe divizate sunt calculate în mod obişnuit.

$$
\begin{array}{cc|cccc}
1 & 0 & \underline{0} & 1 & 2 & 1 \\
1 & 0 & 1 & 3 & 3 & \\
2 & 1 & \underline{4} & \underline{6} & & \\
2 & 4 & & & & \\
2 & 12 & & & &
\end{array}
$$

Polinomul este:

$$p(x)=(x-1)^2+2(x-1)^2(x-2)+(x-1)^2(x-2)^2$$

care, evident, reproduce $f(x)$ ■

Propoziția 2

Polinomul de interpolare Newton (59, 60) scris pentru nodurile $x_i, i=\overline{0,n}$, unde nodul x_i apare de k_i ori, este polinomul Hermite care satisface (55) ■

Formula de interpolare Hermite

Punem, cu notațiile anterioare,

$$f(x)=p_m(x)+R_m(x) \tag{61}$$

unde $p_m(x)$ este polinomul de interpolare Hermite pe m+1 noduri multiple, iar $R_m(x)$ este restul în formula de interpolare (61). Presupunând că funcția f are m+1 derivate continue pe intervalul [a, b] care conține nodurile, se arată că restul este dat de formula generală (5) – 1.2, Propoziţia 2, considerând nodurile multiple. Adică, explicit,

$$R_m(x) = \tfrac{1}{(m+1)!}\prod_{i=1}^{n}(x-x_i)^{k_i} f^{(m+1)}(\xi)$$

unde $\xi \in [a,b]$.
■

II. DERIVARE NUMERICĂ

Două probleme se pot pune pentru calculul numeric al derivatelor unei funcţii:

1. Calculul derivatelor unei funcţii definite numeric – adică prin valori în puncte date.
2. Calculul numeric al derivatelor unei funcţii definite analitic.

A doua problemă se pune în cazul când funcţia are o expresie complicată şi este suficientă o aproximaţie a derivatei (în special pentru derivate de ordin superior).

Ambele probleme se pot rezolva utilizând polinoame de interpolare. Pentru a doua problemă se utilizează şi aşa-numita extrapolare Richardson.

1 Derivarea unei funcţii definite numeric

Fie funcţia *f* definită pe *n*+1 puncte distincte $x_0,\ldots,x_n$ şi p_n polinomul de interpolare pe aceste puncte. Atunci, o aproximaţie a derivatei de ordinul $k < n$ este dată de

$$f^{(k)}(x) \cong p_n^{(k)}(x)$$

Problema este de a evalua eroarea acestei aproximaţii, adică a evalua restul în formula

$$f^{(k)}(x) = p_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x) \tag{62}$$

În particular, pentru derivata *întâia* pe un nod, putem proceda cum urmează. Considerăm expresia (21) a restului în formula de interpolare a polinomului Newton:

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = f[x_0,\ldots,x_n,x]\omega_n(x)$$

Dacă presupunem că există derivata $f^{(n+1)}$, atunci, din expresia anterioară rezultă că membrul doi este derivabil şi derivând odată şi făcând $x = x_i$, avem:

$R_n'(x_i) = f[x_0, \ldots, x_n, x_i]\omega_n'(x_i)$

Cu Consecința 4.2 din 3.3, şi explicitând $\omega_n'(x_i)$, rezultă:

$$R_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \prod_{j=0,\, j\neq i}^{n} (x_i - x_j) \tag{63}$$

unde $\min\{x_j\} < \eta < \max\{x_j\}$. A deriva în continuare expresia restului nu conduce la formule practice.

Pentru derivatele de ordin superior, printr-o demonstrație analoagă cu cea a Propoziției 2 din 1.2, se obține următorul rezultat (Isaacson & Keller (1965)):

Teoremă

Fie funcția *f* definită pe [*a*, *b*] şi având derivată $f^{(n+1)}$ continuă pe [*a*, *b*]. Fie nodurile $x_j \in [a,b],\, i = \overline{0,n}$, ordonate prin $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$. Atunci pentru orice *k*, $k \le n$, avem:

$$R_n^{(k)}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n-k+1)!} \prod_{j=0}^{n-k} (x - \xi_j) \tag{64}$$

unde punctele ξ_j nu depind de *x* şi sunt situate în intervalele

$$x_j < \xi_j < x_{j+k}, \quad j = 0,\, 1,\, \ldots,\, n-k, \tag{64'}$$

iar $\eta = \eta(x)$ este situat într-un interval care conține *x* şi punctele ξ_j ■

