

INTEGRARE ȘI DERIVARE NUMERICĂ

Ne propunem în acest capitol să calculăm în mod aproximativ valorile

$$\begin{aligned} I[f] &= \int_a^b f(x) dx, \\ D[f] &= f^{(p)}(x_0). \end{aligned}$$

în condițiile în care

- funcția f este continuă pe $[a, b] : f \in C([a, b])$ și derivabilă în x_0
- primitiva F nu este cunoscută
- funcția f este cunoscută numai prin valorile $f(x_i)$ pe care le ia într-un număr restrîns de puncte $x_i, i=0 : N$

Definim o metodă aproximativă de integrare ca

$$I_N[f] = \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}),$$

Metoda aproximativă de integrare este *slab convergentă* dacă

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |I[f] - I_N[f]| = 0.$$

În mod similar se definește o metodă aproximativă de derivare.

Teorema 7.1. *Condiția necesară și suficientă ca metoda de integrare $I_N[f]$ să convergă slab către $I[f]$ se exprimă prin relațiile*

a) există $M > 0$ astfel încât $\sum_{i=1}^N |a_{iN}| \leq M$, pentru toți $N=1, 2, \dots$

b) $\lim_{N \rightarrow \infty} I_N(x^k) = \int_a^b x^k dx$, pentru toți $k=0, 1, \dots$

1. Metode de tip Newton-Cotes

În general, pentru o formulă de integrare aproximativă putem scrie

$$\int_a^b f(x) \cdot w(x) dx = \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}) + R_N.$$

funcția pondere $w: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^+$, nu modifică problema (1), întrucât putem lua $g(x) = f(x) \cdot w(x)$, iar R_N este eroarea (sau restul) formulei aproximative de integrare.

Metodele de tip *Newton-Cotes* se bazează pe integrarea polinomului de interpolare, utilizând ca suport al interpolării nodurile x_{iN} echidistante în intervalul $[a, b]$, adică

$$x_{iN} = a + i \cdot \frac{b-a}{N}, \quad i = 0 : N.$$

Metodele de integrare de tip *Fejer* integrează polinomul de interpolare folosind ca noduri x_{iN} - rădăcinile polinomului ortogonal $P_n(x)$, definit relativ la ponderea $w(x)$.

Coeficienții a_{iN} se determină impunând ca formula aproximativă să fie exactă ($R=0$), dacă f aparține unei anumite clase de funcții (de exemplu polinoame de grad $\leq N$, $f \in \Pi_N$).

Cum funcția este cunoscută numai în nodurile $x_i, i=1:N$, o vom aproxima prin polinomul ei de interpolare Lagrange

$$f(x) \cong P_{N-1}(x) = \sum_{i=1}^N l_i(x) \cdot f(x_{iN}),$$

cu care putem scrie

$$\int_a^b P_{N-1}(x) \cdot w(x) dx = \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}),$$

sau

$$\begin{aligned} \int_a^b P_{N-1}(x) \cdot w(x) dx &= \int_a^b \sum_{i=1}^N l_{iN}(x) f(x_{iN}) w(x) dx = \\ \sum_{i=1}^N f(x_{iN}) \cdot \int_a^b l_{iN}(x) \cdot w(x) dx &= \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}), \end{aligned}$$

de unde

$$A_{iN} = \int_a^b l_{iN}(x) \cdot w(x) dx.$$

Printr-o schimbare liniară de variabilă, coeficienții A_{iN} pot fi făcuți independenți de intervalul de integrare; ei sunt totuși inutilizabili, fiind de valori mari și de semne contrarii, ceea ce conduce la instabilitate numerică.

Expresia erorii în metodele de tip Newton-Cotes se deduce integrând expresia erorii din polinomul de interpolare.

$$f(x) = P_{N-1}(x) + E_{N-1}(x),$$

obținându-se

$$\int_a^b f(x) \cdot w(x) dx = \int_a^b P_{N-1}(x) \cdot w(x) dx + \int_a^b E_{N-1}(x) w(x) dx,$$

deci

$$R_{N-1} = \frac{f^{(N)}(\xi)}{(N)!} \cdot \int_a^b (x - x_1) K(x - x_N) \cdot w(x) dx, \quad \xi \in [a, b],$$

cu majorarea

$$R_{N-1} \leq \frac{f^{(N)}(\xi)}{(N)!} \int_a^b |(x - x_1) K(x - x_N)| \cdot w(x) dx.$$

