Laborator-Seminar IV

Calcul Numeric

UTCN

2020

Interpolare Polinomială

Fie $n + 1$ perechi de puncte (x_i, y_i), $i = 0, 1, \ldots, n$, unde x_i sunt distincte și se numesc *noduri*. Problema *interpolării polinomiale* constă în a determina un polinom de grad n, notat Π_n, care verifică:

$$\Pi_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

În cazul în care avem o funcție f pentru care cunoaștem doar valorile $(x_i, f(x_i))$, $\quad i = 0, 1 \ldots, n$, problema interpolării constă în a determina un polinom de grad, n notat cu $\Pi_n f$, care verifică:

$$\Pi_n f(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Interpolare Polinomială

Polinomul Π_n este definit prin

$$\Pi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \varphi_k(x) y_k$$

unde φ_k se numesc *polinoame fundamentale Lagrange*

$$\varphi_k(x) = \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

Polinomul Π_n se numește *polinomul de interpolare Lagrange*

$$\varphi_k(x_i) = \delta_{ik}$$

Interpolare Polinomială

Introducând notația:

$$w_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)$$

deducem că

$$\varphi_k(x) = \frac{w_{n+1}(x)}{(x - x_k) w'_{n+1}(x_k)}$$

iar polinomul de interpolare se poate scrie sub forma

$$\Pi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{w_{n+1}(x)}{(x - x_k) w'_{n+1}(x_k)} y_k$$

w_{n+1} se numește *polinomul nodal* de grad $n + 1$

Efortul computațional

Pentru calculul lui $\varphi_k(x)$ avem

- $2n$ scăderi
- $2(n-1)$ înmulțiri
- 1 împărțire

În total vor fi $4n-1$ operații. Având $n+1$ polinoame fundamentale, vor fi $4n^2+3n-1$ operații. Pentru calculul lui Π_n se adaugă n adunări și $n+1$ înmulțiri și vom avea $4n^2+5n$ operații, *i.e.* $O(4n^2)$. Depind de punctul x!. La adăugarea unui nod: pentru modificarea fiecărui polinom φ_k avem nevoie de 4 operații (2 scăderi, o împărțire și o înmulțire), plus calculul lui φ_{n+1} ($4n+3$ operații) și adăugarea termenului $\varphi_{n+1}(x)y_{n+1}$. În total vom avea nevoie de încă $8n+9$ operații.

Eroarea de interpolare

Fie I un interval mărginit care conține cele $n+1$ noduri de interpolare $\{x_i | i = 0, 1, \ldots, n\}$. De asemenea, fie f o funție derivabilă până la ordinul $n+1$ cu derivatele continue în I. Atunci $\forall\, x \in I\ \exists\, \xi_x \in I$ a.î.

$$E_n f(x) = f(x) - \Pi_n f(x) = \frac{f^{n+1}(\xi_x)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)$$

Mai mult,

$$E_n f(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

Dezavantaje pentru noduri echidistante

Dacă avem o distribuție uniformă a nodurilor, *i.e.* $x_i = x_{i-1} + h$, $i = 1, 2, \ldots, n$ atunci

$$|w_{n+1}(x)| = \left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right| \leq n! \frac{h^{n+1}}{4}$$

$$\max_{x \in I} |E_n f(x)| \leq \frac{\max_{x \in I} |f^{(n+1)}(x)|}{4(n+1)} h^{n+1}$$

Nu se poate deduce că eroarea tinde la 0 când $n \to \infty$, în ciuda faptului că $\frac{h^{n+1}}{4(n+1)}$ tinde la 0.

Efectul Runge

Există funcții f pentru care avem

$$\lim_{n\to\infty} \max_{x\in I} |E_n f(x)| = \infty$$

$$f : [-5, 5] \to \mathbb{R}, \quad f(x) = \frac{1}{1 + x^2}$$

Pentru derivată avem:

$$\max_{x\in I} |f'(x) - (\Pi_n f)'(x)| \leq Ch^n \max_{x\in I} |f^{(n+1)}(x)|$$

Stabilitatea polinomului de interpolare

Se consideră valorile exacte $f(x_i)$ și valorile perturbate $\hat{f}(x_i)$. Notăm cu $\Pi_n f$ și $\Pi_n \hat{f}$ cele două polinoame de interpolare. Avem

$$\begin{aligned}\max_{x\in I}|\Pi_n f(x) - \Pi_n \hat{f}(x)| &= \max_{x\in I}\left|\sum_{i=0}^{n}(f(x_i) - \hat{f}(x_i))\varphi_i(x)\right| \\ &\leq \Lambda_n(x) \max_{0\leq i\leq n}|f(x_i) - \hat{f}(x_i)|\end{aligned}$$

unde

$$\Lambda_n(x) = \max_{x\in I}\sum_{i=0}^{n}|\varphi_i(x)|$$

se numește *constanta Lebesgue* (depinde de nodurile de interpolare)