Dacă $x, x_j \in [a,b]$ şi $|f^{(n+1)}(x)| \le M$, se obține marginea erorii sub forma

$$|R_n^{(k)}(x)| \le \tfrac{1}{(n-k+1)!} M\, |b-a|^{n-k+1} \tag{65}$$

Vom stabili marginea restului în următorul caz particular: $k = 2$, $x = x_i$, şi noduri echidistante cu h. Avem $x_j < \xi_j < x_{j+2}$, $j = \overline{0, n-2}$, de unde rezultă:

$0 \le j \le i - 2$: $\quad x_i - \xi_j \le x_i - x_j = (i - j)h$

$i - 1 \le j \le n - 2$: $\quad \xi_j - x_i \le x_{j+2} - x_i = (j + 2 - i)h$

Cu acestea:

$$| R_n^{(2)}(x_i) | \le \frac{| f^{(n+1)}(\eta) |}{(n-1)!} h^{n-1} \prod_{j=0}^{i-2} (i - j) \prod_{j=i-1}^{n-2} (j + 2 - i)$$

sau

$$| R_n^{(2)}(x_i) | \le \frac{i!(n-i)!}{(n-1)!} h^{n-1} \, | f^{(n+1)}(\eta) | \tag{66}$$

unde $x_0 < \eta < x_0 + nh$.

Formule de derivare pe puncte echidistante

Considerăm în ceea ce urmează nodurile echidistante $x = x_0 + jh$, $j = \overline{0, n}$, şi următoarele polinoame de interpolare:

a) Newton – înainte (38):

$$\overline{p}_n(s) = f_0 + s\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_0 + \binom{s}{3}\Delta^3 f_0 + \ldots + \binom{s}{n}\Delta^n f_0$$

Avem $f(x) \cong p(s)$, unde $x = x_0 + sh$. Derivăm în funcţie de s şi facem $s = 0$. Ţinând cont de

$$\left.\frac{d}{ds}\binom{s}{k}\right|_{s=0} = \frac{(-1)^{k-1}}{k},$$

se obţine:

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{h}[\Delta f_0 - \tfrac{1}{2}\Delta^2 f_0 + \tfrac{1}{3}\Delta^3 f_0 + \ldots + (-1)^{n-1}\tfrac{1}{n}\Delta^n f_0] + R_n'(x_0) \tag{67}$$

Restul este dat de (63), şi anume:

$$R_n'(x_0) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\prod_{j=1}^{n}(x_0 - x_j) = h^n(-1)^n \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{n+1} \tag{68}$$

unde $x_0 < \eta < x_n$.

b) Gauss – înainte, cu număr impar de noduri

(2*n*+1 noduri: $x_0, x_1, x_{-1}, \ldots, x_n, x_{-n}$) – v. (50b):

$$p_{2n}(x) = G_{2n+1}^F(s) =$$
$$f_0 + s\Delta f_0 + \sum_{k=1}^{n-1}\left[\binom{s+k-1}{2k}\Delta^{2k} f_{-k} + \binom{s+k}{2k+1}\Delta^{2k+1} f_{-k}\right] + \binom{s+n-1}{2n}\Delta^{2n} f_{-n}$$

Procedăm analog, derivând în funcție de *s* şi făcând *s* = 0. Avem:

$$\frac{d}{ds}\binom{s+k-1}{2k}\bigg|_{s=0} = (-1)^k \frac{k!(k-1)!}{(2k)!};$$

$$\frac{d}{ds}\binom{s+k}{2k+1}\bigg|_{s=0} = (-1)^k \frac{k!^2}{(2k+1)!}.$$

Se obține:

$$\begin{aligned} f'(x_0) \cong \frac{1}{h}\{\Delta f_0 + \sum_{k=1}^{n-1}(-1)^k [\frac{k!(k-1)!}{(2k)!}\Delta^{2k} f_{-k} + \frac{(k)!^2}{(2k+1)!}\Delta^{2k+1} f_{-k}] \\ + (-1)^n \frac{n!(n-1)!}{(2n)!}\Delta^{2n} f_{-n}\} \end{aligned} \tag{69}$$

sau, explicit:

