

L1. Interpolarea

1.1. Polinomul de interpolare Lagrange

1.1.1. Aspecte teoretice

Una dintre cele mai vechi și generale formule de interpolare este cea datorată lui Lagrange. Mai mult decât în utilitatea practică directă, importanța ei constă în consecințele teoretice. O întreagă clasă de formule de integrare numerică are la bază aproximarea funcțiilor prin polinomul de interpolare al lui Lagrange. Pe de altă parte, plecând de la acest interpolant pot fi construite scheme de derivare numerică cu diferite ordine de precizie.

Sa presupunem că, pentru funcția $f(x)$ care trebuie aproximată, sunt cunoscute n valori corespunzătoare argumentelor x_1, x_2, \dots, x_n din intervalul $[\alpha, \beta]$:

$$f(x_i) = y_i \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Ne propunem construirea unui polinom $P_n(x)$ care să ia în punctele de tabelare x_i aceleași valori ca și funcția $f(x)$,

$$P_n(x_i) = y_i \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.1.1)$$

În acest scop să construim mai întâi o familie de polinoame $p_i(x)$, pentru care are loc

$$p_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & j = i \\ 0, & j \neq i \end{cases} \quad (1.1.2)$$

unde δ_{ij} este simbolul lui Kronecker. Deoarece $p_i(x)$ trebuie să se anuleze în toate cele n puncte de tabelare cu excepția punctului x_i , el poate fi scris sub forma unui produs de factori de forma $(x - x_j)$, din care, în particular, lipsește factorul $(x - x_i)$:

$$p_i(x) = C_i \prod_{j \neq i} (x - x_j).$$

Astfel definit, $p_i(x)$ este un polinom de ordinul $(n-1)$. Luând $x = x_i$ și având în vedere că $p_i(x_i) = 1$, se găsește coeficientul constant $C_i = \frac{1}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}$. Cu acestea, pentru polinomul $p_i(x)$

rezultă expresia

$$p_i(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}. \quad (1.1.3)$$

Revenind acum la problema inițială, polinomul $P_n(x)$ care satisface condițiile de interpolare (1.1.1) poate fi scris ca o combinație liniară a polinoamelor $p_i(x)$, pornind de la faptul

că fiecare dintre acestea din urmă se anulează în toate punctele de tabelare cu excepția câte unui singur - x_j . În plus, deoarece polinoamele $p_i(x)$ sunt de ordinul $(n - 1)$, $P_{n-1}(x)$ este el însuși de ordinul $(n - 1)$ și avem

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n p_i(x) y_i. \quad (1.1.4)$$

Utilizând proprietățile (1.1.2), se poate arăta ușor că sunt satisfăcute condițiile de interpolare (1.1.1):

$$P_{n-1}(x_j) = \sum_{i=1}^n p_i(x_j) y_i = \sum_{i=1}^n \delta_{ij} y_i = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Înlocuind expresia (1.1.3) a polinoamelor $p_i(x)$ în (1.1.4) rezultă polinomul de interpolare Lagrange:

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)} y_i. \quad (1.1.5)$$

În general, numărul de puncte utilizate într-o schemă de interpolare minus unu este numit ordinul interpolării și în cazul de față acesta este egal cu ordinul polinomului de interpolare.

Pentru a demonstra unicitatea polinomului de interpolare Lagrange vom presupune contrariul, adică faptul că există un polinom $\bar{P}_{n-1}(x)$ diferit de $P_{n-1}(x)$, care satisface de asemenea condițiile de interpolare

$$\bar{P}_{n-1}(x_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

În consecință, polinomul

$$Q_{n-1}(x) = \bar{P}_{n-1}(x) - P_{n-1}(x)$$

se anulează în toate cele n puncte de interpolare x_i . Fiind însă de ordinul $(n - 1)$, nu are decât $(n - 1)$ zerouri, și deci rezultă a fi identic nul. Prin urmare, $\bar{P}_{n-1}(x) \equiv P_{n-1}(x)$

În cazul particular $n = 2$ formula lui Lagrange se reduce la

$$P_1(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} y_1 + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} y_2 \quad (1.1.6)$$

și descrie dreapta care trece prin cele două puncte de tabelare. Pentru $n = 3$ interpolantul Lagrange corespunde parabolei definite de cele trei puncte de tabelare:

$$P_2(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} y_1 + \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} y_2 + \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} y_3. \quad (1.1.7)$$

Următoarea funcție implementează formula (1.1.5) a polinomului de interpolare

Lagrange.

```
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>

double Lagrange(double xi[], double yi[], int ni, double x)
/*-----
Evalueaza polinomul de interpolare Lagrange
xi[] - abscisele punctelor interpolate
yi[] - ordonatele punctelor interpolate
ni - numarul punctelor interpolate
x - argumentul polinomului
-----*/
{
    double p, y,
    int i, j;
    y = 0.0;
    for (i = 0; i < ni; i++)
    {
        p = 1.0;
        for (j = 0; j < ni; j++)
            if (j != i)
                p *= (x - xi[j]) / (xi[i] - xi[j]);
        y += p * yi[i];
    }
    return y;
}

void main()
{
    double x[8] = {0.15, 0.2, 0.3, 0.5, 0.8, 1.1, 1.4, 1.7};
    double y[8];
    for (int i = 0; i < 8; i++)
        y[i] = 1 / x[i];
    printf("V aloarea interpolantului in punctul 1.3 este %lf\n", Lagrange(x, y, 8, 1.3));
}
```

Aproximarea funcțiilor tabelate

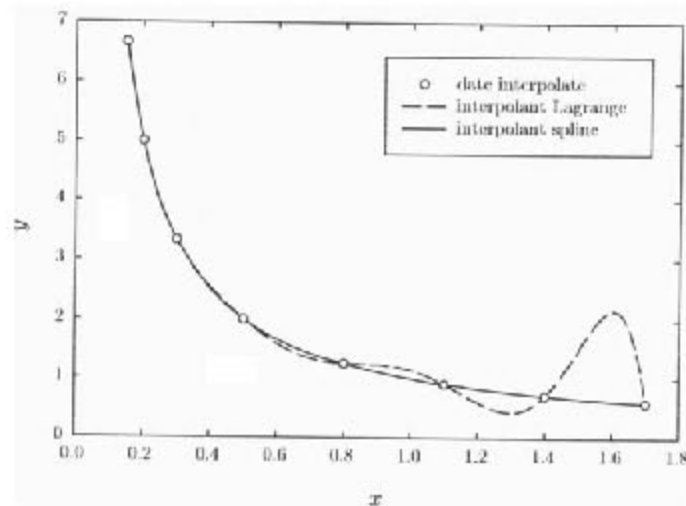


FIGURA 1.1.1

Exemplu în care interpolarea cu ajutorul polinomului lui Lagrange conduce la oscilații.

Datele interpolate provin din eșantionarea funcției $f(x)=1/x$

Relatia (1.1.5) evidențiază faptul că aproximarea realizată cu ajutorul polinomului de interpolare Lagrange este esențialmente *nelocală*, în sensul că la evaluarea interpolantului contribuie informații din *toate* punctele tabelate, nu numai din cele din vecinătatea argumentului considerat. Nelocalitatea garantează pe de o parte "netezimea" aproximării prin continuitatea derivatelor, însă, pe de alte parte, poate induce oscilații complet străine de comportarea reală a funcției approximate.

Una dintre cauzele apariției oscilațiilor polinomului Lagrange o constituie dispunerea neadecvată a punctelor de tabelare. Pentru ilustrarea acestui fenomen a fost considerată funcția $f(x) = 1/x$, pentru care, așa cum se vede din figura 1.1.1, au fost generate puncte de interpolare corespunzătoare argumentelor 0.15, 0.2, 0.3, 0.5, 0.8, 1.1, 1.4 și 1.7. Distanța relativ mare dintre abscisele ultimelor puncte face ca interpolantul Lagrange să nu poată reproduce funcția modelată în acest domeniu și să prezinte oscilații din ce în ce mai ample. Distribuind însă în mod echidistant abscisele, oscilațiile se reduc până aproape de dispariție. Mai mult, adăugând încă un singur punct de tabelare, tot în condițiile dispunerii echidistante a absciselor, oscilațiile pot fi eliminate complet în acest caz. Trebuie avut în vedere totuși că, neînsoțite de o dispunere judicioasă a absciselor, creșterea numărului punctelor de tabelare nu îmbunătățește întotdeauna precizia interpolării, deoarece, în general, prin creșterea corespunzătoare a ordinului polinomului de interpolare apar zerouri suplimentare și deci oscilații suplimentare ale interpolantului.

Prin contrast cu comportamentul interpolantului Lagrange în exemplul considerat mai sus, din figura 1.1.1 se poate constata că aproximarea realizată cu ajutorul funcțiilor spline cubice, nu prezintă oscilații. Calitativ, acest comportament diferit poate fi explicat prin faptul că restricțiile interpolantului spline între punctele de tabelare sunt polinoame de ordin scăzut, cu număr mic de zerouri și deci tendință redusă de oscilație.

Pe baza formulei de interpolare Lagrange se poate rezolva și *problema interpolării inverse*, adică găsirea argumentului pentru care polinomul Lagrange are o anumită valoare. Pentru aceasta este suficient să se considere y ca variabilă independentă și să se scrie, prin analogie cu relația (1.1.5), o formulă exprimând x ca funcție de y :

$$x = \sum_{i=1}^n \frac{\prod_{j \neq i} (y - y_j)}{\prod_{j \neq i} (y_i - y_j)} y_i. \quad (1.1.8)$$

Cu ajutorul acestei formule se poate găsi o rădăcină aproximativă a ecuației $f(x) = 0$. În acest scop se calculează un tablou de valori y_i pentru n argumente x_i apropiate de rădăcină. Punând apoi $y = 0$ în relația (1.1.8), se găsește rădăcina respectivă. Dacă $f(x) = P_{n-1}(x)$ este un polinom de ordinul $n - 1$, rădăcina determinată prin această metodă este exactă.

