15.03.2024

MAC

(curs 8 - S4)

6. Derivarea și integrarea numerică

6.1. Derivarea numerică

6.1.1. Formule cu diferențe finite

- prin definiţie, derivata lui $f(x)$ într-un punct x este

$$\boxed{f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},} \tag{1}$$

dacă limita există
- aceasta conduce la o formulă folositoare pentru aproximarea derivatei în x
- Teorema lui Taylor spune că dacă f este de două ori continuu derivabilă, atunci

$$\boxed{f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(c),} \tag{2}$$

unde c este între x şi $x+h$
- ecuaţia (2) implică următoarea formulă:

Algoritmul 1 (Formula cu diferenţe înainte cu două puncte)

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(c), \tag{3}$$

unde c este între x şi $x+h$.

- folosim (3) pentru a calcula aproximarea

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \tag{4}$$

tratând ultimul termen din (3) ca fiind eroarea
- deoarece eroarea produsă de aproximare este proporţională cu incrementul h, putem face eroarea mică făcând pe h mic
- formula cu diferenţe înainte cu două puncte este o metodă de ordinul întâi pentru aproximarea primei derivate
- în general, dacă eroarea este $O(h^n)$, numim formula o aproximare de **ordinul** n
- o chestiune subtilă în legătură cu numirea formulei ca fiind de ordinul întâi este că c depinde de h
- ideea ordinului întâi este că eroarea trebuie să fie proporţională cu h când $h \to 0$
- când $h \to 0$, c este o ţintă în mişcare, şi, ca urmare, constanta de proporţionalitate se schimbă
- dar câtă vreme f'' este continuă, constanta de proporţionalitate $f''(c)$ tinde către $f''(x)$ când $h \to 0$, dând legitimitate numirii formulei ca fiind de ordinul întâi

Exemplul 1

- folosiţi formula cu diferenţe înainte cu două puncte cu $h = 0.1$ pentru a aproxima derivata lui $f(x) = 1/x$ în $x = 2$

$f(x) = \frac{1}{x}$

$x = 2$

→ formula cu diferente înainte cu 2 puncte :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{\frac{1}{2,1} - \frac{1}{2}}{0,1} \approx -0,2381$$

→ Eroarea este diferența între această aproximare și derivata corectă

$f'(x) = -x^{-2}$ în $x = 2 \Rightarrow$

$$e = -0,2381 - (-0,2500) = 0,0119$$

→ Comparam aceasta valoare cu eroarea prezisa de formula, care este : $e = \frac{h \cdot f''(c)}{2}$ pentru un anumit c intre [2; 2,1].

$f''(x) = 2x^{-3} \Rightarrow$ eroarea trebuie să fie între:

$$0,1 \cdot \frac{2 \cdot 2^{-3}}{2} < e < 0,1 \cdot \frac{2 \cdot (2,1)^{-3}}{2}$$

$$0,0125 < e < 0,0108$$

Ceea ce este consistent cu rezultatul nostru.

!! Totusi, aceasta informatie nu este de obicei disponibila

- potrivit Teoremei lui Taylor, dacă f este de trei ori continuu derivabilă, atunci

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(c_1)$$

şi

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(c_2),$$

unde $x - h < c_2 < x < c_1 < x + h$

- scăzând cele două ecuaţii rezultă în următoarea formulă cu trei puncte cu un termen de eroare explicit:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}f'''(c_1) - \frac{h^2}{12}f'''(c_2). \tag{5}$$

- pentru a fi mai precişi în legătură cu termenul de eroare pentru noua formulă, vom folosi următoarea teoremă:

Teorema 1 (Teorema valorii intermediare generalizată)