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{h}[\Delta f_0 - \tfrac{1}{2}\Delta^2 f_{-1} - \tfrac{1}{6}\Delta^3 f_{-1} + \tfrac{1}{12}\Delta^4 f_{-2} + \ldots] \tag{69'}$$

Restul este dat de (63), şi anume:

$$R_{2n}'(x_0) = (-1)^n \frac{(n)!^2}{(2n+1)!} h^{2n} f^{(2n+1)}(\eta), \quad x_0 - nh < \eta < x_0 + nh \tag{70}$$

Observație

Dacă am utiliza aproximarea (67) pe $2n$+1 noduri situate de aceeaşi parte a lui x_0, de exemplu $x_0 + jh$, $j = \overline{0,2n}$, restul sub forma (68) este:

$$R_{2n}^{\prime(1)}(x_0) = h^{2n}\,\frac{f^{(n+1)}(\eta)}{2n+1}, \qquad x_0 < \eta < x_0 + 2nh \tag{71}$$

Presupunând că valoarea lui $f^{(n+1)}(\eta)$ este *aceeaşi* pentru intervalele din (70) şi (71), rezultă că avem $|R'_{2n}(x_0)| << |R_{2n}^{\prime(1)}(x_0)|$ care arată că aproximarea (69), cu noduri *centrate în jurul lui* x_0, este mai bună decât (67).

■

Cazuri particulare

1) Derivata de ordinul întâi:

Pentru n = 1 (3 noduri: x_0, x_1, x_{-1}) se obține formula:

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{h}\{\Delta f_0 - \tfrac{1}{2}\Delta^2 f_{-1}\}, \text{ sau}$$

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{2h}[f_1 - f_{-1}], \tag{72a}$$

în care restul este:

$$R'_2(x_0) = -\tfrac{1}{6}h^2 f^{(3)}(\eta), \quad x_0 - h < \eta < x_0 + h.$$

Pentru n = 2, se obține formula: $f'(x_0) \cong \frac{1}{h}[\Delta f_0 - \tfrac{1}{2}\Delta^2 f_{-1} - \tfrac{1}{6}\Delta^3 f_{-1} + \tfrac{1}{12}\Delta^4 f_{-2}]$, sau explicit:

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{12h}[-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}], \tag{72b}$$

în care restul este $O(h^4)$.

2) Derivata de ordinul ($2n$ – 1):

Derivăm polinomul p_{2n} de $2n-1$ ori: întrucât $\binom{s+k}{m}$ este un polinom de gradul m, derivatele de ordin > m sunt nule, astfel că derivata de ordinul $(2n-1)$ implică numai ultimii doi termeni din polinom. Pentru aceştia avem

$$\frac{d^{2n-1}}{ds^{2n-1}}\binom{s+n-1}{2n-1}=1, \qquad \left.\frac{d^{2n-1}}{ds^{2n-1}}\binom{s+n-1}{2n}\right|_{s=0}=-\frac{1}{2},$$

astfel că rezultă:

$$f^{(2n-1)}(x_0)\cong\frac{1}{h^{2n-1}}[\Delta^{2n-1}f_{-n+1}-\tfrac{1}{2}\Delta^{2n}f_{-n}]$$

în care, conform (65), eroarea este $O(h^2)$. Formula de mai sus se poate scrie şi sub forma:

$$f^{(2n-1)}(x_0)\cong\frac{1}{2h^{2n-1}}[\Delta^{2n-1}f_{-n+1}+\Delta^{2n-1}f_{-n}]$$

■

c) Gauss – înainte, cu număr par de noduri

(2n+2 noduri: $x_0, x_1, x_{-1}, \ldots, x_n, x_{-n}, x_{n+1}$) – v. (50a):

$$p_{2n+1}(x)=G^F_{2n+2}(s)=f_0+s\Delta f_0+\sum_{k=1}^{n}\left[\binom{s+k-1}{2k}\Delta^{2k}f_{-k}+\binom{s+k}{2k+1}\Delta^{2k+1}f_{-k}\right]$$

Acesta conduce la derivata de ordinul doi (mai general, la derivatele de ordin par). Vom considera, pentru exemplificare cazul n = 1 (noduri: x_0, x_1, x_{-1}, x_2). Polinomul este:

$$p_3(x)=G_4(s)=f_0+s\Delta f_0+\frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_{-1}+\frac{(s+1)s(s-1)}{6}\Delta^3 f_{-1}$$