1.1.2. Desfășurarea laboratorului

1. să se scrie algoritmul de calcul al polinomului de interpolare Lagrange pentru funcția $f(x) = 1/x$ și să se afișeze valoarea interpolantului în trei puncte la alegere. Corectitudinea valorilor obținute se va aprecia prin comparare cu valoarea calculată a funcției în punctele respective. Se vor considera 8 puncte de interpolare distribuite aleator în intervalul $(0,2]$.
2. să se scrie algoritmul de calcul al polinomului de interpolare Lagrange pentru funcția $f(x) = (1-x)/5$ și să se afișeze valoarea interpolantului în trei puncte la alegere. Corectitudinea valorilor obținute se va aprecia prin comparare cu valoarea calculată a funcției în punctele respective. Se vor considera 10 puncte de interpolare distribuite aleator în intervalul $(0,2]$.
3. să se scrie algoritmul de calcul al polinomului de interpolare Lagrange pentru funcția $f(x) = 1/(x-3)$ și să se afișeze valoarea interpolantului în trei puncte la alegere. Se vor considera 8 apoi 15 puncte de interpolare distribuite uniform în intervalul $(0,2]$ și se va face comparație între valorile obținute în cele două cazuri.

1.2. Metoda Neville

1.2.1. Aspecte teoretice

Metoda Neville nu constituie o abordare distinctă a problemei interpolării, ci reprezintă mai degrabă un algoritm optim de construire a polinomului de interpolare unic printr-un număr dat de puncte, care este polinomul Lagrange. Un dezavantaj al utilizării directe a formulei (1.1.5) a polinomului Lagrange este acela că nu oferă o estimare a erorii, decât prin compararea valorii interpolanților pentru seturi de puncte de tabelare care se subîntind. Acest mod de lucru nu permite însă re folosirea rezultatelor obținute pentru un anumit interpolant în evaluarea interpolanților de ordin superior.

Metoda Neville implică în esență calculul iterativ al interpolanților de ordine consecutive, construiți relativ la subseturi crescânde de puncte de interpolare, cu re folosirea în cel mai înalt grad a rezultatelor anterioare și furnizând în mod natural o estimare a erorii aproximării.

Fie funcția $f(x)$ specificată prin cele n valori corespunzătoare șirului de argumente x_1, x_2, \dots, x_n :

$$f(x_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Pentru a construi eficient polinomul Lagrange care interpo lează toate cele n puncte de tabelare (x_i, y_i) , și modelează funcția $f(x)$, definim mai întâi o familie de polinoame de interpolare, astfel ca $P_{i,j}(x)$ să fie polinomul unic care interpo lează succesiunea de puncte cu abscisele cuprinse între x_i și x_j , adică:

$$P_{i,j}(x_k) = y_k, \quad i \leq k \leq j \quad (1.2.1)$$

Desigur, interpolând $j-i+1$ puncte, polinomul $P_{i,j}(x)$ este de ordinul $j-i$. În particular, $P_{i,i}(x)$ este polinomul de ordin zero care interpo lează numai punctul (x_i, y_i) , adică funcția constantă care ia pentru orice argument valoarea y_i . Pentru ansamblul polinoamelor $P_{i,i}(x)$ avem atunci:

$$P_{i,i}(x) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.2.2)$$

Evident, polinomul Lagrange căutat poate fi identificat cu $P_{1,n}(x)$, care este polinomul de interpolare unic în raport cu întregul set de date:

$$P_{n-1}(x) = P_{1,n}(x). \quad (1.2.3)$$

Evaluarea polinomului $P_{1,n}(x)$ pentru un anumit argument x poate fi realizată în mod optim aranjând valorile $P_{i,j}(x)$ potrivit următorului tablou cu "predecesori" și "descendenți", pe fiecare coloană aflându-se polinoamele de același ordin m (egal cu diferența $j-i$ dintre cei doi indici):

	$m=0$	1	2	...	$n-2$	$n-1$
x_1	$P_{1,1}$	$P_{1,2}$	$P_{1,3}$...	$P_{1,n-1}$	$P_{1,n}$
x_2	$P_{2,2}$	$P_{2,3}$...	$P_{2,n-1}$	$P_{2,n}$	
x_3	$P_{3,3}$		
...	...	$P_{n-2,n-1}$	$P_{n-2,n}$			
x_{n-1}	$P_{n-1,n-1}$	$P_{n-1,n}$				
x_n	$P_{n,n}$					

Metoda Neville este propriu-zis un algoritm de completare recursivă a coloanelor tabloului - de la stânga la dreapta, pornind de la polinoamele de ordin zero $P_{i,i}(x)$ și conducând pe ultima coloană la un singur descendent, care este valoarea căutată $P_{1,n}(x)$. Propagarea valorilor se poate efectua pe baza relației dintre un anumit descendent $P_{i,j}(x)$ și cei doi predecesori ai săi de ordin inferior, $P_{i,j-1}(x)$ și $P_{i+1,j}$ (caracterizați prin aceeași diferență $j-i-1$ între indici), situați unul sub altul pe coloana anterioară:

$$P_{i,j}(x) = \frac{(x-x_j)P_{i,j-1}(x) + (x_i-x)P_{i+1,j}(x)}{x_i-x_j} \quad (1.2.4)$$

Intr-adevăr, pentru orice x_k cu $i < k < j$ sunt satisfăcute condițiile de interpolare, deoarece predecesorii $P_{i,j-1}(x)$ și $P_{i+1,j}(x)$ satisfac ei înșiși aceste condiții pentru subsetul comun de puncte de interpolare:

$$P_{i,j}(x_k) = \frac{(x_k-x_j)y_k + (x_i-x_k)y_k}{x_i-x_j} = y_k.$$

În particular, pentru punctele extreme x_i și x_j are loc

$$P_{i,j}(x_i) = \frac{(x_i-x_j)y_i + (x_i-x_i)P_{i+1,j}(x_i)}{x_i-x_j} = y_i,$$

$$P_{i,j}(x_j) = \frac{(x_j-x_j)P_{i,j-1}(x_j) + (x_i-x_j)y_j}{x_i-x_j} = y_j.$$

Prin urmare, polinomul $P_{i,j}(x)$ definit de relația de recurență (1.2.4) interpolează toate cele $j-i+1$ puncte $(x_i, y_i), \dots, (x_j, y_j)$ și, fiind un polinom de ordinul $j-i$, reprezintă într-adevăr polinomul unic de interpolare, adică polinomul Lagrange.

Având în vedere că metoda Neville implică parcurgerea *pe coloane* a tabloului de valori $P_{i,j}(x)$ și că indicii polinoamelor de pe o anumită coloană m sunt legați prin relația $j=m+i$, formula de recurență (1.2.4) poate fi rescrisă sub o formă mai adecvată pentru implementări prin introducerea notațiilor $P_i^{(m)}(x) = P_{i,j}(x)$ și $x_{m+i} = x_j$, care pun în evidență indicele de coloană și, implicit, ordinul polinoamelor:

$$P_i^{(m)}(x) = \frac{(x - x_{m+i})P_i^{(m-1)}(x) + (x_i - x)P_{i+1}^{(m-1)}(x)}{x_i - x_{m+i}}, \quad (1.2.5)$$

$$m=1, 2, \dots, n-1, \quad i=1, 2, \dots, n-m.$$

Indicele de coloană m poate fi parcurs în mod independent, iar pentru fiecare coloană indicele de linie i ia $n-m$ valori, cu una mai puțin decât pentru coloana anterioară. În implementări concrete este suficientă utilizarea unui tablou unidimensional, în ale cărui componente sunt memorate valorile polinoamelor $P_i^{(m)}(x)$ de pe coloana curentă.

○ estimare utilă pentru eroarea aproximării funcției tabelate prin polinomul Lagrange $P_{n-1}(x) = P_1^{(n-1)}(x)$ este furnizată de diferența ultimilor doi predecesori:

$$\Delta = \left| P_1^{(n-2)}(x) - P_2^{(n-2)}(x) \right|$$

Semnificația argumentelor următoarei implementări a metodei Neville este în esență aceeași cu cea din cazul rutinei Lagrange, prezentată în secțiunea anterioară: x_i și y_i - tablouri care conțin perechile de coordonate ale punctelor de interpolare, ni - numărul punctelor de interpolare și x - argumentul pentru care se evaluează polinomul de interpolare. Parametrul `*err` returnează, în plus, eroarea aproximării.

```
#include "stdio.h"
#include "stdlib.h"
#include "math.h"

double Neville(double xi[], double yi[], int ni, double x, double *err)
/*-----
Evalueaza polinomul de interpolare Lagrange prin metoda Neville si returneaza o estimare a erorii absolute
xi[] - abscisele punctelor interpolate
yi[] - ordonatele punctelor interpolate
ni - numarul punctelor interpolate
x - argumentul polinomului
*err - estimarea erorii absolute a valorii polinomului (iesire)
-----*/
{
    double *p, y;
    int i, m;
    p = (double*)malloc(ni * sizeof(double));

    for (i = 0; i < ni; i++) /* initializeaza tabloul cu */
        p[i] = yi[i]; /* polinoamele de ordin 0 */
    for (m = 1; m < ni - 1; m++) /* parcurge coloanele tabloului */
```



```

        for (i = 0; i < ni - m; i++)
            p[i] = ((x - xi[m + i]) * p[i] + (xi[i] - x) * p[i + 1]) / (xi[i] - xi[m + i]);
    y = p[1];                /* valoarea polinomului */
    *err = fabs(p[1] - p[2]); /* estimarea erorii */
    free(p);
    return y;
}

void main()
{
    double x[8] = {0.15, 0.2, 0.3, 0.5, 0.8, 1.1, 1.4, 1.7};
    double y[8];
    double err=0;

    for (int i = 0; i < 8; i++)
        y[i] = 1 / x[i];
    printf("V aloarea interpolantului in punctul 1.55 este %lf", Neville(x, y, 8, 1.55, &err));
    printf(" cu o valoare a erorii de %5lf\n", err);
}

```

1.2.2. Desfășurarea laboratorului

1. să se scrie algoritmul metodei Neville pentru funcția $f(x) = 1/x$ și să se afișeze valoarea interpolantului și a erorii în trei puncte la alegere. Se vor considera 8 puncte de interpolare distribuite aleator în intervalul $(0,2]$.
2. să se scrie algoritmul metodei Neville pentru funcția $f(x) = (7-x)/23$ și să se afișeze valoarea interpolantului și a erorii în trei puncte la alegere. Se vor considera 10 puncte de interpolare distribuite aleator în intervalul $(0,2]$.
3. să se scrie algoritmul metodei Neville pentru funcția $f(x) = 1/(x-3)$ și să se afișeze valoarea interpolantului și a erorii în trei puncte la alegere. Se vor considera 15 apoi 20 puncte de interpolare distribuite uniform în intervalul $(0,2]$ și se vor compara valorile erorilor obținute în cele două cazuri.