Fie f o funcţie continuă pe intervalul $[a, b]$. Fie $x_1, \ldots, x_n$ puncte din $[a, b]$, şi $a_1, \ldots, a_n > 0$. Atunci există un număr c între a şi b astfel încât

$$(a_1 + \cdots + a_n)f(c) = a_1 f(x_1) + \cdots + a_n f(x_n). \tag{6}$$

- fie $f(x_i)$ minimul şi $f(x_j)$ maximul dintre cele n valori ale funcţiei

- atunci
$$a_1 f(x_i) + \cdots + a_n f(x_i) \le a_1 f(x_1) + \cdots + a_n f(x_n) \le a_1 f(x_j) + \cdots + a_n f(x_j)$$
implică
$$f(x_i) \le \frac{a_1 f(x_1) + \cdots + a_n f(x_n)}{a_1 + \cdots + a_n} \le f(x_j).$$
- din Teorema valorii intermediare, există un număr c între x_i şi x_j, astfel încât
$$f(c) = \frac{a_1 f(x_1) + \cdots + a_n f(x_n)}{a_1 + \cdots + a_n},$$
şi (6) este satisfăcută
- Teorema 1 ne spune că putem combina ultimii doi termeni din (5), pentru a obţine formula de ordinul doi:

Algoritmul 2 (Formula cu diferenţe centrate cu trei puncte)

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(c), \qquad (7)$$

unde $x - h < c < x + h$.

Exemplul 2

- folosiţi formula cu diferenţe centrate cu trei puncte cu $h = 0.1$ pentru a aproxima derivata lui $f(x) = 1/x$ în $x = 2$

$\longrightarrow$ formula cu diferente divizate cu trei puncte

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{\frac{1}{2,1} - \frac{1}{1,9}}{0,2} \approx -0,2506$$

$\longrightarrow$ Eroarea este diferența între această aproximare și derivata corectă

$f'(x) = -x^{-2}$ în $x = 2 \Rightarrow$

$e = -0,2506 - (-0,2500) = 0,0006$

$\longrightarrow$ Comparam aceasta valoare cu eroarea prezisa de formula, care este : $e = \frac{h^2 \cdot f'''(c)}{6}$ pentru un anumit c intre [1,9; 2,1].

$f''(x) = 2x^{-3}$

$f'''(x) = -6x^{-4}$ $\Rightarrow$ eroarea trebuie să fie între:

$$\frac{0,01 \cdot (-6) \cdot (1,9)^{-4}}{6} < e < \frac{0,01 \cdot (-6) \cdot (2,1)^{-4}}{6}$$

Algoritmul 3 (Formula cu diferenţe centrate cu trei puncte pentru derivata a doua)

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(iv)}(c), \qquad (8)$$

pentru un anumit c între $x - h$ şi $x + h$.

6.1.2. Extrapolarea

- să presupunem că avem o formulă de ordinul n $F(h)$ pentru aproximarea unei cantităţi date Q
- acest ordin înseamnă că

$$Q \approx F(h) + Kh^n,$$

unde K este aproximativ constant pentru intervalul de valori ale lui h de care suntem interesaţi
- un exemplu relevant este

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(c_h)}{6} h^2, \qquad (9)$$

unde am accentuat faptul că punctul necunoscut c_h se află între x şi $x + h$, dar depinde de h
- deşi c_h nu este constant, dacă funcţia f este suficient de netedă şi h nu este foarte mare, valorile coeficientului de eroare $f'''(c_h)/6$ nu ar trebui să varieze prea mult faţă de $f'''(x)/6$
- într-un astfel de caz, anumite calcule pot fi folosite pentru a transforma formula de ordinul n într-una de ordin superior

- deoarece ştim că ordinul formulei $F(h)$ este n, dacă aplicăm formula din nou cu $h/2$ în loc de h, eroarea ar trebui să se reducă de la o constantă înmulţită cu h^n la o constantă înmulţită cu $(h/2)^n$, adică să fie redusă cu un factor de 2^n
- cu alte cuvinte, ne aşteptăm ca

$$Q - F(h/2) \approx \frac{1}{2^n}(Q - F(h)). \qquad (10)$$

- ne bazăm pe presupunerea că K este relativ constant
- observăm că (10) poate fi uşor rezolvat pentru a găsi cantitatea Q pe care vrem s-o aproximăm, dând astfel formula:

Algoritmul 4 (Formula de extrapolare pentru ordinul n)

$$Q \approx \frac{2^n F(h/2) - F(h)}{2^n - 1}. \qquad (11)$$

- aceasta este formula de **extrapolare** pentru $F(h)$
- extrapolarea, uneori numită **extrapolare Richardson**, ne dă de obicei o aproximare a lui Q de ordin superior lui $F(h)$

- pentru a înţelege de ce, presupunem că formula de ordinul n $F_n(h)$ poate fi scrisă astfel:

$$Q = F_n(h) + Kh^n + O(h^{n+1}).$$

- atunci înjumătăţirea lui h ne dă

$$Q = F_n(h/2) + K\frac{h^n}{2^n} + O(h^{n+1}),$$

şi versiunea extrapolată, pe care o vom nota $F_{n+1}(h)$, va satisface

$$\begin{aligned} F_{n+1}(h) &= \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1} \\ &= \frac{2^n(Q - Kh^n/2^n - O(h^{n+1})) - (Q - Kh^n - O(h^{n+1}))}{2^n - 1} \\ &= Q + \frac{-Kh^n + Kh^n + O(h^{n+1})}{2^n - 1} = Q + O(h^{n+1}). \end{aligned}$$

- prin urmare, $F_{n+1}(h)$ este (cel puţin) o formulă de ordinul $n + 1$ pentru aproximarea cantităţii Q

Exemplul 3

- aplicaţi formula de extrapolare pentru (9)
- pornim cu formula de ordinul doi cu diferenţe centrate $F_2(h)$ pentru derivata $f'(x)$
- formula de extrapolare (11) ne dă o nouă formulă pentru $f'(x)$ sub forma

$$F_4(x) = \frac{2^2 F_2(h/2) - F_2(h)}{2^2 - 1} = \frac{1}{3}\left[4 \cdot \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{\cancel{2}\cdot\frac{h}{\cancel{2}}} - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}\right] =$$

$$= \frac{f(x-h) - 8f(x-\frac{h}{2}) + 8f(x+\frac{h}{2}) - f(x+h)}{6h}$$

- aceasta este o formulă cu diferenţe centrate cu cinci puncte
- argumentul anterior garantează că această formulă este cel puţin de ordinul trei, dar se constată că are ordinul patru, deoarece termenii de ordinul trei se anulează

de fapt, deoarece se vede că $F_4(h) = F_4(-h)$, eroarea trebuie să fie aceeaşi pentru h ca pentru $-h$

prin urmare, termenii de eroare nu pot fi decât puteri pare ale lui h

Exemplul 4

aplicaţi extrapolarea pentru formula derivatei secunde (8)

din nou, metoda este de ordinul doi, astfel că formula de extrapolare (11) este folosită cu $n = 2$

formula de extrapolare este

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(iv)}(c), \qquad (8)$$

$$F_4(x) = \frac{2^2 \cdot F_2(\frac{h}{2}) - F_2(h)}{2^2 - 1} = \frac{1}{3}\left[4 \cdot \frac{f(x-\frac{h}{2}) - 2f(x) + f(x+\frac{h}{2})}{\left(\frac{h}{2}\right)^2} - \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}\right] =$$

$$= \frac{-f(x-h) + 16f(x-h/2) - 30f(x) + 16f(x+h/2) - f(x+h)}{3h^2}.$$

noua metodă pentru aproximarea derivatelor secunde este de ordinul patru, din acelaşi motiv ca în exemplul anterior

6.2. Formule Newton-Cotes pentru integrarea numerica

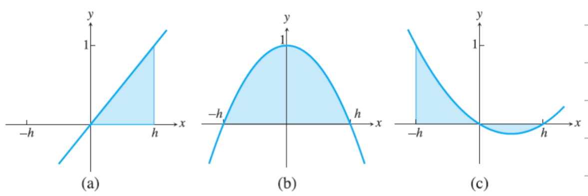

Figura 1: **Trei integrale simple (13), (14), şi (15).** Aria pozitivă netă este (a) $h/2$, (b) $4h/3$, şi (c) $h/3$.