Stabilitatea polinoamelor de interpolare

Pentru noduri echidistante

$$\Lambda_n(x) \approx \frac{2^{n+1}}{en(\ln n + \gamma)}$$

$e = 2.71834$, $\gamma = 0.547721$

$$f(x) = \sin(2\pi x), \quad f : [-1, 1] \to \mathbb{R}$$

$$\Lambda_{21}(x) \approx 20454$$

$$\max_{i=0,\dots,22} |f(x_i) - \hat{f}(x_i)| \approx 9.5 \cdot 10^{-4}$$

$$\max_{i \in I} |\Pi_{21} f(x) - \Pi_{21} \hat{f}(x)| \approx 3.1342$$

Noduri Cebîșev

În intervalul $[a, b]$ definim nodurile x_k, $k = 0, \ldots, n$
Noduri *Cebîșev-Gauss-Lobatto*

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos(\frac{k\pi}{n})$$

$$\Lambda_n(x) < \frac{2}{\pi}(\ln n + \gamma + \ln \frac{8}{\pi}) + \frac{\pi}{72n^2}$$

$$\Lambda_{21}(x) \approx 2.9008$$

$$\max_{i \in I} |\Pi_{21} f(x) - \Pi_{21} \hat{f}(x)| \approx 1.0977 \cdot 10^{-3}$$

Noduri Cebîșev

Noduri *Cebîșev-Gauss*

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\left(\frac{2k+1}{n+1}\frac{\pi}{2}\right)$$

$$\Lambda_n(x) < \frac{2}{\pi}\left(\ln(n+1) + \gamma + \ln\frac{8}{\pi}\right) + \frac{\pi}{72(n+1)^2}$$

$$\Lambda_{21}(x) \approx 2.9304$$

$$\max_{i \in I} |\Pi_{21} f(x) - \Pi_{21} \hat{f}(x)| \approx 1.1052 \cdot 10^{-3}$$

Scrierea Baricentrică

$$\sum_{k=0}^{n} \varphi_k(x) = 1, \quad \forall\, x$$

Se consideră *ponderile* pentru $k = 0, 1, \ldots, n$:

$$w_k = \Bigg(\prod_{j=0, j\neq k}^{n} (x_k - x_j) \Bigg)^{-1} = \frac{1}{\displaystyle\prod_{j=0, j\neq k}^{n} (x_k - x_j)}$$

Polinoamele fundamentale se vor scrie sub forma

$$\varphi_k(x) = w_{n+1}(x) \frac{w_k}{x - x_k}$$

Forma *îmbunătățită* a polinomului Lagrange

$$\Pi_n(x) = w_{n+1}(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k} y_k$$

Scrierea Baricentrică

Efortul computațional pentru calculul fiecărei valori w_k

- n scăderi
- $(n-1)$ înmulțiri
- 1 împărțire

În total, vom aveam $2n$ operații. Fiind $n+1$ valori vom obține $2n^2+2n$ operații. Aceste cantități nu depind de x! (se pot calcula o singură dată-analog factorizării LU). Pentru calculul lui w_{n+1} este nevoie de n scăderi și $n-1$ înmulțiri, *i.e* $2n-1$ operații. În final, se vor adăuga $n+2$ înmulțiri și $n+1$ împărțiri. TOTAL: $2n^2+6n+3$, *i.e.* $O(2n^2)$.

Scrierea Baricentrică

Actualizarea cu o nouă pereche (x_{n+1}, y_{n+1}).

- Împărțirea fiecărei valori w_k, $k = 0, 1, \ldots, n$, cu $x_k - x_{n+1}$ ($2n + 2$ operații)
- Calcularea lui w_{n+1} ($2n + 2$ operații)
- Plus încă 5 operații. În total: $4n + 9$ operații, *i.e.* $O(4n)$

O formă baricentrică *elegantă*

$$\sum_{k=0}^{n} \varphi_k(x) = 1 \Rightarrow w_{n+1}(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k} = 1$$

$$\Pi_n(x) = \frac{w_{n+1}(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k} y_k}{w_{n+1}(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k}}$$

$$\Pi_n(x) = \frac{\sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k} y_k}{\sum_{k=0}^{n} \frac{w_k}{x - x_k}}$$

O formă baricentrică *elegantă*

Efortul computațional

- Pentru calcularea cantităților $\frac{w_k}{x-x_k}$ este nevoie de $2n^2+3n+1$ operații
- Se adaugă $n+1$ înmulțiri, $2n$ adunări și o împărțire. TOTAL: $2n^2+6n+2$, *i.e.* $O(2n^2)$

Fiecare factor comun pentru ponderile w_k va fi *simplificat*.