L2. Calculul integralelor unidimensionale

2.1. Formulele de cuadratură Newton-Cotes

2.1.1. Aspecte teoretice

Să presupunem că pentru o funcție $y = f(x)$ se cere calculul integralei definite

$$I = \int_a^b f(x) dx. \quad (2.1.1)$$

Impărțim intervalul $[a, b]$ în $(n-1)$ subintervale egale, de lungime

$$h = (b - a)/(n - 1) \quad (2.1.2)$$

prin punctele

$$x_i = a + (i - 1)h, i = 1, 2, \dots, n \quad (2.1.3)$$

și presupunând că sunt cunoscute valorile $f_i \equiv f(x_i)$ în nodurile x_i , vom aproxima funcția $f(x)$ prin polinomul de interpolare Lagrange

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

Introducând variabila adimensională

$$q = (x - a)/h, \quad q \in [0, n - 1],$$

argumentele funcțiilor pot fi exprimate sub forma $x = a + qh$ și produsele din expresia polinomului de interpolare Lagrange devin

$$\prod_{j \neq i} (x - x_j) = h^{n-1} \prod_{j \neq i} [q - (j - 1)]$$

$$\prod_{j \neq i} (x_i - x_j) = h^{n-1} \prod_{j \neq i} (i - j) = (-1)^{n-1} h^{n-1} \prod_{j=1}^{i-1} (i - j) \prod_{j=i+1}^n (j - i) = (-1)^{n-i} h^{n-1} (i - 1)! (n - i)!$$

Cu acestea, polinomul Lagrange se scrie

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n \frac{\prod_{j \neq i} [q - (j - 1)]}{(-1)^{n-i} (i - 1)! (n - i)!} f_i \quad (2.1.4)$$

și obținem următoarea aproximație a integralei căutate

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_{n-1}(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i f_i \quad (2.1.5)$$

cu coeficienți A_i dați de

$$A_i = \int_a^b \frac{\prod_{j \neq i} [q - (j - 1)] dx}{(-1)^{n-i} (i - 1)! (n - i)!} = \frac{h \int_0^{n-1} \prod_{j \neq i} [q - (j - 1)]}{(-1)^{n-i} (i - 1)! (n - i)!} \quad (2.1.6)$$

Punând acești coeficienți sub forma $A_i = (b - a)H_i$, rezultă din (2.1.5) formula de cuadratură Newton-Cotes,

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \sum_{i=1}^n H_i f_i \quad (2.1.7)$$

în care coeficienții H_i , numiți *coeficienți Cotes*, au expresiile

$$H_i = \frac{\int_0^{n-1} \prod_{j \neq i} [q - (j-1)] dq}{(-1)^{n-1} (i-1)!(n-i)!(n-1)}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.1.8)$$

Se remarcă faptul că, potrivit definiției de mai sus, coeficienții Cotes sunt independenți atât de funcția integrată cât și de intervalul de integrare. Trebuie menționat, de asemenea, că au loc proprietățile:

$$\sum_{i=1}^n H_i = 1, \quad H_i = H_{n-i+1}. \quad (2.1.9)$$

Prima dintre aceste relații poate fi demonstrată imediat punând în formula de cuadratură (2.1.7) $f(x) \equiv 1$, iar cea de a doua proprietate rezultă chiar din expresia (2.1.8) a coeficienților.

2.2. Formula trapezelor

2.2.1. Aspecte teoretice

Particularizând relațiile (2.1.8) pentru cazul $n=2$, obținem coeficienții Cotes

$$H_1 = -\int_0^1 (q-1) dq = \frac{1}{2} \quad (2.2.1)$$

$$H_2 = \int_0^1 q dq = \frac{1}{2}, \quad (2.2.2)$$

și înlocuindu-i în formula de cuadratură (2.1.7), rezultă *formula trapezului*:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f_1 + f_2) \quad (2.2.3)$$

Numele formulei se datorează faptului că, așa cum se vede în figura de mai jos, ea poate fi obținută prin înlocuirea funcției $f(x)$ cu segmentul care unește punctele de coordonate (x_1, f_1) și (x_2, f_2) , valoarea integralei fiind aproximată de aria trapezului determinat prin proiectarea acestui segment pe axa absciselor.

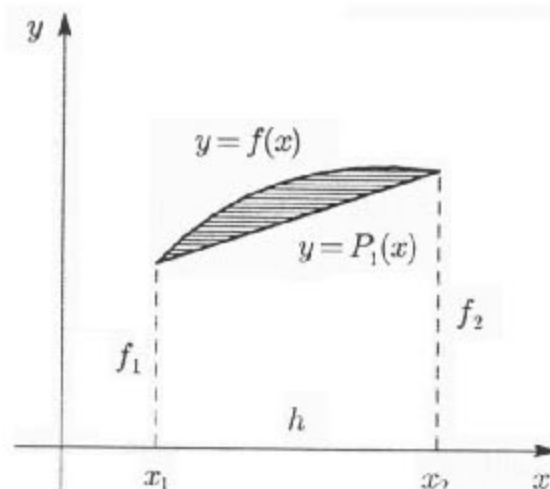


Fig. 2.2.1 Formula trapezului aproximează funcția prin dreapta care trece prin punctele (x_1, f_1) și (x_2, f_2) .

Restul (eroarea) formulei de cuadratură (2.2.3), figurat hașurat în figura 2.2.1, poate fi dedus presupunând că $f(x)$ este continuă împreună cu primele două derivate pe $[a, b]$ ($f(x) \in C^{(2)}[a, b]$). Astfel, exprimând R ca funcție de h avem:

$$R(h) = \int_{x_1}^{x_1+h} f(x) dx - \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_1+h)]$$

Derivând această relație de două ori în raport cu h , obținem:

$$R'(h) = \frac{1}{2} [f(x_1+h) - f(x_1)] - \frac{h}{2} f'(x_1+h)$$

$$R''(h) = -\frac{h}{2} f''(x_1+h).$$

Integrăm acum $R''(h)$ de două ori în raport cu h , observând că $R(0) = R'(0) = 0$ și utilizând *teorema mediei*. Rezultă succesiv:

$$R'(h) = R'(0) + \int_0^h R''(t) dt = -\frac{1}{2} f''(\xi_1) \int_0^h t dt = -\frac{h^2}{4} f''(\xi_1)$$

$$R(h) = R(0) + \int_0^h R'(t) dt = -\frac{1}{4} f''(\xi) \int_0^h t^2 dt = -\frac{h^3}{12} f''(\xi),$$

unde $\xi, \xi_1 \in (x_1, x_1+1)$. Astfel, avem pentru restul formulei de cuadratură a trapezului

$$R = -\frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in (x_1, x_2). \quad (2.2.4)$$

Se constată că restul are semn opus derivatei secunde din intervalul (x_1, x_2) și, prin urmare, formula trapezului supraestimează valoarea integralei dacă $f'' > 0$ și o subestimează în caz contrar.

Formula trapezului (2.2.3) nu prezintă interes ca atare, deoarece, implicând doar două valori ale integrandului, oferă precizie satisfăcătoare numai pentru integrarea funcțiilor liniare. Utilizând însă proprietatea de *aditivitate* a integralelor față de intervalul de integrare, vom generaliza acest rezultat în cele ce urmează pentru a obține o formulă de cuadratură de interes practic.

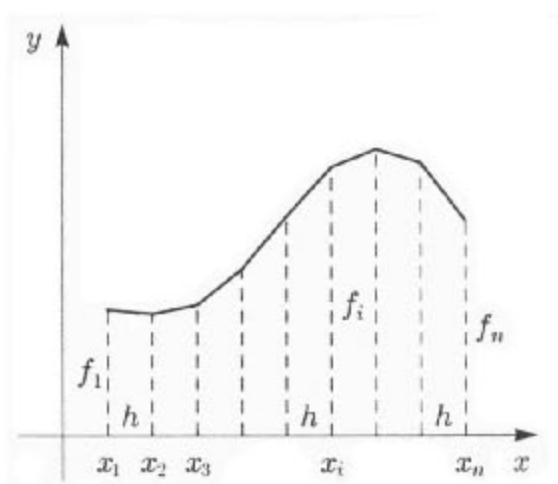


Figura 2.2.2. Formula trapezelor aproximează integrând cu linia poligonală definită de abscisele și valorile corespunzătoare ale funcției

În acest scop împărțim, așa cum se vede în figura 2.2.2, intervalul $[a, b]$ în $(n-1)$ subintvalele egale de lungime

$$h = (b - a) / (n - 1) \quad (2.2.5)$$

prin intermediul punctelor echidistante

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.2.6)$$

Desemnând prin $f_i \equiv f(x_i)$ valorile integrandului în nodurile rețelei, aplicăm formula trapezului (2.2.3) fiecărui subinterval $[x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + \frac{h}{2}(f_2 + f_3) + \dots + \frac{h}{2}(f_{n-1} + f_n)$$

și, grupând termenii, obținem *formula trapezelor*:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left[\frac{f_1}{2} + \sum_{i=2}^{n-1} f_i + \frac{f_n}{2} \right]. \quad (2.2.7)$$

Geometric, această aproximație implică înlocuirea graficului funcției $y = f(x)$ cu linia poligonală care unește punctele $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$.

Restul formulei trapezelor se compune din resturile corespunzătoare celor $(n-1)$ subintervale de integrare,

$$R = -\frac{(n-1)h^3}{12} f''(\xi) = h \left[\frac{f_1}{2} + \sum_{i=2}^{n-1} f_i + \frac{f_n}{2} \right] \quad (2.2.8)$$

și prezintă o dependență tipică de h^2 . Această dependență are ca și consecință faptul că, spre exemplu, prin reducerea lungimii subintervalului la valoarea $h/2$ sau, echivalent, prin dublarea numărului de subintervale considerând $(2n-1)$ puncte de integrare, eroarea de integrare scade de 4 ori.