- pentru a deduce formulele Newton–Cotes, avem nevoie de valorile a trei integrale definite simple, prezentate în Figura 1
- Figura 1(a) prezintă regiunea de sub dreapta care interpolează punctele $(0, 0)$ şi $(h, 1)$
- regiunea este un triunghi cu înălţimea 1 şi baza h, astfel că aria este

$$\int_0^h \frac{x}{h} dx = \frac{1}{2} h. \qquad (13)$$

- Figura 1(b) prezintă regiunea de sub parabola $P(x)$ care interpolează punctele $(-h, 0)$, $(0, 1)$, şi $(h, 0)$, care are aria

$$\int_{-h}^h P(x) dx = \left[x - \frac{x^3}{3h^2}\right]\Bigg|_{-h}^h = \frac{4}{3} h. \qquad (14)$$

- Figura 1(c) prezintă regiunea dintre axa x şi parabola care interpolează punctele $(-h, 1)$, $(0, 0)$, şi $(h, 0)$, care are aria pozitivă netă

$$\int_{-h}^h P(x) dx = \frac{1}{3} h. \qquad (15)$$

6.2.1 Regula trapezului

Teorema 2 (Teorema de medie pentru integrale)

Fie f o funcţie continuă pe intervalul $[a, b]$, şi fie g o funcţie integrabilă care nu îşi schimbă semnul pe $[a, b]$. Atunci există un număr c între a şi b astfel încât

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(c)\int_a^b g(x)dx.$$

- am demonstrat:

Algoritmul 5 (Regula trapezului)

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) - \boxed{\frac{h^3}{12}f''(c),} \quad (17)$$

unde $h = x_1 - x_0$ şi c este între x_0 şi x_1.

→ eroarea

6.2.2. Regula lui Simpson

Algoritmul 6 (Regula lui Simpson)

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) - \boxed{\frac{h^5}{90}f^{(iv)}(c),} \quad (18)$$

unde $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$ şi c este între x_0 şi x_2.

→ eroarea

Exemplul 5

- aplicaţi regula trapezului şi regula lui Simpson pentru a aproxima

$$\int_1^2 \ln x dx,$$

şi găsiţi o limită superioară pentru eroarea din aceste aproximări

→ regula trapezului $\quad h = x_1 - x_0, \quad c \in [x_0, x_1], \quad f(x) = \ln x$

$$\int_1^2 \ln x\, dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) = \frac{1}{2}(\ln 1 + \ln 2) = \frac{\ln 2}{2} \approx 0,3466$$

$$\text{eroarea} = -\frac{h^3 f''(c)}{12} = \frac{-1\cdot\left(\frac{1}{c}\right)'}{12} = \frac{-\left(-\frac{1}{c^2}\right)}{12} = \frac{1}{12c^2} \; \Bigg\} < \frac{1}{12} \approx 0,0834$$

$c \in (1,2)$ $\qquad$ pt $c \to 1$

$$\Longrightarrow \int_1^2 \ln x\, dx = 0,3466 \pm 0,0834$$

exact →
$$\int_1^2 \ln x dx = x \ln x \Big|_1^2 - \int_1^2 1\, dx = 2\ln 2 - 1 \approx 0,3862$$

eroare reală : $0,3862 - 0,3466 = 0,396$

→ Regula lui Simpson $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$ $c \in [x_0, x_2]$ $x_1 = 1{,}5$

$$\int_1^2 \ln x\, dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) = \frac{0{,}5}{3}\left(\ln 1 + 4\ln 1{,}5 + \ln 2\right) \approx 0{,}3858$$

eroarea $-\frac{h^5 f^{(4)}(c)}{90} = -\frac{(0{,}5)^5(-6)}{90\, c^4} < \frac{6\cdot(0{,}5)^5}{90} = \frac{1}{480} \approx 0{,}0021$

$1 < c < 2$

$$\int_1^2 \ln x\, dx = 0{,}3858 \pm 0{,}0021$$

Definiţia 1

Gradul de precizie al unei metode de integrare numerică este cel mai mare întreg k pentru care toate polinoamele de gradul k sau mai mici sunt integrate exact de către metodă.