O formă baricentrică *elegantă*

Pentru intervalul $[-1, 1]$ considerăm noduri echidistante, *i.e.* $x_{k+1} - x_k = \frac{2}{h}$. Atunci

$$w_k = (-1)^{n-k} \frac{C_n^k}{h^n n!}$$

În calcularea polinomului factorii independenți de k se vor simplifica și obținem

$$w_k = (-1)^k C_n^k$$

Pentru intervalul $[a, b]$ va trebui înmulțit cu $\frac{2^n}{(b-a)^n}$, dar acest factor se va simplifica

O formă baricentrică *elegantă*

Pentru noduri Cebîșev -Gauus avem

$$w_k = (-1)^k \sin(\frac{(2k+1)\pi}{2n+2})$$

Pentru noduri Cebîșev-Gauss-Lobatto acvem

$$w_k = (-1)^k \begin{cases} \frac{1}{2}, & k \in \{0, n\} \\ 1, & k \notin \{0, 1\} \end{cases}$$

Forma Newton a polinomului de interpolare Lagrange

$$\Pi_n : (x_i, y_i),\ i = 0, 1, \ldots, n$$

$$\Pi_{n-1} : (x_i, y_i),\ i = 0, 1, \ldots, n-1$$

$$\Pi_n(x) = \Pi_{n-1}(x) + q_n(x)$$

unde $q_n \in \mathbb{P}_n$.

$$q_n(x_i) = \Pi_n(x_i) - \Pi_{n-1}(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n-1$$

$$q_n(x) = a_n w_n(x)$$

Forma Newton a polinomului de interpolare Lagrange

Diferența divizată Newton de ordin n

$$a_n = \frac{f(x_n) - \Pi_{n-1} f(x_n)}{w_n(x_n)} = f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

$$\Pi_n(x) = \Pi_{n-1}(x) + w_n(x) f[x_0, x_1, \ldots, x_n],$$

unde $f[x_0] = y_0 = f(x_0)$ și $w_0 = 1$.

$$\Pi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} w_k(x) f[x_0, x_1, \ldots, x_k]$$

Proprietăți ale diferențelor divizate

- $f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \sum_{k=0}^{n} \frac{f(x_k)}{w'_{n+1}(x)}$
- sunt invariante față de permutarea nodurilor
- Dacă $f = \alpha g + \beta h$ atunci

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \alpha g[x_0, x_1, \ldots] + \beta g[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

- Avem *formula de recurență*

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{f[x_1, \ldots, x_n] - f[x_0, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}, \quad n \geq 1$$

Tabelul diferențelor divizate

$$
\begin{array}{cccccc}
x_0 & f[x_0] & f[x_0,x_1] & f[x_0,x_1,x_2] & \dots & f[x_0,\dots,x_n] \\
x_1 & f[x_1] & f[x_1,x_2] & f[x_1,x_2,x_3] & & \\
x_2 & f[x_2] & f[x_2,x_3] & f[x_2,x_3,x_4] & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\
x_{n-2} & f[x_{n-2}] & f[x_{n-2},x_{n-1}] & f[x_{n-2},x_{n-1},x_n] & & \\
x_{n-1} & f[x_{n-1}] & f[x_{n-1},x_n] & & & \\
x_n & f[x_n] & & & &
\end{array}
$$

Efortul computațional pentru *forma Newton*

Efortul computațional pentru calcularea matricei constă în $n(n+1)$ scăderi și $\frac{n(n+1)}{2}$ împărțiri, în total fiind $\frac{3}{2}n^2 + \frac{3}{2}n$, *i.e.* $O(\frac{3}{2}n^2)$. Pentru calcularea cantităților $w_k(x)$ avem nevoie de n scăderi și $n-1$ înmulțiri, *i.e.* $2n-1$ operații. În final, pentru calcularea lui Π_n se mai adaugă n înmulțiri și n adunări. În total, pentru forma Newton a polinomului Lagrange vom avea nevoie de $\frac{3}{2}n^2 + \frac{11}{2}n - 1$ operații, *i.e.* $O(\frac{3}{2}n^2)$
Elementele din matrice depind de funcția f, dar nu depind de punctul x! (comparăm cu metoda baricentrică!)

Adăugarea unui nod nou în forma Newton

Se calculează în matrice $f[x_n, x_{n+1}], \ldots, f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$ și se aduaugă la polinomul Π_n termenul $w_{n+1}(x) f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$. Este nevoie de $n + 1$ împărțiri și $2(n + 1)$ scăderi. Plus încă 3 operații (2 înmulțiri și o adunare). În total $3n + 6$ operații, *i.e.* $O(3n)$.