Funcția *Trapez*, prezentată în continuare, calculează integrale definite prin metoda trapezelor. Datele de intrare ale rutinei sunt limitele domeniului de integrare, a și b , și numărul punctelor de integrare, n . Numele funcției care trebuie integrată este transmis ca parametru corespunzător parametrului formal *Func*. Valoarea integralei este returnată prin numele funcției.

```
double Trapez (double a, double b, int n)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b]
utilizand formula trapezelor cu n puncte de integrare */
{
    double h, s;
    int i;

    h = (b - a) / (n - 1);
    s = 0.5 * (Func(a) + Func(b));
    for (i = 1; i <= (n - 2); i++)
        s += Func(a + i * h);

    return h * s;
}
```

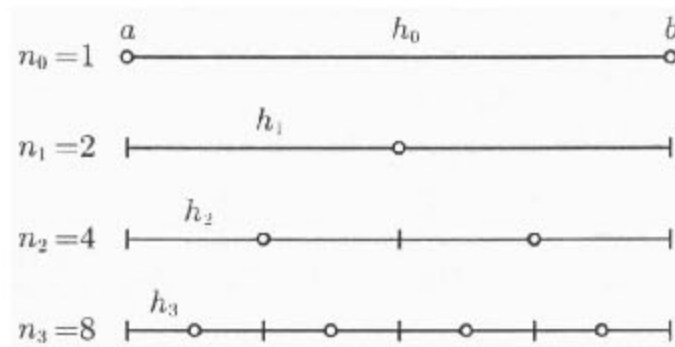


Figura 2.2.3. Schema de înjumătățire a intervalelor în metoda trapezelor cu control automat al pasului. Prin cerințe sunt figurate valorile care trebuie calculate în fiecare etapă

Pentru generarea absciselor de integrare, adunarea repetată a lungimii pasului, $x_{i+1} = x_i + h$, poate provoca acumularea de erori în cazul numerelor mari de puncte de integrare, fiind deci preferabilă utilizarea relației

$$x_{i+1} = a + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

În plus, valori generate cu ajutorul acesteia din urmă pot fi comunicate direct ca argumente în apelul funcției *Func*.

Controlul pasului și implicit al preciziei de integrare se realizează în practică adesea prin proces de „exprimare” numerică. Acest proces implică de obicei calculul integralei pentru o valoare oarecare h a pasului, corespunzând unui număr n de puncte de integrare, și compararea valorii astfel obținute cu valoarea rezultată pentru pasul $h/2$, corespunzând unui număr de $(2n-1)$ puncte de integrare. Înjumătățirea pasului trebuie continuată, în principiu, până când eroarea relativă pentru două aproximații consecutive ale integralei scade sub o valoare admisibilă ϵ .

Calculul integralei cu o precizie prestabilită prin metoda înjumătățirii pasului poate fi semnificativ optimizat observând că, potrivit figurii 2.2.3, care reprezintă rețelele punctelor de integrare pentru primele patru etape ale procesului de înjumătățire, nu este necesară evaluarea funcției în toate punctele de integrare, ci doar în cele (figurate prin cercuri) prin care au fost înjumătățite subintervalele rețelei utilizate în etapa anterioară. Restul valorilor funcției, deja calculate la pașii anteriori, sunt folosite implicit stabilind o relație de recurență între două aproximații consecutive ale integralei.

Primele aproximații furnizate de formula trapezelor pot fi scrise:

$$T_0 = h_0 \left[\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right], \quad h_1 = b - a$$

$$T_1 = h_1 \left[\frac{f(a)}{2} + f(a + h_1) + \frac{f(b)}{2} \right], \quad h_1 = h_0 / 2 \quad (2.2.9)$$

$$T_2 = h_2 \left[\frac{f(a)}{2} + f(a + h_2) + f(a + 2h_2) + f(a + 3h_2) + \frac{f(b)}{2} \right], \quad h_2 = h_1 / 2 \quad (2.2.10)$$

Se poate verifica fără dificultate că această succesiune de aproximații poate fi descrisă cu ajutorul procesului iterativ

$$T_0 = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)], \quad h_0 = b - a, n_0 = 1 \quad (2.2.11)$$

$$T_k = \frac{1}{2} \left[T_{k-1} + h_{k-1} \sum_{i=1}^{n_{k-1}} f(a + (i - 1/2)h_{k-1}) \right], \quad (2.2.12)$$

$$h_k = h_{k-1} / 2, n_k = 2n_{k-1}, k = 1, 2, \dots \quad (2.2.13)$$

unde $h_k = (b - a) / n_k$ este lungimea subintervalelor după etapa k , iar $n_k = 2^k$ reprezintă numărul corespunzător de subintervale sau, echivalent, numărul punctelor noi de integrare și de înjumătățire a subintervalelor pentru etapa următoare.

Procesul recurent (2.2.11) - (2.2.13) trebuie continuat până când diferența relativă dintre două aproximații succesive ale integralei devine mai mică sau egală cu o toleranță prestabilită ε . Pentru a evita împărțirea cu 0 implicată de evaluarea erorii relative în cazul $T_k = 0$, exprimăm criteriul de convergență sub forma

$$|T_k - T_{k-1}| \leq \varepsilon |T_k|. \quad (2.2.14)$$

Algoritmul (2.2.11) - (2.2.14) al metodei trapezului cu control automat al pasului de integrare se regăsește sub forma funcției *TrapezControl* care urmează:

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define Pi 3.1415926535897932384626433832795

double Func(double x)
{
    return atan(x);
}

double TrapezControl(double a, double b)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b]
utilizand formula trapezelor cu control automat al pasului de
integrare */
{
    const double eps = 1e-6;
    const int kmax = 30;
    double h, sum, t, t0;
    long i, n;
    int k;

    h = b - a;
    n = 1;
    t0 = 0.5 * h * (Func(a) + Func(b)); //aprox. initiala

    for (k = 1; k <= kmax; k++)
    {
        sum = 0.0;
        for (i = 1; i <= n; i++)
            sum += Func(a + (i - 0.5) * h);
        t = 0.5 * (t0 + h * sum);
        if (fabs(t - t0) <= eps * fabs(t))
            break;
        h *= 0.5;
        n *= 2;
        t0 = t;
    }

    if (k >= kmax)
```

```

        printf("TrapezControl:   nr.   maxim   de   iteratii
depasit!\n");

        return t;
}

void main()
{
    printf("integrala functiei atan(x) pe intervalul [-pi/2
3pi/2] are valoarea: %.8f\n",TrapezControl(-Pi/2, 3*Pi/2));
}

```

Parametri formali ai acestei rutine au aceeași semnificație cu cei ai funcției *Trapez*. Pentru ca numărul punctelor noi de integrare n , ca putere a lui 2, să nu depășească valoarea maximă de tip *long* reprezentabilă (pentru majoritatea implementărilor limbajului C egală cu $2^{31} - 1$), numărul de înjumătățiri ale subintervalelor este limitat prin variabila $kmax$ la 30. Dacă, datorită convergenței slabe a procesului, se epuizează cele $kmax$ iterații posibile fără a se fi atins precizia dorită eps în calculul integralei, se iese din ciclul înjumătățirilor cu variabila de control k incrementată la valoarea $kmax+1$ și se emite un mesaj de eroare.

2.3. Formula lui Simpson

2.3.1. Aspecte teoretice

O formulă de cuadratură cu un grad de precizie mai ridicat decât formula trapezului se obține particularizând formulele Newton – Cotes pentru $n = 3$. Se obțin coeficienții Cotes:

$$H_1 = \frac{1}{4} \int_0^2 (q-1)(q-2) dq = \frac{1}{6} \quad (2.3.1)$$

$$H_2 = -\frac{1}{2} \int_0^2 q(q-2) dq = \frac{2}{3} \quad (2.3.2)$$

$$H_3 = \frac{1}{4} \int_0^2 q(q-1) dq = \frac{1}{6} \quad (2.3.3)$$

și, având în vedere că $b - a \equiv x_3 - x_1 = 2h$, rezultă *formula lui Simpson*:

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f_1 + 4f_2 + f_3). \quad (2.3.4)$$

Din punct de vedere geometric, această formulă implică înlocuirea curbei $y=f(x)$ cu parabola $y = P_2(x)$ definită de punctele (x_1, f_1) , (x_2, f_2) și (x_3, f_3) .

Admițând că $f(x)$ aparține clasei funcțiilor continue împreună cu primele patru derivate pe $[a, b]$ ($f(x) \in C^4[a, b]$), se poate obține o estimare a restului formulei lui Simpson printr-o tehnică similară celei utilizate în cazul formulei trapezului,

$$R = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \xi \in [a, b] \quad (2.3.5)$$

Este important de observat că restul formulei lui Simpson depinde de h^5 , în timp ce restul formulei trapezului depinde doar de h^3 . Se constată că formula Simpson este exactă nu numai pentru polinoame de ordinul doi, ci și pentru cele de ordinul trei.

Pentru a stabili o formulă de interes practic, care să asigure o precizie satisfăcătoare pentru un integrand arbitrar, se generalizează relația (2.3.4), similar formulei trapezelor,

făcând uz de *aditivitatea* integralei față de intervalul de integrare. Astfel, divizând intervalul $[a, b]$ printr-un număr *impar*, $n=2m+1$, de puncte echidistante,

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

caracterizate prin echi-distanța

$$h = \frac{b - a}{n - 1} = \frac{b - a}{2m},$$

se poate aplica formula lui Simpson (2.3.4) pentru fiecare din cele m subintervale duble de lungime $2h$ determinate de cele trei puncte de rețea consecutive: $[x_1, x_3], [x_3, x_5], \dots, [x_{n-2}, x_n]$. Geometric, această abordare revine la aproximarea integrandului prin arce de parabolă pe fiecare pereche de subintervale consecutive. Este evident că pentru un număr par de puncte de rețea, formula lui Simpson nu poate fi aplicată de un număr întreg de ori. Cu toate acestea, integrala pe întregul interval $[a, b]$ poate fi scrisă:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3}(f_1 + 4f_2 + f_3) + \frac{h}{3}(f_3 + 4f_4 + f_5) + \dots + \frac{h}{3}(f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n).$$

Regrupând termenii rezultă de aici *formula lui Simpson generalizată*,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3}(f_1 + 4\sigma_2 + 2\sigma_1 + f_n), \quad (2.3.6)$$

unde

$$\sigma_1 = \sum_{i=1}^{(n-3)/2} f_{2i+1}, \quad \sigma_2 = \sum_{i=1}^{(n-1)/2} f_{2i} \quad (2.3.7)$$

Suma σ_1 se compune din termenii de indice impar, în timp ce σ_2 însumează termenii cu indice par.

Admițând că $f(x) \in C^{(4)}[a, b]$, restul formulei lui Simpson generalizate se obține însumând resturile de tipul (4.3.5) pentru fiecare din cele m subintervale de lungime $2h$ ale intervalului $[a, b]$:

$$R = -\frac{mh^5}{90} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]. \quad (2.3.8)$$

Funcția *Simpson0*, listată în continuare, codifică întocmai formulele (2.3.6) – (2.3.7). Semnificația parametrilor este aceeași cu cea a parametrilor funcției *Trapez*, descrisă anterior, și numele funcției utilizator este transmis și aici prin lista de argumente.