Derivând de două ori, se obține $G_4''(s)=\Delta^2 f_{-1}+s\Delta^3 f_{-1}$, şi făcând s = 0 rezultă:

$$f''(x_0)\cong\frac{1}{h^2}\Delta^2 f_{-1}$$

În general, avem:

$$\frac{d^2}{ds^2}\binom{s+k}{2k+1}\Bigg|_{s=0} = 0$$

$$\frac{d^2}{ds^2}\binom{s+k-1}{2k}\Bigg|_{s=0} = (-1)^{k+1}\,\frac{(k-1)!^2\cdot 2}{(2k)!}$$

cu care, rezultă:

$$f''(x_0) \cong \frac{1}{h^2}\sum_{k=1}^{n}(-1)^{k+1}\,\frac{(k-1)!^2\cdot 2}{(2k)!}\,\Delta^{2k} f_{-k} \tag{73}$$

Explicit, primii termeni ai sumei sunt:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\{\Delta^2 f_{-1} - \tfrac{1}{12}\Delta^4 f_{-2} + \tfrac{1}{180}\Delta^6 f_{-3} + \cdots\} \tag{73'}$$

Marginea erorii (66), în care: $n \mapsto 2n+1$; nodurile ordonate crescător sunt $x_{-n}, \ldots, x_{-1}, x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$; $x_i = x_0$, astfel că $i = n$, devine:

$$|\, R_{2n+1}^{(2)}(x_0)\,| \le \frac{n!\,(n+1)!}{(2n)!}\,h^{2n}\;|\, f^{(2n+2)}(\eta)\,| \tag{74}$$

Cazuri particulare

1) Derivata de ordinul 2:

Considerăm cazurile n = 1, 2. Avem:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\,\Delta^2 f_{-1}; \qquad |\, R_3^{(2)}\,| \le h^2\;|\, f^{(4)}(\eta)\,|$$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\{\Delta^2 f_{-1} - \tfrac{1}{12}\Delta^4 f_{-2}\}; \quad |\, R_5^{(2)}\,| \le \tfrac{1}{2}h^4\;|\, f^{(4)}(\eta)\,|$$

Explicit, aceste formule sunt:

$$f''(x_0) \cong \frac{1}{h^2}[f_1 - 2f_0 + f_{-1}] \tag{75a}$$

$$f''(x_0) \cong \frac{1}{12h^2}[-f_2 + 16 f_1 - 30 f_0 + 16 f_{-1} - f_{-2}] \tag{75b}$$

Pentru prima formulă, o margine mai bună a erorii se obține adunând seriile Taylor a lui $f(x_0+h)$ şi $f(x_0-h)$ (v. Cap. 5-III, 1.1.1), sub forma:

$$|R_3^{(2)}(x_0)| \le \tfrac{1}{12}h^2\,|f^{(4)}(\eta)|, \qquad x_0-h<\eta<x_0+h\,.$$

2) Derivata de ordinul $2n$:

Derivăm polinomul p_{2n+1} de $2n$ ori: derivata implică numai ultimii doi termeni ai sumei ($k=n$). Pentru aceştia, avem:

$$\frac{d^{2n}}{ds^{2n}}\binom{s+n-1}{2n}=1\,, \qquad \frac{d^{2n}}{ds^{2n}}\binom{s+n}{2n+1}\Bigg|_{s=0}=0\,,$$

astfel că rezultă:

$$f^{(2n)}(x_0)\cong\frac{1}{h^{2n}}\Delta^{2n}f_{-n}\,,$$

în care eroarea, conform (65), este $O(h^2)$.

■

2 Extrapolarea Richardson

În cazul unei funcții definite analitic, calculul numeric al derivatelor se poate face prin formulele din 7.1, calculând în prealabil, valorile funcției pe un şir de noduri. Întrucât valorile funcției pot fi calculate în orice punct al intervalului de definiție, următorul procedeu permite ca, plecând de la două aproximații ale derivatei având acelaşi ordin al erorii, să se găsească o aproximație cu precizie mai mare. Procedeul se zice extrapolarea Richardson. Cele două valori ale derivatei se calculează cu cu pasul h, şi respectiv, cu pasul $h/2$, cu o formulă de aproximare a cărei eroare are forma $b_1h^2+b_2h^4+b_3h^6+\dots$. Astfel, să calculăm f' cu formula (72a). Pentru evaluarea erorii folosim seriile Taylor