de exemplu, termenul de eroare al regulii trapezului, $-h^3 f''(c)/12$, arată că dacă $f(x)$ este un polinom de gradul 1 sau mai mic, eroarea va fi zero, şi polinomul va fi integrat exact

deci gradul de precizie al regulii trapezului este 1

aceasta este evident din punct de vedere intuitiv din geometrie, deoarece aria de sub o funcţie liniară este aproximată exact de un trapez

este mai puţin evident că gradul de precizie al regulii lui Simpson este trei, dar aceasta este ceea ce arată termenul de eroare din (18)

baza geometrică a acestui rezultat surprinzător este faptul că o parabolă care intersectează o curbă cubică în trei puncte egal depărtate are aceeaşi integrală precum curba cubică pe acel interval

Exemplul 6

- găsiţi gradul de precizie al formulei Newton–Cotes de gradul 3, numită **regula 3/8 a lui Simpson**

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \approx \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3).$$

- este suficient să testăm monoamele în ordine → $f(x) = x^0$, $f(x) = x^1$, $f(x) = x^2$, ...
- vom lăsa detaliile pe seama cititorului
- de exemplu, când $f(x) = x^2$, verificăm identitatea

$$\frac{3h}{8}(x^2 + 3(x+h)^2 + 3(x+2h)^2 + (x+3h)^2) = \frac{(x+3h)^3 - x^3}{3},$$

ultima fiind integrala corectă a lui x^2 pe $[x, x+3h]$
- egalitatea are loc pentru 1, x, x^2, x^3, dar nu are loc pentru x^4
- prin urmare, gradul de precizie al regulii este 3

Algoritmul 7 (Regula trapezului compusă)

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left(y_0 + y_m + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_i\right) - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(c), \qquad (20)$$

unde $h = (b-a)/m$ şi c este între a şi b.

Algoritmul 8 (Regula lui Simpson compusă)

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[y_0 + y_{2m} + 4\sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}\right] - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(iv)}(c), \qquad (21)$$

unde c este între a şi b.

Exemplul 7

- efectuaţi aproximări cu patru paneluri pentru

$$\int_1^2 \ln x dx,$$

folosind regula I trapezului compusă şi regula lui Simpson compusă

$\xrightarrow{I}$ interval $[1,2] \Rightarrow h = \frac{b-a}{m} = \frac{2-1}{4} = \frac{1}{4}$

$$\int_1^2 \ln x dx = \frac{\frac{1}{4}}{2}\left[y_0 + y_4 + 2\sum_{i=1}^{4-1} y_i\right] = \frac{1}{8}\left[\ln 0 + \ln 2 + 2\left(\ln\frac{5}{4} + \ln\frac{6}{4} + \ln\frac{7}{4}\right)\right] =$$

$= 0,3837$

$\longrightarrow$ eroare: $\frac{(b-a)h^2}{12} \cdot \left|f''(c)\right| = \frac{\frac{1}{16}}{12} \cdot \frac{1}{c^2} \le \frac{1}{192} \approx 0,0052$

$\longrightarrow$ Pentru regula lui Simpson $h = \frac{b-a}{2 \cdot m}$ m - nr. panelurilor

$h = \frac{1}{8}$

aproximarea este

$$\begin{aligned}
\int_1^2 \ln x dx &\approx \frac{1/8}{3}\left[y_0 + y_8 + 4\sum_{i=1}^{4} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{3} y_{2i}\right] \\
&= \frac{1}{24}[\ln 1 + \ln 2 + 4(\ln 9/8 + \ln 11/8 + \ln 13/8 + \ln 15/8) \\
&\quad +2(\ln 5/4 + \ln 6/4 + \ln 7/4)] \\
&\approx 0.386292.
\end{aligned}$$

aceasta este o aproximare cu patru zecimale exacte a valorii corecte 0.386294 din (19)

$\xrightarrow{\text{exact}} \int_1^2 \ln x dx = x \ln x \Big|_1^2 - \int_1^2 1 dx = 2\ln 2 - 1 \approx 0,386294$