Datorită instabilității interpolării polinomiale se folosesc polinoame de interpolare cu grad mic. Astfel pentru $N=1$ se obține *formula trapezelor*

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} \cdot [f(a) + f(b)] - \frac{h^3 f''(\xi)}{12}.$$

în care $h = \frac{b-a}{N} = b-a$ și $\xi \in [a, b]$

Pentru $N=2$ se obține *formula lui Simpson*

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \cdot \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90}.$$

Aceste formule folosesc puține puncte ceea ce ne determină să aproximăm funcția f , local, pe intervale

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + K + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx,$$

Se obțin în acest fel

- *formula compusă a trapezelor*

$$T = \frac{h}{2} \cdot \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(a + ih) \right].$$

$$\text{cu } h = \frac{b - a}{N}.$$

```
function I = Trapez(a, b, n, f)
% Intrări:
% a, b = capetele intervalului de integrare
% n = ordinul metodei
% f = funcția de integrat
% Ieșiri: valoarea integrala definita
h = (b-a) / n;
s = 0;
for i = 1 : n-1
    s = s + f(a+i*h);
end
I = h*(f(a) + f(b) + 2*s) / 2;
```

- formula compusă Simpson

$$s = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=1}^N f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_{2i}) \right].$$

$$\text{cu } h = \frac{b - a}{2N}, \quad x_i = a + i \cdot h, \quad i = 0 : 2N$$

```
function I= Simpson(n, a, b, f)
/* Intrări:
/* a,b = capete interval de integrare
/* n = ordinul metodei
/* f = funcția de integrat
/* Ieșiri: valoarea integralei definite
h=(b-a) / (2*n);
s1 = 0;
s2 = 0;
for i = 1 : n
    s1 = s1 + f(a+(2*i-1)*h);
end
for i = 1 : n-1
    s2 = s2 + f(a+2*i*h);
end
I = h*(f(a) + f(b) + 4*s1 + 2*s2)/3;
```

7.2. Formule de integrare bazate pe integrarea prin părți Metoda lui Euler

Metodele din această categorie sunt aplicabile, dacă se cunosc informații privind derivatele funcției de integrat $f(x)$ la capetele intervalului de integrare.

Considerăm funcția $f(x)$ continuă, împreună cu derivatele până la ordinul r inclusiv ($f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^r([a, b])$) și polinomul monic de grad $\leq r$, $P_r(x) \in \Pi_r$.

Întrucât $P_r(x)$ este monic, avem evident $P_r^{(r)}(x) = r!$ și putem scrie

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \frac{1}{r!} \cdot \int_a^b P_r^{(r)}(x) \cdot f(x) dx$$

Integrăm prin părți de r ori

$$I(f) = \frac{1}{r!} \sum_{k=1}^r (-1)^{k-1} P_x^{(r-k)}(x) f^{(k-1)}(x) \Big|_a^b + \frac{(-1)^r}{r!} \int_a^b P_x^{(r)}(x) f(x) dx$$

Considerăm dezvoltarea în serie

$$\frac{t \cdot e^{tx}}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n(x)}{n!} \cdot t^n$$

relație scrisă și sub forma

$$(e^t - 1) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{B_n(x)}{n!} \cdot t^n \right] = t \cdot e^{tx}, \text{ în care exponențialele se dezvoltă de asemenea în}$$

serie Taylor

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n t^{n+1}}{n!} = \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \right] \cdot \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n(x)}{n!} \cdot t^n \right]$$

Identificând termenii din cei doi membri obținem

$$B_0(x) = 1, \quad \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \cdot B_{n-k}(x) = n \cdot x^{n-1},$$

relație care ne arată că $B_n(x)$ este un polinom de grad n numit *polinomul lui Bernoulli*.

