INTEGRARE ŞI DERIVARE NUMERICĂ

Ne propunem în acest capitol să calculăm în mod aproximativ valorile

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

$$D[f] = f^{(p)}(x_0).$$

în condiţiile în care

- funcţia f este continuă pe $[a,\ b]$: $f \in C([a,\ b])$ şi derivabilă în x_0
- primitiva F nu este cunoscută
- funcţia 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

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

In mod similar se defineşte o metodă aproximativă de derivare.

***Teorema 7.1.** Condiţia necesară şi suficientă ca metoda de integrare $I_N[f]$ să conveargă slab către $I[f]$ se exprimă prin relaţiile*

a) există $M>0$ *astfel încât* $\sum_{i=1}^{N} |a_{iN}| \le M$, *pentru toţi* $N=1,2,...$

b) $\lim_{n\to\infty} I_N(x^k) = \int_a^b x^k\ dx$, *pentru toţi* $k=0,1,...$

1. Metode de tip Newton-Cotes

In general, pentru o formulă de integrare aproximativă putem scrie

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

funcţia pondere $w: [a,b] \to R^+$, nu modifică problema (1), întrucât putem lua $g(x)=f(x).w(x)$, 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 $w(x)$.

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

Cum funcţia 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

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

$$\sum_{i=0}^{N} f(x_{iN})\cdot \int_a^b l_{iN}(x)\cdot w(x)\ dx = \sum_{i=1}^{N} A_{iN} f(x_{iN}),$$

de unde

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

Printr-o schimbare liniară de variabilă, coeficienţii a_{iN} pot fi făcuţi independenţi de intervalul de integrare; ei sunt totuşi inutilizabili, fiind de valori mari şi 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.

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

obţinându-se

$$\underbrace{\int_a^b f(x)\cdot w(x)\ dx}_{I[f]} = \underbrace{\int_a^b P_{N-1}(x)\cdot w(x)\ dx}_{I_N[f]} + \underbrace{\int_a^b E_{N-1}(x) w(x)\ dx}_{R_N},$$

deci

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

cu majorarea

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

Datorită instabilităţii interpolării polinomiale se folosesc polinoame de interpolare cu grad mic.
Astfel pentru `N=1` se obţine *formula trapezelor*

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

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

Pentru `N=2` se obţine *formula lui Simpson*

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

Aceste formule folosesc puţine puncte ceeace ne determină să aproximăm funcţia `f`, local, pe intervale

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

Se obţin în acest fel

- *formula compusă a trapezelor*

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

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

```
function I = Trapez(a, b, n, f)
% Intrări:
% a, b = capetele intervalului de integrare
% n = ordinul metodei
% f = funcţia de integrat
% Ieşiri:valoare 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*

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

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

```
function I= Simpson(n, a, b, f)
/* Intrări:
/* a,b = capete interval de integrare
/*  n = ordinul metodei
/*  f = funcţia de integrat
/* Ieşiri:  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 părţi
Metoda lui Euler

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

Considerăm funcţia $f(x)$ continuă, împreună cu derivatele până la ordinul r inclusiv ($f : (a, b) \to R$, $f \in C^r([a, b])$) şi polinomul monic de grad $\le r$, $P_r(x) \in \Pi_r$.

Întrucât $P_r(x)$ este monic, avem evident $P_r^{(r)}(x) = r\,!$ şi 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 părţi de r ori

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

Considerăm dezvoltarea în serie

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

relaţie scrisă şi sub forma

$\left(e^t-1\right)\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{B_n(x)}{n\,!}\cdot t^n\right] = t\cdot e^{tx}$, în care exponenţialele 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 obţinem

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

relaţie care ne arată că $B_n(x)$ este un polinom de grad n numit *polinomul lui Bernoulli*.
Folosind relaţia cu $n=1,2,\ldots$ obţinem

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

Se obţin relativ uşor relaţiile

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

Numerele lui Bernoulli se definesc ca

$$B_n = B_n(0)$$

Dacă se notează

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

particularizăm relaţia de recurenţă pentru $x=0$

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

din care se determină, luând pe rând **n=1,2,...** valorile

$C_1 = -\frac{1}{2},\ C_2 = \frac{1}{6},\ldots$ şi

$$B_{2n+1} = 0$$

Particularizăm relaţia pentru $r = 2n$, $\quad P_r(x) = \frac{B_{2n}(x)}{(2n)\,!}$ şi facem schimbarea de variabilă

$x=a+t.h$ cu $h=b-a$

obţinem

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

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

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

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

şi aplicăm formula de mai sus în fiecare subinterval. Obţinem în final
o relaţie cunoscută sub numele de *formula lui Euler*

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

3. Integrare gaussiană

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

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

cu $w : (a, b) \to R^+$, o funcţie 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 condiţiile

$\int_a^b x^k w(x)\, dx, \qquad k = 0, 1, \ldots$ să fie absolut convergente

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

Metodele de tip Newton-Cotes (pentru suportul $x_{1N}, \ldots, x_{NN}$) 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} şi x_{iN} cu $i=1:N$, necesită $2N$ ecuaţii. Formula este, prin urmare exactă pentru polinoame de la grad 0 până la $2N-1$.