într-adevăr, eroarea nu poate fi mai mare decât

$$\frac{(b-a)h^4}{180}|f^{(iv)}(c)| = \frac{(1/8)^4}{180}\frac{6}{c^4} \le \frac{6}{8^4 \cdot 180 \cdot 1^4} \approx 0.000008.$$

Exemplul 8

găsiţi numărul de paneluri m necesare pentru regula lui Simpson compusă pentru aproximarea integralei

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x dx$$

cu şase zecimale exacte

trebuie ca eroarea să satisfacă

$$\frac{(\pi - 0)h^4}{180}|f^{(iv)}(c)| < 0.5 \times 10^{-6}.$$

deoarece derivata a patra a lui $\sin^2 x$ este $-8\cos 2x$, trebuie ca

$$\frac{\pi h^4}{180} 8 < 0.5 \times 10^{-6},$$

sau $h < 0.0435$

prin urmare, $m = \lceil(\pi/(2h))\rceil = 37$ paneluri vor fi suficiente

6.2.4. Metode Newton - Cotes deschise

următoarea regulă este aplicabilă acelor funcţii f a căror derivată secundă f'' este continuă pe $[a, b]$:

Algoritmul 9 (Regula mijlocului)

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = hf(w) + \frac{h^3}{24} f''(c), \tag{22}$$

unde $h = (x_1 - x_0)$, w este mijlocul $x_0 + h/2$ al intervalului $[x_0, x_1]$, şi c este între x_0 şi x_1.

regula mijlocului este de asemenea folositoare pentru scăderea numărului de evaluări de funcţie necesare

Algoritmul 10 (Regula mijlocului compusă)

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=1}^{m} f(w_i) + \frac{(b-a)h^2}{24} f''(c), \tag{23}$$

unde $h = (b - a)/m$ şi c este între a şi b. Valorile w_i sunt mijloacele celor m subintervale egale ale lui $[a, b]$.

Exemplul 9

aproximaţi $\int_0^1 \sin x/x dx$ folosind regula mijlocului compusă cu $m = 10$ paneluri

$h = \frac{1-0}{10} = 0{,}1$

în primul rând, observăm că nu putem aplica o metodă închisă direct problemei, fără o tratare specială a capătului $x = 0$

metoda mijlocului poate fi aplicată direct

mijloacele sunt $0.05, 0.15, \ldots, 0.95$, astfel că metoda mijlocului compusă ne dă

$$\int_0^1 f(x)dx \approx 0.1\sum_{i=1}^{10} f(m_i) = 0.94620858.$$

răspunsul corect cu opt zecimale exacte este 0.94608307

- o altă regulă Newton–Cotes folositoare este

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{4h}{3}[2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)] + \frac{14h^5}{45} f^{(iv)}(c), \qquad (24)$$

unde $h = (x_4 - x_0)/4$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, $x_3 = x_0 + 3h$, şi unde $x_0 < c < x_4$
- regula are gradul de precizie trei

6.3. Integrarea Romberg

Algoritmul 11 (Integrarea Romberg)

$R_{11} = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$
for $j = 2, 3, \ldots$
  $h_j = \frac{b-a}{2^{j-1}}$
  $R_{j1} = \frac{1}{2}R_{j-1,1} + h_j \sum_{i=1}^{2^{j-2}} f(a + (2i-1)h_j)$ $\longrightarrow$ coloana 1
  for $k = 2, \ldots, j$
    $R_{jk} = \frac{4^{k-1}R_{j,k-1} - R_{j-1,k-1}}{4^{k-1}-1}$
  end
end

$\longrightarrow$ se va forma o matrice inferior triunghiulară $\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$

Exemplul 10

- aplicaţi integrarea Romberg pentru a aproxima $\int_1^2 \ln x dx$

$R_{11} = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} = 1 \cdot \frac{\ln 1 + \ln 2}{2} = \frac{\ln 2}{2} = 0{,}3465$