```
float Simpson0 (float Func(float), float a, float b, int n)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b]
utilizand formula lui Simpson cu n puncte de integrare */
{
    float h, s1, s2;
    int i, par = 0;

    if ((n/2)*2 == n) n++; //incrementeaza n daca este par

    h = (b - a) / (n - 1);
    s1 = s2 = 0.0;
    for (i = 1; i <= (n - 2); i++) {
        if (par) s1 += Func(a + i * h);
        else s2 += Func(a + i * h);
        par = ~par;
    }
}
```

```

return (h/3) * (Func(a) + 4*s2 + 2*s1 + Func(b));
}

```

În situațiile în care în mod eronat numărul punctelor de integrare n , comunicat rutinei, este par, el este incrementat. Adunarea alternativă a termenilor la o sumă sau alta este controlată de valorile variabilei întregi *par*, care, prin acțiunea operatorului „~” de incrementare bit-cu-bit, ia alternativ valori nule și nenule.

Se poate realiza o codificare mai eficientă rescriind relațiile (2.3.7) sub forma

$$\sigma_1 = \sum_{i=1}^{(n-3)/2} f(x_{2i+1}), x_{2i+1} = a + i(2h) \quad (2.3.9)$$

$$\sigma_2 = f(x_2) + \sum_{i=1}^{(n-3)/2} f(x_{2(i+1)}), x_{2(i+1)} = x_{2i+1} + h, \quad (2.3.10)$$

astfel încât numărul termenilor din cele două sume să fie egal, indicele i parcurgând același șir de valori. În implementarea dată mai jos nu mai este necesară structura de selecție *if*, deoarece la fiecare iterație este adunat câte un termen fiecărei sume.

```

float Simpson (float Func(float), float a, float b, int n)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b]
utilizand formula lui Simpson cu n puncte de integrare */
{
    float h, h2, s1, s2, x;
    int i;

    if ((n/2)*2 == n) n++; //incrementeaza n daca este par

    h = (b - a) / (n - 1); h2 = 2*h;
    s1 = 0.0; s2 = Func(a+h);
    for (i = 1; i <= (n - 3)/2; i++) {
        x = a + i*h2;
        s1 += Func(x); s2 += Func(x+h);
    }

    return (h/3) * (Func(a) + 4*s2 + 2*s1 + Func(b));
}

```

Ca și în cazul metodei trapezelor, se poate concepe un algoritm având la bază formula lui Simpson, care să realizeze în mod automat adaptarea pasului de integrare pentru efectuarea cuadraturii cu o anumită precizie prestabilită ϵ . În esență, trebuie comparate aproximațiile calculate recent ale integralei, corespunzătoare valorilor h și $h/2$ ale pasului de integrare, înjumătățind pasul până când eroarea relativă pentru două aproximații consecutive scade sub valoarea ϵ .

Având în vedere aproximațiile date de formula trapezelor pentru valori ale pasului de integrare înjumătățite succesiv, se poate verifica fără dificultate că aproximațiile formulei lui Simpson pot fi exprimate în raport cu cele dintâi:

$$S_1 = \frac{h_1}{3} [f(a) + 4f(a + h_1) + f(b)] = \frac{4T_1 - T_0}{3}$$

$$S_2 = \frac{h_2}{3} [f(a) + 4f(a + h_2) + 2f(a + h_2) + 4f(a + 3h_2) + f(b)] = \frac{4T_2 - T_1}{3}$$

..... (2.3.11)

Generalizând aceste rezultate, avem

$$S_k = \frac{4T_k - T_{k-1}}{3} \quad (2.3.12)$$

Cu acestea, algoritmul pentru calculul recursiv al aproximațiilor formulei lui Simpson poate fi descris cu ajutorul relațiilor:

$$T_0 = \frac{h_0}{2} [f(a) + f(b)], \quad h_0 = b - a, \quad n_0 = 1 \quad (2.3.13)$$

$$T_k = \frac{1}{2} \left[T_{k-1} + h_{k-1} \sum_{i=1}^{n_{k-1}} f(a + (i-1/2)h_{k-1}) \right], \quad k=1,2,\dots \quad (2.3.14)$$

$$S_k = \frac{4T_k - T_{k-1}}{3}, \quad h_k = h_{k-1}/2, \quad n_k = 2n_{k-1}. \quad (2.3.15)$$

Acest proces este continuat până când eroarea relativă în calculul integralei devine mai mică sau egală cu toleranța prestabilită ϵ . Ca și în cazul metodei trapezelor, pentru a trata unitar și situațiile în care $S_k = 0$, scriem acest criteriu sub forma:

$$|S_k - S_{k-1}| \leq \epsilon |S_k|. \quad (2.3.16)$$

Argumentele, variabilele și constantele locale ale funcției *SimpsonControl*, scrisă pe baza acestui algoritm, păstrează semnificația pe care o au în cazul funcției *TrapezControl*.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define Pi 3.1415926535897932384626433832795

float func(float x)
{
    return atan(x);
}

float SimpsonControl(float Func(float), float a, float b)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b]
utilizand formula lui Simpson cu control automat al pasului de
integrare */
{
    const float eps = 1e-6; //precizia relativa a integralei
    const int kmax = 30; //numar maxim de injumatatiri
    float h, s, s0, sum, t, t0;
    long i, n;
    int k;

    h = b - a;
    n = 1;
    s0 = t0 = 0.5 * h * (Func(a) + Func(b)); //aprox. initiala

    for (k = 1; k <= kmax; k++)
    {
        sum = 0.0;
        for (i = 1; i <= n; i++)
            sum += Func(a + (i - 0.5) * h);
        t = 0.5 * (t0 + h*sum);
```

```

        s = (4*t - t0)/3; //noua aproximatie
        if (fabs(s - s0) <= eps * fabs(s))
            break; //testeaza convergenta
        h *= 0.5;
        n *= 2; s0 = s;
        t0 = t;
    }

    if (k >= kmax)
        printf("SimpsonControl: nr. maxim de iteratii
depasit!\n");

    return s;
}

void main()
{
    printf("integrala functiei atan(x) pe intervalul [-pi/2
3pi/2] are valoarea: %.8f\n", SimpsonControl(func, -Pi/2,
3*Pi/2));
}

```

2.3.2. Desfășurarea laboratorului

1. Se va aplica algoritmul metodei trapezelor și algoritmul metodei lui Simpson, ambele cu control automat al pasului de integrare, pentru a calcula valoarea integralelor de la punctele a)...e). Precizia relativă va fi 6 zecimale iar rezultatele se vor afișa cu 8 zecimale. Se va alcătui un tabel cu diferențele între valoarea integralei calculată direct și cea rezultată în urma aplicării metodei trapezelor respectiv Simpson pentru fiecare din cele 5 integrale.

$$a) \int_2^7 \frac{1}{x} dx = \ln|x| \Big|_2^7$$

$$b) \int_{-1}^1 x^{10} dx = \frac{x^{11}}{11} \Big|_{-1}^1$$

$$c) \int_{-5}^0 e^x dx = e^x \Big|_{-5}^0$$

$$d) \int_0^x \sin x dx = -\cos x \Big|_0^x$$

$$e) \int_{\frac{x}{2}}^{\frac{3x}{2}} \arctan x dx = x \arctan x - \frac{1}{2 \ln(1+x^2)} \Big|_{\frac{x}{2}}^{\frac{3x}{2}}$$

L3. Rezolvarea numerică a ecuațiilor diferențiale ordinare

3.1. Metoda Euler

3.1.1. Aspecte teoretice

Problemele modelate cu ecuații diferențiale ordinare se caracterizează printr-o singură variabilă independentă și una sau mai multe variabile dependente. În aplicațiile științifice și tehnice, variabila dependentă este timpul (t) sau spațiul (x). Indiferent de ordinul ecuației diferențiale, care rezultă din modelarea matematică a problemei, rezolvarea numerică se poate reduce întotdeauna la o ecuație diferențială de ordinul I.

De exemplu, o ecuație diferențială de ordinul II:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + q(x) \frac{dy}{dx} = r(x)$$

este echivalentă cu un sistem de două ecuații diferențiale de ordinul I:

$$\frac{dy}{dx} = z(x)$$

$$\frac{dz}{dx} = r(x) - q(x)z(x)$$

În general, o ecuație diferențială nu are soluție unică. În aplicațiile concrete, se poate obține soluție unică dacă se cunosc valorile inițiale ale funcției necunoscute (*problemă Cauchy*) sau valorile pe frontiera domeniului de definiție (*problemă Dirichlet*).

Formularea completă a unei probleme ce constă în rezolvarea unei ecuații diferențiale de ordinul I (*problemă Cauchy*) este:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \end{aligned}$$

unde x_0 este valoarea inițială a variabilei independente.

Metoda Euler este foarte importantă, nu atât din punct de vedere practic (se acumulează erori mari de aproximare) cât mai ales conceptual, pentru înțelegerea metodelor numerice evaluate, de mare eficiență.

Fie problema Cauchy:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0, \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Dezvoltăm funcția $y(x)$ în serie Taylor, într-o vecinătate a punctului x_0 :

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} y''(x_0) + \dots$$

Introducem pasul de discretizare $h = x - x_0$ și rescriem relația de mai sus neglijând termenii de ordin superior lui 2:

$$y(x) = y(x_0) + h \cdot y'(x_0)$$

Termenii din partea dreaptă sunt cunoscuți din relațiile (3.1.1) iar valoarea lui $y(x)$ se evaluează în $x = x_0 + h$:

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + h \cdot f(x_0, y_0)$$

Notăm $y(x_0) = y_0$, $y(x_0 + k \cdot h) = y_k$, $k = 1, 2, \dots, n$, și obținem:

Pasul 1: $y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$,

Pasul 2: $y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1)$

Pasul 3: $y_3 = y_2 + h \cdot f(x_2, y_2)$

.....

Pasul n+1: $y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$, unde $x_n = x_0 + n \cdot h$.

Funcția necunoscută $y(x)$ se determină astfel prin valorile sale în puncte echidistante: $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$.