Folosind relația cu $n=1, 2, \dots$ obținem

$$B_1(x) = x - \frac{1}{2}, \quad B_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}, \quad B_3(x) = x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{x}{2}, \dots$$

Se obțin relativ ușor relațiile

$$\begin{aligned} B_n(x+1) - B_n(x) &= n \cdot x^{n-1} \\ B'_n(x) &= n \cdot B_{n-1}(x), \quad n=1, 2, \dots \\ B_n(1-x) &= (-1)^n B_n(x) \\ \int_0^1 B_n(x) dx &= 0 \end{aligned}$$

Numerele lui Bernoulli se definesc ca

$$B_n = B_n(0)$$

Dacă se notează

$$C_n = \frac{B_n}{n!}$$

particularizăm relația de recurență pentru $x=0$

$$\binom{n+1}{1} \cdot C_n + \binom{n+1}{2} \cdot C_{n-1} + K + \binom{n+1}{n} \cdot C_1 + 1 = 0,$$

din care se determină, luând pe rând $n=1, 2, \dots$ valorile

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{1}{2}, \quad C_2 = \frac{1}{6}, \quad K \text{ și} \\ B_{2n+1} &= 0 \end{aligned}$$

Particularizăm relația pentru $r = 2n$, $P_x(x) = \frac{B_{2n}(x)}{(2n)!}$ și facem schimbarea de variabilă

$$x=a+t \cdot h \text{ cu } h=b-a$$

obținem

$$I_n(f) = \frac{h[f(a) + f(b)]}{2} - \sum_{k=1}^{n-1} h^{2k} B_{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)]$$

$$R(f) = -h^{2n+1} B_{2n} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

Pentru obținerea unei formule compuse, împărțim intervalul (a, b) cu $N-1$ puncte echidistante

$$x_i = a + i \cdot \frac{b-a}{N}$$

și aplicăm formula de mai sus în fiecare subinterval. Obținem în final o relație cunoscută sub numele de *formula lui Euler*

$$I_n(f) = h \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} f(a + ih) \right] - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h^{2k} B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)]$$

3. Integrare gaussiană

Vom indexa nodurile de la 1, x_{iN} , $i=1:n$ este justificată, deoarece prezența a n noduri impune un grad al polinomului de interpolare egal cu $n-1$. În cazul integrării gaussiene, același suport reprezintă cele n rădăcini ale unui polinom ortogonal de grad n . Așadar, pentru calculul unei integrale de forma

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

cu $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}^+$, o funcție continuă pe intervalul finit sau infinit (a, b) , vom folosi o metodă de integrare numerică de forma

$$I_{N-1}[f] = \sum_{i=1}^N a_{iN} f(x_{iN})$$

În plus se impun condițiile

$$\int_a^b x^k w(x) dx, \quad k = 0, 1, K \text{ să fie absolut convergente}$$

$$\int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx < \infty$$

Metodele de tip Newton-Cotes (pentru suportul x_{1N}, K, x_{NN}) au *gradul de valabilitate* $N-1$ (sunt exacte pentru polinoame până la gradul $N-1$ inclusiv).

Ne punem problema determinării unor metode aproximative de integrare cu grad de valabilitate mai ridicat, pe seama alegerii corespunzătoare a nodurilor x_{iN} .

Determinarea celor $2N$ necunoscute a_{iN} și x_{iN} cu $i=1:N$, necesită $2N$ ecuații. Formula este, prin urmare exactă pentru polinoame de la grad 0 până la $2N-1$.

$$I[P] = I_N[P], \quad P \in \Pi_{2N-1}$$

Sistemul format, considerând polinoamele $P = 1, x, K, x^{2N-1}$ este

$$\sum_{i=1}^N A_{iN} = \int_a^b w(x) dx,$$

$$\sum_{i=1}^N A_{iN} x_{iN} = \int_a^b x \cdot w(x) dx,$$

$$\sum_{i=1}^N A_{iN} x_{iN}^{2N-1} = \int_a^b x^{2N-1} w(x) dx.$$

fiind nelinier în raport cu x_{iN} , și nu poate fi rezolvat ușor în mod direct.

Pentru obținerea nodurilor x_{iN} , $i=1:N$, Gauss a folosit metoda prezentată în cele ce urmează. Seconsideră polinomul

$$\pi_N(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{1N}) K(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{NN}),$$

Orice polinom $P_{N+q-1}(\mathbf{x})$ de grad $N + q - 1 \leq 2N$ se poate exprima sub forma

$$P_{N+q-1}(\mathbf{x}) = \pi_N(\mathbf{x}) \cdot Q_{q-1}(\mathbf{x}) + R_{N-1}(\mathbf{x}),$$

pe baza teoremei împărțirii cu rest.