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

Sistemul format, considerând polinoamele $P = 1, x, \ldots, x^{2N-1}$ 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 neliniar în raport cu x_{iN}, şi nu poate fi rezolvat uşor în mod direct.
Pentru obţinerea nodurilor x_{iN}, $i=1:N$, Gauss a folosit metoda prezentată în cele ce urmează. Seconsideră polinomul

$$\pi_N(x) = (x - x_{1N})\dots(x - x_{NN}),$$

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

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

pe baza teoremei împărţirii cu rest.
Dorim ca formula aproximativă de integrare să aibă grad de valabilitate > $N-1$, adică să fie exactă pentru polinoamele $P_{N+q-1}(x)$, ceeace implică

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

dar:

$$P_{N+q-1}(x_{iN}) = R_{N-1}(x_{iN}),$$

sau

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

Pe de altă parte

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

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

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

de unde

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

Relaţia arată că $\pi_N(x)$ este ortogonal cu orice polinom de grad < N. Se ştie că, în raport cu o funcţie pondere $w(x)$ definită pe un interval (a,b), există un polinom ortogonal unic; aşadar $\pi_N(x)$ este acest polinom ortogonal.
In concluzie, nodurile x_{iN} (*abscisele Gauss*) sunt rădăcinile polinomului ortogonal, definit în mod unic în raport cu funcţia pondere $w(x)$.
Coeficienţii A_{iN} se vor determina apoi, rezolvând N ecuaţii, din cele $2N$ ale sistemului liniar.
Coeficienţii A_{iN} se pot exprima şi prin intermediul polinomului de interpolare Lagrange. Formula gaussiană, având gradul de valabilitate $2N-1$, este exactă şi pentru funcţia

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

pentru care

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

deci

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

Eroarea integrării în metoda gaussiană este

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

Particularizăm relaţia pentru polinoamele ortogonale uzuale, obţinând formule de integrare utile

- *-Cebâşev 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 funcţie MATLAB care calculează o integrală, folosind relaţia 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, funcţia integrand **f** se defineşte cu **inline**. De exemplu:

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

- *-Cebâşev 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

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

Funcţia 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** şi **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 coeficienţii A_{iN} se obţin fie prin rezolvarea sistemelor de ecuaţii 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) şi pot fi utilizate şi pentru calculul unor integrale improprii de tipul de mai sus.

4. Integrare Romberg

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

$$I = I_N + E_N,$$

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

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

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

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 şi I_{2N} cu estimările lor din formula compusă a trapezelor, atunci se obţine pentru I estimarea din formula compusă a lui Simpson.
Estimând acum integrala cu formula compusă a lui Simpson, în care eroarea are expresia

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

se obţine

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

Dacă se urmează tactica dublării numărului de puncte, atunci

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

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

Se demonstrează uşor că I_{N1} poate fi obţinut prin recurenţă 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 $2^0, 2^1, \dots, 2^N$ intervale se obţin cu formulele

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

Analog

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

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

Se formează matricea inferior triunghiulară

$$\begin{array}{llll}
I_{11} & & & \\
I_{21} & I_{22} & & \\
I_{31} & I_{32} & I_{33} & \\
 & \dots & & \\
I_{N1} & I_{N2} & & I_{NN}
\end{array}$$

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

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

unde ε este toleranţa 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 =  funcţia de integrat
%  2^n = numărul intervalelor de diviziune
%  Ieşiri:
%  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 funcţie integrabilă în sens Riemann.

5. Metoda seriei generatoare

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

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

unde

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

cu eroarea interpolării

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

Prin integrarea formulei se obţine

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

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 notaţia

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

formula de integrare devine

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

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

$$C(t) = \sum_{m=0}^{\infty} t^m \int_0^1 \frac{u(u+1)\ldots(u+m-1)}{m!} du =$$

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

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

care se rescrie

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

Dezvoltăm în serie

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

şi identificăm coeficienţii, rezultând relaţia de recurenţă

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

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

Metoda este utilizată şi pentru integrarea ecuaţiilor diferenţiale prin metode multipas.

6. Derivare numerică

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

Aproximarea derivatei se exprimă printr-o funcţională liniară discretă

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

Coeficienţii $A_i(\alpha)$ se determină impunând ca formula să fie exactă $(R(\alpha) = 0)$ pentru o anumită clasă de funcţii.
De exemplu pentru baza $u_0(x), u_1(x), \ldots, u_n(x)$ se obţine

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

sistem de ecuaţii care ne permite să determinăm necunoscutele $A_i(\alpha)$.
Utilizarea bazei polinomiale $1, x, x^2, \ldots, x^n$ conduce la sistemul liniar

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

Funcţia f poate fi înlocuită cu polinomul de interpolare Lagrange, derivata funcţiei 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 obţine

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

Eroarea formulei de derivare este

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

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

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

- formule în 3 puncte

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

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

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

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

- formule în 5 puncte

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

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

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

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

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

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