Programul în C++ care determină valorile funcției $y(x)$ este listat mai jos.

```
#include <stdio.h>
float f(float x, float y) //funcția f(x,y)
{
    return y / (y-x);
}

int main(void)
{
    float x=0.0, y=1.0, h=0.5; // valorile inițiale  $x_0, y_0, h$ 
    int n=0;
    printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f \n", n, x, y);

    for (n=1; n<=10; n++) {
        y=y+h*f(x,y); // relația  $y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$ 
        x=x+h;
        printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f \n", n, x, y);
    }
    return 0;
}
```

3.2. Metoda Euler modificată

3.2.1. Aspecte teoretice

Dezavantajul principal al algoritmului Euler îl constituie eroarea de calcul cumulată (determinată de neglijarea termenilor de ordin superior lui 2). Pentru a reduce această eroare se impune folosirea unui pas de discretizare h , foarte mic, ceea ce duce la creșterea timpului de execuție. Algoritmul lui Euler poate fi mai eficient dacă se utilizează în calcul, valoarea funcției $f(x,y)$ la ambele capete ale intervalului de discretizare h . De fapt, la fiecare pas, valoarea y_{n+1} se calculează în două etape. Prima etapă este cea din algoritmul Euler iar în a doua etapă se efectuează o corecție a valorii obținute.

$$\begin{aligned}
\text{Pas 1:} & \quad y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0), \\
& \quad y'_1 = f(x_1, y_1); \\
\text{Pas 1 - corecție:} & \quad y_1 = y_0 + h \cdot (y'_0 + y'_1) / 2, \\
& \quad y'_1 = f(x_1, y_1); \\
\\
\text{Pas 2:} & \quad y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1), \\
& \quad y'_2 = f(x_2, y_2); \\
\text{Pas 2 - corecție:} & \quad y_2 = y_1 + h \cdot (y'_1 + y'_2) / 2, \\
& \quad y'_2 = f(x_2, y_2); \\
& \dots\dots\dots \\
\text{Pas n+1:} & \quad y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n), \\
& \quad y'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1}); \\
\text{Pas n+1 - corecție:} & \quad y_{n+1} = y_n + h \cdot (y'_n + y'_{n+1}) / 2, \\
& \quad y'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1}); \\
\text{unde } x_n & = x_0 + n \cdot h.
\end{aligned}$$

În etapa a II-a, se corectează valoarea lui y_{n+1} considerând media derivatelor în punctele x_n și x_{n+1} . Pentru creșterea preciziei, secvența de corecție se poate relua încă o dată. Cerința de a folosi un pas de discretizare h , cât mai mic se menține și în cazul metodei Euler modificate.

Programul în C++ care determină valorile funcției $y(x)$ este listat în continuare. Problema Cauchy din program este:

$$\begin{aligned}
y' & = \frac{y}{y-x}; \quad x \in [0, \infty) \\
y_0 & = y(0) = 1; \quad (\text{Soluția analitică, exactă, este } y(x) = x + \sqrt{x^2 + 1}).
\end{aligned}$$

```

// Algoritmul Euler -modificat
#include <stdio.h>
#include <math.h>
float f(float x, float y)
{
    return y / (y-x);
}

int main(void)
{
    float x=0.0, y=1.0, h=0.05, y1, y2;
    int n=0;

    printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f \n", n, x, y);
    for(n=1; n<=50; n++) {
        y1=f(x, y);

```

```

y=y+h*f(x,y);
x=x+h;y2=f(x,y);
y=y+h*(y1+y2)/2;
printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f val_ex%8.4f \n",
n, x-h,y, x+sqrt(x*x+1));
}
return 0; }

```

3.3. Metode Runge – Kutta

3.3.1. Aspecte teoretice

Se bazează pe evaluări ale funcției $f(x,y)$ (cunoscută ca expresie analitică) și derivatelor sale în raport cu variabila independentă x , în mai multe puncte ale intervalului de integrare. Se asigură astfel o precizie mai bună, ca urmare a faptului că funcția $f(x,y)$ este dată iar derivatele de ordin superior ale funcției necunoscute $y(x)$ sunt exprimate prin derivate parțiale de ordin superior ale lui $f(x,y(x))$.

Fie problema Cauchy:

$$y'(x) = f(x,y);$$

$$y(x_0) = y_0;$$

Se evaluează derivatele de ordin superior ale funcției $y(x)$:

$$y'(x) = f(x,y);$$

$$y''(x) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dx} = f_x(x,y) + f_y(x,y) \cdot f(x,y) = f_x + f_y f \quad (3.3.1)$$

$$\begin{aligned}
y'''(x) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{d^2 y}{dx^2} = \\
&= f_{xx} + f_{xy} y' + f_{xy} y' + f_{yy} (y')^2 + f_y y'' = f_{xx} + 2ff_{xy} + f_{yy} f^2 + f_y (f_x + ff_y) = \\
&= f_{xx} + 2ff_{xy} + f_{yy} f^2 + f_x f_y + ff_y^2.
\end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Algoritmul Runge – Kutta de ordinul 2, se bazează pe dezvoltarea funcției $y(x)$ în serie Taylor luând în considerație termenii până la ordinul 2 de derivare. Formulele de bază, iterative, sunt:

$$y_{n+1} = y_n + ak_1 + bk_2 \quad \text{unde} \quad (3.3.3)$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n),$$

$$k_2 = hf(x_n + \alpha \cdot h, y_n + \beta \cdot k_1)$$

Constantele a, b, α, β , urmează a fi determinate din condiția ca (5.3.3) să reprezinte o dezvoltare în serie Taylor a funcției $y(x)$ în jurul punctului x_n , pentru $x = x_{n+1}$:

$$\begin{aligned}
y(x_{n+1}) &= y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \frac{h^3}{6} y'''(x_n) + \dots \dots = \\
&= y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} (f_x + ff_y)_n + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2ff_{xy} + f_{yy} f^2 + f_x f_y + ff_y^2)_n + \dots
\end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Cu indicele n la paranteze, am indicat că evaluarea funcției se face în (x_n, y_n) .

Pe de altă parte, folosind dezvoltarea în serie Taylor pentru funcții de două variabile, în jurul punctului (x_n, y_n) , obținem:

$$f(x_n + \alpha \cdot h, y_n + \beta \cdot k_1) = f(x_n, y_n) + \alpha \cdot hf_x + \beta \cdot k_1 f_y + \frac{\alpha^2 h^2}{2} f_{xx} + \alpha \cdot h \cdot \beta \cdot k_1 f_{xy} + \frac{\beta^2 k_1^2}{2} f_{yy} + \dots \quad (3.3.5)$$

unde toate derivatele au fost evaluate în punctul (x_n, y_n) .

În expresia (3.3.3), înlocuim parametrii k_1, k_2 folosind expresia (3.3.5):

$$y_{n+1} = y_n + (a+b)h \cdot f + b \cdot h^2 (\alpha \cdot f_x + \beta \cdot f f_y) + bh^3 \left(\frac{\alpha^2}{2} f_{xx} + \alpha \beta f_{xy} + \frac{\beta^2}{2} f^2 f_{yy} \right) + \dots \quad (3.3.6)$$

Comparând expresiile (3.3.4) cu (3.3.6) și identificând coeficienții pentru h și h^2 obținem relațiile:

$$\begin{aligned} a + b &= 1 \\ b \cdot \alpha &= b \cdot \beta = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

Sistemul (3.3.7) are mai multe soluții, fiind format din trei ecuații cu patru necunoscute. O soluție simplă și echilibrată este

$$a = b = \frac{1}{2}, \quad \alpha = \beta \quad (3.3.8)$$

Algoritmul Runge – Kutta de ordinul 2:

Pentru problema Cauchy:

$$y'(x) = f(x, y);$$

$$y(x_0) = y_0;$$

Se alege pasul de integrare h , $x_n = x_0 + n \cdot h$ și se calculează pentru $n=1, 2, 3, \dots, N$, valorile funcției $y(x_n)$:

$$k_1 = hf(x_n, y_n),$$

$$k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2.$$

Algoritmul este de "ordinul 2" pentru că în seriile Taylor se iau în considerație termenii ce conțin derivate până la ordinul 2, inclusiv.

Algoritmul Runge – Kutta de ordinul 4 este similar dar se iau în considerație termenii ce conțin derivate până la ordinul 4, inclusiv; în final, din identificarea termenilor ce conțin h, h^2, h^3, h^4 , se obțin 11 ecuații cu 13 necunoscute, deci două necunoscute se aleg arbitrar.

Algoritmul Runge – Kutta de ordinul 4:

Pentru problema Cauchy:

$$y'(x) = f(x, y);$$

$$y(x_0) = y_0;$$

Se alege pasul de integrare h , $x_n = x_0 + n \cdot h$ și se calculează pentru $n=1, 2, 3, \dots, N$, valorile funcției $y(x_n)$:

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n, y_n), \\
k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right), \\
k_3 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right), \\
k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3), \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).
\end{aligned}$$

Algoritmul Runge – Kutta devine și mai performant prin controlul adaptiv al pasului de iterație, h ; când viteza de variație a funcției $y(x)$ crește, trebuie micșorat pasul iar când funcția are o variație lentă, pasul poate fi mărit. Viteza de variație a unei funcții este dată de valoarea derivatei sale.

```

// Runge-Kutta ordin 2:
#include <stdio.h>
#include <math.h>
float f(float x, float y)
{
    return y/(y-x);
}

int main(void)
{
    float x=0.0, y=1.0, h=0.05, k1, k2 ;
    int n=0;
    printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f \n", n, x, y);

    for(n=1;n<=50;n++) {
        k1=h*f(x, y);
        k2=h*f(x+h, y+k1);
        y=y+(k1+k2)/2;
        x=x+h;
        printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f
val_ex: %8.4f\n", n, x, y, x+sqrt(x*x+1));
    }
    return 0;
}

```

```

// Runge-Kutta de ordin 4

#include <stdio.h>
#include <math.h>
float f(float x, float y)
{
    return y/(y-x);
}

```

```

int main(void)
{
float x=0.0, y=1.0, h=0.05, k1, k2, k3, k4 ;
int n=0;
printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f \n",n,x,y);

for(n=1;n<=50;n++) {
k1=h*f(x,y);
k2=h*f(x+h/2.0,y+k1/2.0);
k3=h*f(x+h/2.0,y+k2/2.0);
k4=h*f(x+h,y+k3);
y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6.0;
x=x+h;
printf("n=%3d x=%8.4f y=%8.4f
val_ex: %8.4f\n",n,x,y,x+sqrt(x*x+1));
}
return 0;
}