Dorim ca formula aproximativă de integrare să aibă grad de valabilitate $> N-1$, adică să fie exactă pentru polinoamele $P_{N+q-1}(\mathbf{x})$, ceea ce implică

$$\int_a^b P_{N+q-1}(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N A_{iN} P_{N+q-1}(\mathbf{x}_{iN}),$$

dar:

$$P_{N+q-1}(\mathbf{x}_{iN}) = R_{N-1}(\mathbf{x}_{iN}),$$

sau

$$\int_a^b P_{N+q-1}(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N A_{iN} R_{N-1}(\mathbf{x}_{iN}).$$

Pe de altă parte

$$\int_a^b P_{N+q-1}(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_a^b \pi_N(\mathbf{x}) Q_{q-1}(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_a^b R_{N-1}(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

dar formula are cel puțin gradul de valabilitate $N-1$, adică

$$\int_a^b R_{N-1}(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N A_{iN} R_{N-1}(\mathbf{x}_{iN}),$$

de unde

$$\int_a^b \pi_N(\mathbf{x}) \cdot Q_{q-1}(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0.$$

Relația arată că $\pi_N(\mathbf{x})$ este ortogonal cu orice polinom de grad $< N$. Se știe că, în raport cu o funcție pondere $w(\mathbf{x})$ definită pe un interval (a, b) , există un polinom ortogonal unic; așadar $\pi_N(\mathbf{x})$ este acest polinom ortogonal.

În concluzie, nodurile $\mathbf{x}_{iN}$ (*abscisele Gauss*) sunt rădăcinile polinomului ortogonal, definit în mod unic în raport cu funcția pondere $w(\mathbf{x})$.

Coeficienții A_{iN} se vor determina apoi, rezolvând N ecuații, din cele $2N$ ale sistemului liniar.

Coeficienții A_{iN} se pot exprima și prin intermediul polinomului de interpolare Lagrange. Formula gaussiană, având gradul de valabilitate $2N-1$, este exactă și pentru funcția

$$f(\mathbf{x}) = l_{k,N}^2(\mathbf{x}),$$

pentru care

$$\int_a^b l_{k,N}^2(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N A_{iN} \cdot l_{k,N}^2(\mathbf{x}_{iN}) = A_{kN} \cdot l_{k,N}^2(\mathbf{x}_{kN}) = A_{kN},$$

deci

$$A_{kN} = \int_a^b l_{k,N}^2(\mathbf{x}) \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Eroarea integrării în metoda gaussiană este

$$R_N = \frac{f^{(2N)}(\xi)}{(2N)!} \cdot \int_a^b \pi_N^2(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Particularizăm relația pentru polinoamele ortogonale uzuale, obținând formule de integrare utile

- -Cebășev ordin 1

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \cong \frac{\pi}{N} \sum_{i=1}^N f\left(\cos \frac{(2i-1)\pi}{2N}\right).$$

O funcție MATLAB care calculează o integrală, folosind relația precedentă este:

```
function y=Gceb(f,n)
%integrare Gauss-Cebasev
k=1:n;
x=cos(2*k-1)*pi/(2*n);
y=pi/n*sum(feval(f,x));
```

În scriptul de test, funcția integrand **f** se definește cu **inline**. De exemplu:

```
F=inline('x*sqrt(x)')
Z=Gceb(F,5)
```

- -Cebășev ordin 2

$$\int_{-1}^1 f(x) \sqrt{1-x^2} dx \cong \frac{\pi}{N+1} \sum_{i=1}^N \sin^2 \frac{\pi \cdot i}{N+1} \cdot f\left(\cos \frac{\pi \cdot i}{N+1}\right);$$

- -Legendre

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \cong \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}),$$

cu

$$A_{iN} = \frac{2 \cdot (1 - x_{iN}^2)}{N^2 \cdot L_{N-1}^2(x_{iN})}.$$

Funcția MATLAB care calculează o integrală definită Gauss-Legendre este

```
function y=GLeg(f,a,b,n)
%integrare Gauss-Legendre
z=Leg(n+1); %coeficienti Ln(x)
x=roots(z); %radacini Ln(x)
xx=(b+a)/2+(b-a)/2*x;
yy=feval(f,xx);
z1=Leg(n-1);
A=2*(1-x.^2)/n^2;
A=A./polyval(z1,x).^2;
y=(b-a)/2*A'*yy;
```