Forma Newton conduce la metode *elegante* de *încorporare* a informațiilor despre derivatele $f^{(p)}(x_j)$ (în cazul interpolării Hermite)

Interpolare liniară pe porțiuni

Pentru distribuția neuniformă de noduri $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ notăm cu I_k intervalul $[x_k, x_{k+1}]$. $H = \max\{|I_k|, k = 0, 1, \ldots, n\}$
Se aproximează funcția f printr-o funcție continuă, care pe fiecare interval I_k este definită de segementul determinat de punctele $(x_k, f(x_k))$ și $(x_{k+1}, f(x_{k+1}))$.

$$\Pi_1^H f(x) = f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) \quad x \in I_i.$$

$$\max_{x\in[x_0,x_n]} |f(x) - \Pi_1^H f(x)| \leq \frac{H^2}{8} \max_{x\in[x_0,x_n]} |f''(x)|$$

Probleme cu valori inițiale (IVP, Probleme Cauchy)

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \quad x \in [x_0, x_0 + T], \quad T > 0 \\ y(x_0) = Y_0 \end{cases}$$

Ex. 1

$$y' = -\lambda y$$

$$\frac{y'}{y} = -\lambda y \Leftrightarrow \ln y = -\lambda x + \mathcal{C} \Leftrightarrow y(x) = \mathcal{C} e^{-\lambda x}$$

Ex. 2

$$y' = 2 - e^{-4x} - 2y$$

$$y(x) = 1 + \frac{1}{2} e^{-4x} - \frac{1}{2} e^{-2x} + \mathcal{C}$$

Probleme Cauchy

Se consideră următoarea discretizare a intervalului $[x_0, X_0 + T]$

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{N-1} < x_N = x_0 + T$$

Notăm cu y_i, $i = 0, \ldots, N$ aproximațiile pentru valorile $y(x_i)$, *i.e.*

$$y(x_i) \approx y_i$$

Evident $y_0 = y(x_0) = Y_0$ și derivata va fi aproximată prin

$$y'(x_i) \approx f(x_i, y_i)$$

Presupunem că nodurile sunt echidistante, *i.e.* $x_{i+1} - x_i = h$

Metoda Euler explicită

$$y'(x_{n+1}) \approx \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{x_{n+1} - x_n}$$

$$\begin{aligned} & y(x_n) \approx y_n \\ & y'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) \approx f(x_n, y_n) \end{aligned}$$

Metoda Euler explicită (progresivă): $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$

Metoda Euler *modificată* (metoda Runge)

Aproximarea derivatei în x_n și a funcției în $x_n + \frac{h}{2}$

$$y'(x_n) \approx k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$y(x_n + \frac{h}{2}) \approx y_n + \frac{h}{2}k_1 \text{ (Euler explicit)}$$

Aproximarea derivatei în $x_n + \frac{h}{2}$

$$y'(x_n + \frac{h}{2}) \approx k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1)$$

Metoda Euler *modificată* (se folosește panta tangentei din $x_n + \frac{h}{2}$)

$$y_{n+1} = y_n + hk_2$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}f(x_n, y_n))$$

Metoda Euler *îmbunătățită* (Heun)

Aproximarea derivatei în x_n și a funcției în x_{n+1}

$$y'(x_n) \approx k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$y(x_{n+1}) \approx y_n + hk_1 \text{ (Euler explicit)}$$

Aproximarea derivatei în x_{n+1}

$$y'(x_{n+1}) \approx k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1)$$

Metoda Euler îmbunătățită (se folosește media aritmetică a pantelor din x_n și x_{n+1})

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

Metode Runge-Kutta explicite

$$\begin{cases} k_1 = f(x_n, y_n) = f(x_n + c_1 h, y_n), \quad c_1 = 0 \\ k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) \\ k_3 = f(x_n + c_3 h, y_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)) \\ \ldots \qquad \ldots \qquad \ldots \\ k_s = f(x_n + c_s h, y_n + h(a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \ldots + a_{ss-1} k_{s-1})) \end{cases}$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \ldots + b_s k_s)$$

$$c = [c_1, c_2, \ldots, c_s]^T, b = [b_1, b_2, \ldots, b_s]^T, A = (a_{ij})$$

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

$$
\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_s
\end{array}
$$

Matricea A este o matrice strict triunghiulară inferior $a_{ij} = 0$, $j \geq i$. În cazul când matricea nu este triunghiulară inferior avem metode Runge-Kutta implicite.

Cazuri particulare de metode Runge-Kutta explicite

- Metoda Euler

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array} \qquad \begin{cases} k_1 = f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + hk_1 \end{cases}$$

- Metoda Euler *modificată*

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array} \qquad \begin{cases} k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ y_{n+1} = y_n + hk_2 \end{cases}$$

- Metoda Euler *îmbunătățită*

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \qquad \begin{cases} k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}hk_1 + \frac{1}{2}hk_2 \end{cases}$$