$j=2: \quad h_2 = \frac{b-a}{2^{2-1}} = \frac{1}{2}$

$R_{21} = \frac{1}{2} R_{11} + h_2 \sum_{i=1}^{2^{2-2}} f(a + (2i-1)h_2) = \frac{\ln 2}{4} + \frac{1}{2}\ln\left(1 + \frac{1}{2}\right) = 0{,}3760$

$k = 2 \to 2$

$R_{22} = \frac{4^{2-1} R_{21} - R_{11}}{4^{2-1} - 1} = 0{,}3858$

şi tot aşa

- aplicând algoritmul, obţinem următorul tablou

0.34657359027997	0	0	0
0.37601934919407	0.38583460216543	0	0
0.38369950940944	0.38625956281457	0.38628789352451	0
0.38564390995210	0.38629204346631	0.38629420884310	0.38629430908625

- observăm că R_{43} şi R_{44} au primele şase zecimale egale
- acesta este un semn al convergenţei metodei Romberg către valoarea corectă a integralei definite
- comparăm cu valoarea exactă $2\ln 2 - 1 \approx 0.38629436$

$\longrightarrow$ trb. să ajungem la convergență

- de fapt, exact cum prima coloană a integrării Romberg este definită ca fiind intrări succesive ale regulii trapezului compuse, a doua coloană este formată din intrări ale regulii lui Simpson compuse
- cu alte cuvinte, extrapolarea regulii trapezului compuse este regula lui Simpson compusă
- un criteriu de oprire comun pentru integrarea Romberg este de a calcula rânduri noi până când două intrări diagonale succesive R_{jj} diferă cu mai puţin de o toleranţă a erorii prestabilită

6.4. Cuadratura adaptiva

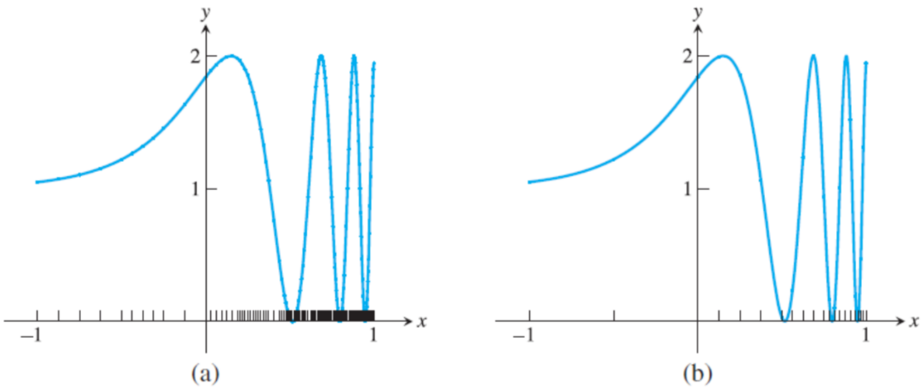

Figura 4: **Cuadratura adaptivă aplicată funcţiei $f(x) = 1 + \sin e^{3x}$.** Toleranţa este TOL $= 0.005$. (a) Regula trapezului adaptivă necesită 140 de subintervale. (b) Regula lui Simpson adaptivă necesită 20 de subintervale.

Algoritmul 12 (Cuadratura adaptivă)

Pentru a aproxima $\int_a^b f(x)dx$ cu o toleranţă TOL:
$c = \frac{a+b}{2}$
$S_{[a,b]} = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$
if $|S_{[a,b]} - S_{[a,c]} - S_{[c,b]}| < 3 \cdot \text{TOL} \cdot \left(\frac{b-a}{b_{\text{orig}} - a_{\text{orig}}}\right)$
    acceptăm $S_{[a,c]} + S_{[c,b]}$ ca aproximare pe $[a, b]$
else
    repetăm cele de mai sus recursiv pentru $[a, c]$ şi $[c, b]$
end

- potrivit lui (17), regula trapezului $S_{[a,b]}$ pe intervalul $[a, b]$ satisface formula

$$\int_a^b f(x)dx = S_{[a,b]} - h^3 \frac{f''(c_0)}{12}, \tag{32}$$

pentru un anumit $a < c_0 < b$, unde $h = b - a$

luând c ca fiind mijlocul lui $[a, b]$, putem aplica regula trapezului pentru ambele jumătăţi de interval şi, folosind aceeaşi formulă, obţinem