Dacă limitele de integrare sunt altele decât -1 și 1, se face o schimbare de variabilă:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t\right) dt$$

$$I \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^n A_k f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t_k\right)$$

- -Laguerre

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \cong \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}),$$

cu

$$A_{iN} = \frac{x_{iN}}{(N+1)^2 G_{N+1}^2(x_{iN})}.$$

- -Hermite

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \cong \sum_{i=1}^N A_{iN} f(x_{iN}),$$

cu

$$A_{iN} = \frac{2^{N+1} N! \sqrt{\pi}}{H_{N+1}^2(x_{iN})}.$$

Nodurile x_{iN} reprezintă rădăcinile polinomului ortogonal corespunzător, iar coeficienții A_{iN} se obțin fie prin rezolvarea sistemelor de ecuații liniare deduse, impunând ca formula de integrare să fie exactă pentru polinoame până la gradul N , fie direct cu formulele de mai sus.

Metodele gaussiene au o precizie mai mare decât metodele de tip Newton-Cotes (având gradul de valabilitate mai ridicat) și pot fi utilizate și pentru calculul unor integrale improprii de tipul de mai sus.

4. Integrare Romberg

Fie I_N și E_N valoarea aproximativă a integralei și estimarea erorii în metoda compusă a trapezelor. Valoarea exactă a integralei este

$$I = I_N + E_N,$$

$$E_N = -\frac{Nh^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

Pentru două valori diferite ale lui N avem

$$I = I_{N_1} + E_{N_1} = I_{N_2} + E_{N_2},$$

de unde

$$\frac{E_{N_1} - E_{N_2}}{E_{N_1}} = \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{E_{N_1}} \Rightarrow E_{N_1} = \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - \frac{E_{N_2}}{E_{N_1}}},$$

$$\frac{E_{N_2}}{E_{N_1}} = \frac{-\frac{N_2 h_2^3}{12} f(\xi_2)}{-\frac{N_1 h_1^3}{12} f(\xi_1)} = \frac{\frac{N_2 (b-a)^3}{N_2^3}}{\frac{N_1 (b-a)^3}{N_1^3}} = \frac{N_1^2}{N_2^2},$$

(dacă se aproximează $f(\xi_1) \cong f(\xi_2)$). Prin urmare

$$E_{N_1} = \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - \frac{N_1^2}{N_2^2}} \Rightarrow I = I_{N_1} + \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - \frac{N_1^2}{N_2^2}},$$

Dacă se alege $N_1=2N_1$ atunci

$$I = I_N + \frac{I_{2N} - I_N}{1 - \frac{1}{4}} = I_N + \frac{4(I_{2N} - I_N)}{3},$$

de unde, în final

$$I = \frac{4I_{2N} - I_N}{3}$$

Dacă în această formulă înlocuim pe I_N și I_{2N} cu estimările lor din formula compusă a trapezelor, atunci se obține pentru I estimarea din formula compusă a lui Simpson.

Estimând acum integrala cu formula compusă a lui Simpson, în care eroarea are expresia

$$E_N = -\frac{Nh^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

se obține

$$I = I_{N_1} + \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - \frac{N_1^4}{N_2^4}},$$

Dacă se urmează tactica dublării numărului de puncte, atunci

$$I = I_N + \frac{4^2(I_{2N} - I_N)}{4^2 - 1} = \frac{4^2 I_{2N} - I_N}{4^2 - 1} = \frac{16I_{2N} - I_N}{15}.$$

Notăm cu I_{01} , I_{11} , K , I_{N1} estimările integralelor calculate cu formula compusă a trapezelor considerând 2^0 , 2^1 , K , 2^N intervale.