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+C_2h^2+C_3h^3+C_4h^4+C_5h^5+\dots,$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+C_2h^2-C_3h^3+C_4h^4-C_5h^5+\dots,$$

în care: $C_k=f^{(k)}(x_0)/k!$. Scăzând cele două serii, rezultă:

$$f'(x_0,h) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] + C_3h^2 + C_5h^4 + \dots$$

0) Extrapolarea ‘0’ – Aproximații de ordinul $O(h^2)$:

Aplicând formula pentru *h*, *h*/2, $h/2^2 = h/4$, avem aproximațiile:

$$f_0'^{(0,1)} = f'_{0,h} \cong \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)]$$

$$f_0'^{(0,2)} = f'_{0,h/2} \cong \frac{1}{2(h/2)}[f(x_0+h/2) - f(x_0-h/2)],$$

$$f_0'^{(0,3)} = f'_{0,h/4} \cong \frac{1}{2(h/4)}[f(x_0+h/4) - f(x_0-h/4)]$$

Notația indicilor superiori (i, j) din membrul întâi au semnificația: i = indicele extrapolării (aici, $i = 0$); j = indicele aproximației. Erorile aproximațiilor de mai sus sunt de ordinul $O(h^2)$ şi sunt definite de:

$$f_0' = f_0'^{(0,1)} + C_3h^2 + C_5h^4 + \dots \qquad \text{(a)}$$

$$f_0' = f_0'^{(0,2)} + C_3\frac{h^2}{2^2} + C_5\frac{h^4}{2^4} + \dots \qquad \text{(b)}$$

$$f_0' = f_0'^{(0,3)} + C_3\frac{h^2}{2^4} + C_5\frac{h^4}{2^8} + \dots \qquad \text{(c)}$$

1) Extrapolarea 1 – Aproximații de ordinul $O(h^4)$:

Dacă eliminăm termenul în h^2 între (a), (b), şi respectiv între (b), (c), rezultă:

$$f_0' = f_0'^{(0,2)} + \frac{1}{2^2-1}(f_0'^{(0,2)} - f_0'^{(0,1)}) + O(h^4),$$

$$f_0' = f_0'^{(0,3)} + \frac{1}{2^2-1}(f_0'^{(0,3)} - f_0'^{(0,2)}) + O(h^4)$$

Aproximațiile

$$f_0'^{(1,1)} = f_0'^{(0,2)} + \frac{1}{2^2-1}(f_0'^{(0,2)} - f_0'^{(0,1)}),$$

$$f_0'^{(1,2)} = f_0'^{(0,3)} + \frac{1}{2^2 - 1}(f_0'^{(0,3)} - f_0'^{(0,2)}),$$

are erorile date de:

$$f_0' = f_0'^{(1,1)} - (C_5 / 2^2)h^4 + O(h^6) \tag{d}$$

$$f_0' = f_0'^{(1,2)} - (C_5 / 2^2)\frac{h^4}{2^4} + O(h^6) \tag{e}$$

2) Extrapolarea 2 – Aproximații de ordinul $O(h^6)$:

Analog, eliminând termenul în h^4 între (d) şi (e), rezultă aproximația:

$$f_0'^{(2,1)} = f_0'^{(1,2)} + \frac{1}{2^4 - 1}(f_0'^{(1,2)} - f_0'^{(1,1)})$$

care va avea o eroare de ordinul $O(h^6)$. Pentru a continua procesul, avem nevoie de o a două aproximație de ordinul $O(h^6)$, $f_0'^{(2,2)}$. Pentru aceasta, se porneşte cu încă o aproximație la pasul 0, şi anume, $f_0'^{(0,4)} = f'_{0,h/8}$, etc.

3) În general, având două aproximații $f_0'^{(i,1)}$ şi $f_0'^{(i,2)}$ calculate respectiv cu h' şi $h'/2$, ambele cu erori de ordinul $O(h^n)$, formula de extrapolare este:

$$f_0'^{(i+1,1)} = f_0'^{(i,2)} + \frac{1}{2^n - 1}(f_0'^{(i,2)} - f_0'^{(i,1)}) \tag{76}$$

cu o eroare de ordinul $O(h^{n+2})$. Observați că $f_0'^{(i,2)}$ notează aproximația mai exactă de la pasul anterior ■

Extrapolarea Richardson se poate aplica, în mod analog, pentru derivatele de ordinul doi, calculate cu (75a). Evaluarea erorii se face adunând seriile Taylor de mai sus. De exemplu, pentru prima aproximație, avem:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)] + 2C_4h^2 + 2C_6h^4 + \ldots$$

Observații

1) Procesul de extrapolare se opreşte după un număr de paşi, limitând mărimea pasului $h/2^n$, şi prin testul $|f_0'^{(i,2)} - f_0'^{(i,1)}| \le eps$ unde *eps* este prescris.