```

3.3.2. Desfășurarea laboratorului

1. Se va aplica algoritmul metodei Euler modificată și algoritmul metodei Runge – Kutta pentru a rezolva ecuațiile diferențiale de la punctele a)...c). La fiecare ecuație, pentru soluțiile ultimilor 4 pași, se determină eroarea procentuală față de valoarea exactă după formula:

$$procent = \left| \frac{exact - aprox}{exact} \right| \times 100.$$

a) $y' = \frac{3-4y}{2x}$, $y(1) = -4$; soluția analitică: $y(x) = \frac{3}{4} - \frac{19}{4x^2}$

b) $y' = \frac{x}{y}$, $y(2) = -1$; soluția analitică: $y(x) = -\sqrt{x^2 - 3}$

c) $y' = 2 - e^{-4x} - 2y$, $y(0) = 1$; soluția analitică: $y(x) = 1 + \frac{1}{2}e^{-4x} - \frac{1}{2}e^{-2x}$

L4. Cuadraturi gaussiene

4.1. Formula Gauss-Legendre

4.1.1. Aspecte teoretice

Calculul unei integrale cu ajutorul oricărei formule Newton-Cotes implică valori ale integrandului corespunzătoare unei rețele de puncte echidistante. Scheme de ordin diferit se deosebesc în esență prin numărul punctelor de integrare (nu prin modul lor de alegere) și prin ponderile asociate. Prin comparație, ideea de bază a metodelor de integrare gaussiene constă atât în alegerea optimă a ponderilor, cât și a nodurilor de integrare, astfel încât să rezulte formule de cuadratură cu grad de precizie maxim pe anumite clase de funcții (de exemplu, pe clasa polinoamelor algebrice). Având la dispoziție un număr dublu de grade de libertate care pot fi fixate (noduri și ponderi), se pot obține formule de cuadratură cu ordin de precizie dublu față de formulele Newton-Cotes cu același număr de termeni.

Deoarece orice integrală pe un interval finit $[a,b]$ poate fi transformată printr-o schimbare liniară de variabilă într-o integrală pe intervalul $[-1,1]$,

$$\int_a^b f(\xi) d\xi = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}\right) dx, \quad (4.1.1)$$

rezultă că formulele de cuadratură pentru intervale finite pot fi dezvoltate, fără a le reduce generalitatea, pentru intervalul standard $[-1,1]$.

Ne punem problema alegerii punctelor de integrare x_1, x_2, \dots, x_n și a ponderilor w_1, w_2, \dots, w_n astfel încât formula de cuadratură

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (4.1.2)$$

să fie *exactă* pentru toate polinoamele de grad N cât mai mare posibil. Deoarece această formulă implică $2n$ coeficienți care trebuie determinați ($w_i, x_i, i=1, 2, \dots, n$) și același număr de coeficienți caracterizează complet un polinom de grad $(2n-1)$, este evident că gradul maxim este $N = 2n-1$.

Pentru ca formula de cuadratură (4.1.2) să fie exactă pentru orice polinom de grad mai mic sau egal cu $(2n-1)$, este necesar și suficient ca ea să fie satisfăcută pentru *șirul fundamental* de funcții

$$1, x, x^2, \dots, x^{2n-1}, \quad (4.1.3)$$

adică, să aibă loc

$$\int_{-1}^1 x^k dx = \sum_{i=1}^n w_i x_i^k, \quad k = 0, 1, \dots, 2n-1. \quad (4.1.4)$$

Într-adevăr, orice polinom de grad mai mic sau egal cu $(2n-1)$ poate fi reprezentat sub forma unei combinații liniare a funcțiilor șirului fundamental (4.1.3):

$$Q(x) = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k x^k.$$

Integrând ambii membri ai acestei relații între -1 și 1 și ținând cont de formulele (4.1.4), se obține succesiv:

$$\int_{-1}^1 Q(x) dx = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \int_{-1}^1 x^k dx = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \sum_{i=1}^n w_i x_i^k = \sum_{i=1}^n w_i \sum_{k=0}^{2n-1} a_k x_i^k,$$

adică

$$\int_{-1}^1 Q(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i Q(x_i),$$

ceea ce demonstrează propoziția.

În principiu, pentru determinarea nodurilor x_i și a ponderilor w_i ale formulei de cuadratură (4.1.2), poate fi folosit sistemul neliniar (4.1.4), având ca termeni liberi integralele

$$\int_{-1}^1 x^k dx = \begin{cases} 2/(k+1) & k \text{ par} \\ 0 & k \text{ impar.} \end{cases}$$

Dacă n este mic, sistemul (4.1.4) poate fi rezolvat analitic. În schimb, pentru n mare, rezolvarea analitică prezintă dificultăți deosebite. De aceea, vom utiliza o altă cale pentru determinarea nodurilor și ponderilor formulei de cuadratură (4.1.2).

În spațiul funcțiilor de pătrat integrabil pe intervalul $[-1, 1]$, notat $L_2[-1, 1]$, polinoamele Legendre $P_n(x)$ ($n=0, 1, 2, \dots$) joacă un rol cu totul deosebit, deoarece constituie un *sistem ortogonal complet*, sau o *bază*.

Ortogonalitatea polinoamelor Legendre se exprimă prin anularea produsului scalar dintre două polinoame de ordin diferit,

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = 0, \text{ dacă } m \neq n, \quad (4.1.5)$$

iar *completitudinea* lor revine la faptul că orice funcție $f \in L_2[-1, 1]$ poate fi dezvoltată în mod unic într-o serie convergentă în raport cu ele.

În particular, orice polinom de ordinul k poate fi scris ca o combinație liniară de polinoame Legendre de ordin mai mic sau egal cu k ,

$$Q_k(x) = \sum_{m=0}^k c_m P_m(x) \quad (4.1.6)$$

Înmulțind scalar ambii membri ai acestei dezvoltări cu polinomul Legendre $P_n(x)$ de ordin $n > k$ și folosind proprietatea de ortogonalitate (4.1.5), obținem:

$$\int_{-1}^1 Q_k(x) P_n(x) dx = \sum_{m=0}^k c_m \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = 0, \quad k < n.$$

Considerând în particular $Q_k(x) \equiv x^k$, avem

$$\int_{-1}^1 x^k P_n(x) dx = 0, \quad k < n. \quad (4.1.7)$$

Pe de altă parte, fiind de ordin mai mic sau egal cu $2n-1$, integrandul $x^k P_n(x)$ satisface formula de cuadratură (4.1.2),

$$\int_{-1}^1 x^k P_n(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i x_i^k P_n(x_i) \quad (4.1.8)$$

și, comparând (4.1.7) cu (4.1.8), rezultă sistemul

$$\sum_{i=1}^n w_i x_i^k P_n(x_i) = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \quad (4.1.9)$$

Ecuatiile acestui sistem sunt satisfăcute simultan pentru valori arbitrare w_i numai dacă

$$P_n(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.1.10)$$

Prin urmare, pentru a obține precizie maximă în formulele de cuadratură (4.1.2), este suficient să considerăm ca puncte de integrare x_i cele n zerouri ale polinomului Legendre $P_n(x)$, care sunt reale și distincte și sunt situate în intervalul $(-1, 1)$.

Pentru a determina ponderile w_i asociate zerourilor x_i , punem polinomul Legendre $P_n(x)$ sub forma

$$P_n(x) = c \prod_{i=1}^n (x - x_i) \quad (4.1.11)$$

și definim polinomul de grad $(n-1)$

$$Q_{n-1}^{(k)}(x) = \frac{P_n(x)}{x - x_k} = c \prod_{i \neq k} (x - x_i), \quad (4.1.12)$$

care se anulează pentru toate zerourile lui $P_n(x)$ cu excepția lui x_k . Pe de altă parte, derivata lui $P_n(x)$ este

$$P_n'(x) = c \sum_{j=1}^n \prod_{i \neq j} (x - x_i)$$

și se observă cu ușurință că pentru $x = x_k$ are loc relația

$$Q_{n-1}^{(k)}(x_k) = P_n'(x_k), \quad (4.1.13)$$

deoarece în expresia lui $P_n'(x_k)$ se anulează toți termenii care conțin factorul $(x - x_k)$.

Formula de cuadratură (4.1.2) rămâne exactă pentru $[Q_{n-1}^{(k)}(x_k)]^p$, care este un polinom de gradul $(2n-2)$ și se deduce succesiv:

$$\int_{-1}^1 [Q_{n-1}^{(k)}(x)]^p dx = \sum_{i=1}^n w_i [Q_{n-1}^{(k)}(x)]^p = w_k [Q_{n-1}^{(k)}(x_k)]^p = w_k [P_n'(x_k)]^p, \quad (4.1.14)$$

unde s-a ținut cont că $Q_{n-1}^{(k)}(x)$ se anulează în zerourile lui $P_n(x)$ cu excepția lui x_k . Pe de altă parte, utilizând (4.1.12) și integrând prin părți, rezultă:

$$\int_{-1}^1 [Q_{n-1}^{(k)}(x)]^p dx = -\frac{P_n^2(1)}{1-x_k} - \frac{P_n^2(-1)}{1+x_k} + 2 \int_{-1}^1 Q_{n-1}^{(k)}(x) P_n'(x) dx. \quad (4.1.15)$$

Având în vedere proprietatea $P_n^2(1) = P_n^2(-1) = 1$ și faptul că $Q_{n-1}^{(k)}(x) P_n'(x)$ este un polinom de ordinul $(2n-2)$, pentru care este exactă formula de cuadratură (4.1.2), relațiile (4.1.14) și (4.1.15) conduc la

$$w_k [P_n'(x_k)]^p = -\frac{2}{1-x_k^2} + 2 \sum_{i=1}^n w_i Q_{n-1}^{(k)}(x_i) P_n'(x_i)$$

sau

$$w_k [P_n'(x_k)]^p = -\frac{2}{1-x_k^2} + 2w_k Q_{n-1}^{(k)}(x_k) P_n'(x_k).$$

Ținând cont de (4.1.13), obținem în final pentru ponderile w_i :

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2) [P_n'(x_i)]^p}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.1.16)$$

Formula de cuadratură (4.1.2), cu cele n puncte de integrare egale cu zerourile polinomului Legendre $P_n(x)$ și ponderile asociate date de relația (4.1.16), se numește *formula de cuadratură Gauss-Legendre* și este exactă pentru polinoame până la ordinul $(2n-1)$. Numele particular al acestei formule este menit să o deosebească de alte scheme din familia cuadraturilor gaussiene, construite pe baza aceluiași principii, însă pentru alte intervale de integrare și utilizând proprietățile altor sisteme de polinoame ortogonale (Cebîșev, Laguerre, Hermite etc.).