Se demonstrează ușor că I_{N1} poate fi obținut prin recurență din $I_{N-1, 1}$ cu formula

$$I_{N,1} = \frac{1}{2} \left[I_{N-1,1} + \frac{b-a}{2^{N-1}} \sum_{i=1, \Delta i=2}^{2^N-1} f\left(a + \frac{b-a}{2^N} i\right) \right].$$

Integralele Simpson pentru 2^0 , 2^1 , K , 2^N intervale se obțin cu formulele

$$I_{k,2} = \frac{4I_{k+1,1} - I_{k,1}}{4 - 1}.$$

Analog

$$I_{k,3} = \frac{4^2 I_{k+1,2} - I_{k,2}}{4^2 - 1}, \text{ și}$$

$$I_{k,j} = \frac{4^{j-1} I_{k+1,j-1} - I_{k,j-1}}{4^{j-1} - 1}.$$

Se formează matricea inferior triunghiulară

$$\begin{matrix} I_{11} \\ I_{21} & I_{22} \\ I_{31} & I_{32} & I_{33} \\ & K \\ I_{N1} & I_{N2} & & I_{NN} \end{matrix}$$

Fiecare coloană converge către I , cu atât mai rapid cu cât este situată mai la dreapta.

Pentru o coloană j , calculul iterativ este oprit în momentul în care

$$|I_{k,j} - I_{k-1,j}| < \varepsilon \cdot |I_{k,j}|$$

unde ε este toleranța impusă. Calculul integralei pe această bază face obiectul algoritmului 7.4.

```
function R = Romberg(a, b, n, f)
% Intrări:
% a, b = intervalul de integrare
% f = funcția de integrat
% 2^n = numărul intervalelor de diviziune
% Ieșiri:
% R = matricea cu valorile integralelor
h = b-a;
R(1,1) = h(f(a)+f(b)) / 2;
l = 1
for i = 2 : n
    s = R(i-1, 1);
    for k = 1 : l
```

```

        s = s + h.f(a+(k-0.5)h);
    end
    R(i,1) = s / 2;
    l = 2*l;
    p = 1;
    for j = 2 : i
        p = 4*p;
        R(i,j)=(p*R(i,j-1)-R(i-1,j-1))/(p-1);
    end
    h = h / 2;
end

```

Metoda Romberg converge pentru orice funcție integrabilă în sens Riemann.

5. Metoda seriei generatoare

Se utilizează cea de-a treia formulă de interpolare Newton-Gregory, considerând punctele echidistante x_0, x_{-1}, K, x_{-k} .

$$f(x) = f(x_0 + uh) = p_k(u) + E(u),$$

unde

$$p_k(u) = f_0 + \binom{u}{1} \nabla f_0 + K + \binom{u+k-1}{k} \nabla^k f_0,$$

cu eroarea interpolării

$$E(u) = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} u(u+1)K(u+k)f^{(k+1)}(\xi).$$

Prin integrarea formulei se obține

$$\int_{x_0}^{x_{-1}} f(x)dx = h \cdot \left[f_0 \int_0^1 du + \nabla f_0 \int_0^1 \binom{u}{1} du + K + \nabla^k f_0 \int_0^1 \binom{u+k-1}{k} du \right] + R,$$

în care expresia restului este

$$R = k^{k+2} f^{(k+1)}(\xi) \int_0^1 \binom{u+k}{k+1} du.$$

Dacă se introduce notația

$$c_m = \int_0^1 \frac{u(u+1)K(u+m-1)}{m!} du,$$

formula de integrare devine

$$\int_{x_0}^{x_{-1}} f(x)dx = h \cdot \left(f_0 + c_1 \nabla f_0 + K + c_k \nabla^k f_0 \right) + c_{k+1} h^{k+2} f^{(k+1)}(\xi).$$

Pentru calculul integralei folosim seria

$$c(t) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m t^m,$$

care este absolut convergentă pentru $|t| < 1$, întrucât $|c_m| < 1$. avem

$$c(t) = \sum_{m=0}^{\infty} t^m \int_0^1 \frac{u(u+1)K(u+m-1)}{m!} du = \int_0^1 \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{u(u+1)K(u+m-1)}{m!} t^m \right) du = \int_0^1 (1-t)^{-u} du,$$

$$c(t) = - \frac{t}{(1-t) \cdot \ln(1-t)},$$

care se rescrie

$$\frac{c(t)}{t} \cdot \ln(1-t) = \frac{1}{1-t},$$

Dezvoltăm în serie

$$\left(1 + \frac{t}{2} + \frac{t^2}{3} + K\right) \cdot (c_0 + c_1 t + K) = 1 + t + t^2 + K,$$

și identificăm coeficienții, rezultând relația de recurență

$$c_m + \frac{c_{m-1}}{2} + K + \frac{c_0}{m+1} = 1.$$

Valorile coeficienților astfel calculați sunt $1, \frac{1}{2}, \frac{5}{12}, \frac{3}{8}, \frac{251}{720}, \frac{95}{188}, \dots$ etc.