2) Procesul de extrapolare prezentat utilizează şirul de paşi $\{h_i\}$, $h_i \to 0$, definit de $h_1 = h,\ h_{i+1} = (\frac{1}{2})h_i$. Pentru cazul general $h_{i+1} = \rho h_i$, $\rho < 1$, v. Ralston & Rabinowitz (1978)

3) În loc de extrapolare, pentru creşterea ordinului erorii de la $O(h^{2n})$ la $O(h^{2n+2})$, se poate utiliza polinomul de interpolare de ordinul 2*n* + 2 (adică, adăugând încă două noduri la cele 2*n*+1 considerate în 7.1, b)), şi calculând derivata cu formula (69). V. expresia (70) a restului.

■

Cod Fortran

Următorul cod implementează extrapolarea Richardson. Datele x_0, n, h se citesc dintr-un fişier de date: *n* este numărul aproximaţiilor de la pasul '0'; *h* este pasul iniţial. Aproximaţiile $f_0'^{(i,j)}, i = \overline{0, n-1}$ sunt stocate în tabloul `ff(0:n-1,n)`. Proiectul include sub-programul de tip `function`, care calculează $f(x)$. Ca exemplu, este considerată funcţia $f(x) = e^x$.

```
! Extrapolare RICHARDSON pentru f'
! Sub-program: fun(x)
! Datele: x0, n, h - citite din fisier de date.
Program Extrapolation
character(255) fname, dummy*80
real, allocatable:: ff(:,:)

aprox(f1, f2, h)= (f2 -f1)/(2*h)
extrapol(f1, f2, n) =f2 +(f2-f1)/(2**n -1)

print '(a,\)', ' Input file:'
read '(a)', fname
open(1, file =fname, status ='old', form ='formatted')
```

```
read(1,'(a)') dummy
read(1,*) x, n, h0          ! h = h_inital

allocate (ff(0:n-1, n))
ff =0.D0;

! Aproximatii - 0:
h =2*h0
do i = 1, n
h =h/2
f1 =fun(x-h); f2 =fun(x+h);
ff(0, i) = aprox(f1, f2, h)
enddo
! Extrapolari= 1:N-1
MainDo: DO IE =1, N-1
ne =2*IE
do i =1, n-IE
ff(IE,i)= extrapol(ff(IE-1,i), ff(IE-1,i+1), ne)
enddo
ENDDO MainDo

! Write:
write (1, '(a, /)') 'ff:';
DO ie = 0, n-1
     write (1, *) ie, ff(ie, 1:n-ie)
     write (1, *)
ENDDO

deallocate(ff)
END program extrapolation

function fun(x)
fun =exp(x)
end
```

■

Exemplu

Pentru $f(x) = e^x$, să calculăm prin extrapolare $f'(1.4)$. Considerăm pasul inițial $h = 0.05$ şi $n = 4$ (3 paşi de extrapolare). Rezultatele, obținute cu programul prezentat mai sus, se dau în continuare: în prima coloană sunt indicii paşilor, iar în coloanele următoare aproximațiile. Calculul este făcut în simplă precizie. Valoarea exactă este 4.055 199 966 84.

```
0   4.056885        4.055200        4.055324        4.055233

1   4.055197        4.055225        4.055202

2   4.055227        4.055201

3   4.055200
```

Aceeaşi valoare se obține cu h = 0.1 şi 4 paşi de extrapolare; cu h = 0.5, 4 paşi şi h = 1.0, 3 paşi, rezultă valoarea 4.055201. Cu h < 0.1 se obțin valori mai puțin precise: de exemplu, cu h = 0.001, 4 paşi, rezultă 4.052745. Rezultă că valoarea optimă pentru *h*, pentru exemplul considerat, se situează în plaja 1.0 … 0.05. Acest rezultat poate fi generalizat: pentru *h* inițial, nu se vor lua valori excesiv de mici. O valoare în jurul lui 0.1 pare să convină pentru mai multe exemple ■