În cazul unui interval de integrare $[a, b]$ oarecare (cu a și b finite), formula de cuadratură Gauss-Legendre are forma

$$\int_a^b f(\xi) d\xi = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f(\xi_i), \quad (4.1.17)$$

unde punctele de integrare sunt definite în raport cu abscisele x_i din intervalul standard $[-1,1]$ prin

$$\xi_i = \frac{b-a}{2} x_i + \frac{b+a}{2}. \quad (4.1.18)$$

Se poate demonstra că restul corespunzător are expresia

$$R_n = \frac{(b-a)^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]. \quad (4.1.19)$$

În tabelul de mai jos sunt cuprinse câteva seturi de abscise și ponderi pentru cuadratura Gauss-Legendre. Trebuie notat faptul că pentru orice n nodurile de integrare x_i sunt distribuite simetric față de origine în interiorul intervalului $(-1,1)$, iar ponderile nodurilor simetrice sunt egale. În cazul valorilor n impare, originea însăși este punctul central de integrare ($x_{(n/2)+1} = 0$).

n	i	x_i	w_i
1	1	0	2
2	1, 2	$\pm 0,57735027$	1
3	1, 3	$\pm 0,77459667$	0,55555556
	2	0	0,88888889
4	1, 4	$\pm 0,86113631$	0,34785484
	2, 3	$\pm 0,33998104$	0,65214516
5	1, 5	$\pm 0,90617985$	0,23692688
	2, 4	$\pm 0,53846931$	0,47862868
	3	0	0,56888889

Un prim exemplu de implementare este programul de mai jos în care funcția `QGaussLeg6` este folosită pentru a calcula $\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \arctan y dy$, utilizând formula Gauss-Legendre cu 6 puncte de integrare.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define Pi 3.1415926535897932384626433832795

float func(float y)
{
    return atan(y);
}

float QGaussLeg6(float Func(float), float a, float b)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b] utilizand cuadratura Gauss-Legendre cu 6 puncte de integrare */
{
    const float x[]={0., 0.2386191861, 0.6612093865, 0.9324695142};
```



```

const float w[]={0., 0.4679139346, 0.3607615730, 0.1713244924};
float f, s, xc, xi;
int i;

f = 0.5*(b - a); xc = 0.5*(b+a);
s = 0.;

for(i = 1; i <= 3; i++)
{
    xi = f*x[i];
    s += w[i]*(Func(xc+xi)+Func(xc-xi));
}
return s *= f;
}

void main()
{
    printf("Integrala functiei arctan y pe interval [-pi/2 3pi/2] are valoarea: %.8fn",
    QGaussLeg6(func,-Pi/2, 3*Pi/2));
}

```

Datorită simetriei în raport cu intervalul $(-1,1)$, este suficient să se declare numai nodurile și ponderile pentru semi-intervalul pozitiv (primele componente, $x[0]$ și $w[0]$, nu sunt folosite). Corespunzător, abscisele din intervalul $[a,b]$ sunt generate simetric față de centrul xc al intervalului, ponderile nodurilor simetrice fiind egale.

○ utilizare mai elegantă a cuadraturilor gaussiene presupune posibilitatea determinării prin calcul direct a absciselor și ponderilor pentru formule cu număr arbitrar de termeni. Pornind de la relația de mărginire a zerourilor polinomului Legendre $P_n(x)$,

$$\cos\left(\frac{2i-1}{2n+1}\pi\right) \leq x_i \leq \cos\left(\frac{2i}{2n+1}\pi\right),$$

un procedeu simplu se bazează pe calculul iterativ al fiecărui zero cu ajutorul metodei Newton,

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \frac{P_n(x_i^{(k)})}{P_n'(x_i^{(k)})}, \quad k = 0,1,2,\dots, \quad (4.1.20)$$

pornind de la aproximația inițială

$$x_i^{(0)} = \cos\left(\frac{i-0,5}{n+0,5}\pi\right). \quad (4.1.21)$$

Odată determinate zerourile x_i , ponderile w_i rezultă imediat din formula (4.1.16).

Rutina `xGaussLeg` listată mai jos returnează, prin tablourile x și w , n abscise și ponderi pentru cuadratura Gauss-Legendre pe intervalul $[a,b]$. Această rutină apelează la rândul ei funcția Legendre care evaluează polinomul Legendre de ordin n și derivata sa în punctul x pe baza formulelor de recurență:

$$P_i(x) = \begin{cases} 1, & i = 0 \\ x, & i = 1 \\ [(2i-1)xP_{i-1}(x) - (i-1)P_{i-2}(x)]/i, & i = 2,3,\dots,n \end{cases} \quad (4.1.22)$$

$$P_n'(x) = \begin{cases} n(n+1)P_n(x)/(2x), & x = \pm 1 \\ n[xP_n(x) - P_{n-1}(x)]/(x^2-1), & x \neq \pm 1 \end{cases} \quad (4.1.23)$$

```

float Legendre(int n, float x, float *d)
/* Evalueaza polinomul Legendre de ordinul n in punctul x, returnand derivata in *d */
{
    float f, fm1, fm2;
    int i;

    if(n==0) {
        f = 1.0; *d = 0.0;
    } else {
        f = x; fm1 = 1.0;
        for (i=2; i<=n; i++) {
            fm2 = fm1; fm1 = f;
            f = ((2*i-1)*x*fm1 - (i-1)*fm2)/i;
        }
        *d = (x*x - 1.0) ? n*(x*f - fm1)/(x*x - 1.0) : 0.5*n*(n+1)*f/x;
    }
    return f;
}

void XGaussLeg(float a, float b, float x[], float w[], int n)
/* Calculeaza abscise si ponderi pentru formula de cuadratura Gauss-Legendre
a,b - limitele domeniului de integrare
w[] - tabloul ponderilor
x[] - tabloul absciselor
n - numarul punctelor de integrare */
{
    const float pi = acos(-1.0); //constanta pi
    const float eps = 1e-6; //criteriu relativ de precizie
    float d, f, xc, z;
    int i;

    for(i = 1; i <= (n/2); i++) {
        z = cos(pi*(i-0.5)/(n+0.5)); //aproximatie initiala pentru zero
        do { //rafinare cu metoda Newton
            f = Legendre(n,z,&d) / d;
            z -= f;
        } while (fabs(f) > eps*fabs(z));
        x[i] = -z; x[n-i+1] = z; //zerouri simetrice
        w[i] = w[n-i+1] = 2.0/((1.0 - z*z)*d*d); //ponderi
    }

    if((n/2)*2 != n) { //numar de puncte impar
        Legendre(n,0.0,&d);
        x[n/2+1] = 0.0;
        w[n/2+1] = 2.0/(d*d);
    }

    f = 0.5*(b-a); xc = 0.5*(b+a); //scalare la intervalul [a,b]
    for(i=1; i<=n; i++) {
        x[i] = f*x[i] + xc;
        w[i] = f*w[i];
    }
}

```

Prin procedeul descris mai sus sunt determinate efectiv numai cele $n/2$ zerouri și ponderi corespunzătoare semi-intervalului $(0,1)$, restul fiind completate în tablourile x și w prin simetrizare. Cazul numărului de puncte n impar este tratat separat, funcția Legendre fiind apelată numai pentru calculul derivatei d . În finalul rutinei, abscisele și ponderile corespunzătoare intervalului standard $[-1,1]$ sunt scalate pentru intervalul $[a,b]$.

Programul de mai jos exemplifică utilizarea rutinei XGaussLeg pentru a calcula $\int_{-\frac{3\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \arctan y dy$, utilizând formula Gauss-Legendre cu n puncte de integrare. Programul afișează valoarea integralei calculată atât numeric cât și prin înlocuire în expresia analitică rezultată prin calcul matematic.

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define Pi 3.1415926535897932384626433832795

float func(float y)
{
    return atan(y);
}

float analitic(float u)
{
    return u*atan(u) - 1.0/(2.0*log(1.0+u*u));
}

float QGaussLeg(float Func(float), float a, float b, int n)
/* Calculeaza integrala functiei Func pe intervalul [a,b] utilizand cuadratura Gauss-Legendre cu n puncte de integrare */
{
    float s, *x, *w;
    int i;

    x = (float*) malloc(n*sizeof(float)); x--;
    w = (float*) malloc(n*sizeof(float)); w--;
    XGaussLeg(a,b,x,w,n);

    s = 0.0;
    for(i = 1; i <= n; i++) s += w[i]*Func(x[i]);

    free(x+1); free(w+1);
    return s;
}

void main()
{
    printf("Integrala functiei arctan y pe intervalul [-Pi/2, 3Pi/2] are valoarea:\n\t calcul numeric: %.8f\n\t calcul matematic: %.8f\n", QGaussLeg(func,-Pi/2, 3*Pi/2,5), analitic(3*Pi/2) - analitic(-Pi/2));
}
```

4.1.2. Desfășurarea laboratorului

Se va utiliza formula Gauss-Legendre cu 5, 10 apoi 25 puncte de integrare pentru a calcula valoarea integralelor de la punctele a)...e). Se va alcătui un tabel comparativ cu diferențele procentuale între valoarea exactă (calcul matematic) și cea aproximativă (calcul numeric) a integralelor în fiecare dintre cele trei situații. Procentele se determină utilizând formula:

$$procent = \left| \frac{exact - aprox}{exact} \right| \times 100.$$

a) $\int_2^7 \frac{1}{x} dx = \ln|x| \Big|_2^7$

$$\text{b) } \int_{-1}^1 x^{10} dx = \frac{x^{11}}{11} \Big|_{-1}^1$$

$$\text{c) } \int_{-5}^0 e^x dx = e^x \Big|_{-5}^0$$

$$\text{d) } \int_0^{\pi} \sin x dx = -\cos x \Big|_0^{\pi}$$

$$\text{e) } \int_{\frac{x}{2}}^{\frac{3x}{2}} \arctan x dx = x \arctan x - \frac{1}{2 \ln(1+x^2)} \Big|_{\frac{x}{2}}^{\frac{3x}{2}}$$