Metoda este utilizată și pentru integrarea ecuațiilor diferențiale prin metode multiple.

6. Derivare numerică

Pentru o funcție $f \in C([a, b])$ cunoscută numai prin valorile $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ se cere aproximarea derivatei $f^{(p)}(\alpha)$ într-un punct $\alpha \in [a, b]$.

Aproximarea derivatei se exprimă printr-o funcțională liniară discretă

$$f^{(p)}(\alpha) = \sum_{i=0}^n A_i(\alpha) \cdot f(x_i) + R(\alpha).$$

Coeficienții $A_i(\alpha)$ se determină impunând ca formula să fie exactă ($R(\alpha) = 0$) pentru o anumită clasă de funcții.

De exemplu pentru baza $u_0(x), u_1(x), \dots, u_n(x)$ se obține

$$u_k^{(p)}(\alpha) = \sum_{i=0}^n A_i(\alpha) \cdot u_k(x_i).$$

sistem de ecuații care ne permite să determinăm necunoscutele $A_i(\alpha)$.

Utilizarea bazei polinomiale $1, x, x^2, \dots, x^n$ conduce la sistemul liniar

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^n A_i(\alpha) x_i^k = 0, & k = 1 : p-1, \\ \sum_{i=0}^n A_i(\alpha) x_i^k = k(k-1)K(k-p+1)\alpha^{k-p}, & k = p : n. \end{cases}$$

Funcția f poate fi înlocuită cu polinomul de interpolare Lagrange, derivata funcției fiind estimată prin derivata polinomului de interpolare.

$$f^{(p)}(\alpha) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot l_i^{(p)}(\alpha) + E^{(p)}(\alpha),$$

de unde prin identificare se obține

$$A_i(\alpha) = l_i^{(p)}(\alpha), \quad i = 0 : n.$$

Eroarea formulei de derivare este

$$R(\alpha) = E^{(p)}(\alpha) = \left[(x - x_0) K (x - x_n) E_{n+2}[x, x_0, K x_n] \right]^{(p)},$$

$$R(\alpha) = \sum_{k=0}^p \frac{p!}{k!} n^{(k)}(\alpha) \frac{f^{(n+p-k+1)}(\xi_{p-k})}{(n+p-k+1)!}.$$

Formulele de aproximare obținute pentru prima derivată, considerând punctele x_i echidistante sunt de forma

- formule în 3 puncte

$$f'(x_{-1}) = \frac{-3f(x_{-1}) + 4f(x_0) - f(x_1)}{2h} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi),$$

$$f'(x_0) = \frac{-f(x_{-1}) + f(x_1)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi),$$

$$f'(x_1) = \frac{f(x_{-1}) - 4f(x_0) + 3f(x_1)}{2h} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi),$$

$$f'(x_2) = \frac{-25f(x_{-2}) + 48f(x_{-1}) - 36f(x_0) + 16f(x_1) - 3f(x_2)}{12h} + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi).$$

- formule în 5 puncte

$$f'(x_{-2}) = \frac{-25f(x_{-2}) + 48f(x_{-1}) - 36f(x_0) + 16f(x_1) - 3f(x_2)}{12h} + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi),$$

$$f'(x_{-1}) = \frac{-3f(x_{-2}) - 10f(x_{-1}) + 18f(x_0) - 6f(x_1) + f(x_2)}{12h} + \frac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi),$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_{-2}) - 8f(x_{-1}) + 8f(x_1) - f(x_2)}{12h} + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi),$$

$$f'(x_1) = \frac{-f(x_{-2}) + 6f(x_{-1}) - 18f(x_0) + 10f(x_1) + 3f(x_2)}{12h} - \frac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi),$$

$$f'(x_2) = \frac{3f(x_{-2}) - 16f(x_{-1}) + 36f(x_0) - 48f(x_1) + 25f(x_2)}{12 \cdot h} + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi).$$

Eroarea este minimă dacă derivata este calculată într-un punct central.