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= S_{[a,c]} - \frac{h^3}{8}\frac{f''(c_1)}{12} + S_{[c,b]} - \frac{h^3}{8}\frac{f''(c_2)}{12} \\ &= S_{[a,c]} + S_{[c,b]} - \frac{h^3}{4}\frac{f''(c_3)}{12}, \end{aligned} \tag{33}$$

unde c_1 şi c_2 se află în $[a, c]$ şi, respectiv, în $[c, b]$
am aplicat Teorema 1 pentru a contopi termenii de eroare
scăzând (33) din (32), obţinem

$$\begin{aligned} S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]}) &= -\frac{h^3}{4}\frac{f''(c_3)}{12} + h^3\frac{f''(c_0)}{12} \\ &\approx \frac{3}{4}h^3\frac{f''(c_3)}{12}, \end{aligned} \tag{34}$$

unde aproximarea $f''(c_3) \approx f''(c_0)$ a fost făcută
scăzând integrala exactă din ecuaţie, am scris eroarea (aproximativă) în termeni de cantităţi pe care le putem calcula

Exemplul 11

folosiţi cuadratura adaptivă pentru a aproxima integrala

$$\int_{-1}^{1} (1 + \sin e^{3x})dx.$$

Figura 4(a) prezintă rezultatul algoritmului cuadraturii adaptive pentru $f(x)$, cu o toleranţă a erorii de 0.005

deşi sunt necesare 140 de intervale, doar 11 dintre ele se află în regiunea „calmă” $[-1, 0]$

integrala definită aproximativă este 2.502 ± 0.005

într-o a doua rulare, schimbăm toleranţa erorii la 0.5×10^{-4} şi obţinem 2.5008, care este corect cu patru zecimale exacte, calculat pentru 1316 subintervale

- bineînţeles, regula trapezului poate fi înlocuită cu reguli mai sofisticate
- de exemplu, fie $S_{[a,b]}$ regula lui Simpson (18) pe intervalul $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = S_{[a,b]} - \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(c_0). \tag{35}$$

- aplicând regula lui Simpson pentru cele două jumătăţi ale lui $[a, b]$, obţinem

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= S_{[a,c]} - \frac{h^5}{32}\frac{f^{(iv)}(c_1)}{90} + S_{[c,b]} - \frac{h^5}{32}\frac{f^{(iv)}(c_2)}{90} \\ &= S_{[a,c]} + S_{[c,b]} - \frac{h^5}{16}\frac{f^{(iv)}(c_3)}{90}, \end{aligned} \tag{36}$$

  unde am aplicat Teorema 1 pentru a contopi termenii de eroare
- scăzând (36) din (35), obţinem

$$\begin{aligned} S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]}) &= h^5 \frac{f^{(iv)}(c_0)}{90} - \frac{h^5}{16}\frac{f^{(iv)}(c_3)}{90} \\ &\approx \frac{15}{16} h^3 \frac{f^{(iv)}(c_3)}{90}, \end{aligned} \tag{37}$$

- unde facem aproximarea $f^{(iv)}(c_3) \approx f^{(iv)}(c_0)$
- deoarece $S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]})$ este acum de 15 ori eroarea aproximării $S_{[a,c]} + S_{[c,b]}$ pentru integrală, putem să facem noul criteriu

$$|S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]})| < 15 \cdot \mathrm{TOL}, \tag{38}$$

  şi apoi să continuăm ca mai sus
- este tradiţional să înlocuim pe 15 cu 10 în criteriu pentru a face algoritmul mai conservativ
- Figura 4(b) prezintă o aplicare a regulii lui Simpson adaptivă pentru aceeaşi integrală
- integrala aproximativă este 2.500 când se foloseşte o toleranţă de 0.005, cu 20 de subintervale, o diferenţă considerabilă faţă de regula trapezului adaptivă
- descreşterea toleranţei la 0.5×10^{-4} dă aproximarea 2.5008, folosind doar 58 de subintervale