Numerieke Analyse

Prof. Dr. Guido Vanden Berghe

Chapter 8

Numerieke Integratie – Kwadratuurformules

Doelstelling

Numerieke integratie is één van de oudste onderwerpen in numerieke analyse. Er is veel literatuur beschikbaar over dit onderwerp. De bedoeling van dit hoofdstuk is het aanbrengen van numerieke methoden voor het bepalen van de waarden van benoemde integralen. Een variëteit van methoden zal besproken worden. Vooreerst zal aandacht besteed worden aan de methode van de onbepaalde coëfficiënten. Vervolgens zullen de Newton–Cotes formules van het gesloten en open type aan de orde komen: de welbekende trapezium– en Simpson–regel maken deel uit van die klasse formules. De meest nauwkeurige kwadratuurformules van Gauss zullen in detail aangebracht worden. Aandacht zal tevens geschonken worden aan het zgn. Romberg algoritme, dat steunt op het principe van Richardson extrapolatie.

Het doel van een kwadratuurformule is het benaderend berekenen van de numerieke waarde van de benoemde integraal

$$\int_a^b f(x)dx$$

met a en b vaste reële grenzen en $f(x)$ een reële éénwaardige continue functie. Deze werkwijze is aangewezen wanneer $f(x)$ te ingewikkeld is opdat de integraal met de rekenregels van de integraalberekening zou kunnen uitgedrukt worden in termen van bekende reële getallen. Om verscheidene redenen kan het van belang zijn het integrandum te beschouwen als opgesplitst in een produkt van twee functies, nl.

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \qquad \text{i.p.v.} \qquad \int_a^b f(x)dx\,.$$

Hierin is $w(x)$ de z.g. gewichtsfunctie, gedefinieerd in definitie 6.3.2. De kwadratuurformules die we in de verdere paragrafen zullen bespreken, hebben alle de volgende

gedaante :

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \cong \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)\,. \tag{8.1}$$

De x_i zijn abscissen die *verschillend* zijn, reëel en behorend tot het interval $[a, b]$. Ze kunnen éénduidig gerangschikt worden, bv. in stijgende volgorde en niets belet ons te stellen

$$a \leq x_1 < x_2 \ldots < x_n \leq b\,.$$

De coëfficiënten A_k zijn reële getallen die voor gegeven a, b, $w(x)$ en welbepaalde gekozen $x_1\,,\, x_2\,, \ldots,\, x_n$ eens en voor goed berekenbaar zijn. Noteer dat de A_k onafhankelijk zijn van $f(x)$. Vermits het rechterlid in (8.1) een lineaire combinatie is van n waarden van de functie $f(x)$ in n verschillende punten, noemt men dergelijke benadering een *n–puntsformule.*

8.1 Algemene eigenschappen van kwadratuurvergelijkingen

8.1.1 De graad van algebraïsche nauwkeurigheid van een kwadratuurformule

Voor willekeurig gegeven $f(x)$ stelt de kwadratuurformule gewoonlijk slechts een benadering van de waarde van de integraal voor. Evenwel is het bij de door ons beschouwde kwadratuurformules, waarbij $f(x)$ meestal polynomiaal zal benaderd worden, kenmerkend dat de kwadratuurformule de integraal exact voorstelt voor een bepaalde verzameling reële functies, nl. de verzameling van alle reële veeltermen van graad $0, 1, \ldots, N$.

Definitie 8.1.1

Indien de kwadratuurformule

- systematisch de integraal *exact* voorstelt voor alle reële veeltermen van graad $0, 1, \ldots, N$,
- meestal de integraal slechts *benaderend* voorstelt voor alle andere reële functies (d.i. alle reële veeltermen met graad groter dan N en alle niet–polynomiale continue functies) met sporadisch eens een exacte gelijkheid,

dan is N de zgn. *graad van algebraïsche nauwkeurigheid (GVAN).*

Theorema 8.1.1

Opdat (8.1) een GVAN gelijk aan N zou bezitten, is het nodig en voldoende dat

$$\int_a^b w(x)x^j dx = \sum_{k=1}^{n} A_k x_k^j \qquad (j = 0, 1, \ldots, N) \tag{8.2}$$

tezamen met

$$\int_a^b w(x)x^{N+1} dx \neq \sum_{k=1}^{n} A_k x_k^{N+1} \ . \tag{8.3}$$

Bewijs

(a) voldoende

Als (8.2) en (8.3) gelden, dan bezit (8.1) GVAN$= N$.

Beschouw hiertoe een gehele veelterm van graad $m \leq N$ met willekeurige reële coëfficiënten, i.e.

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^{m} c_j x^j \qquad \text{met} \qquad c_m \neq 0 \ ,$$

dan geldt er

$$\begin{aligned}
\int_a^b w(x)p_m(x)dx &= \int_a^b w(x) \sum_{j=0}^{m} c_j x^j dx \\
&= \sum_{j=0}^{m} c_j \int_a^b w(x)x^j dx \\
&= \sum_{j=0}^{m} c_j \sum_{k=1}^{n} A_k x_k^j \qquad \text{(wegens (8.2))} \\
&= \sum_{k=1}^{n} A_k \sum_{j=0}^{m} c_j x_k^j \qquad \text{(herschikken van termen in een som van een eindig aantal termen)} \\
&= \sum_{k=1}^{n} A_k p_m(x_k) \, .
\end{aligned}$$

Vandaar dat voor alle reële veeltermen van graad $m = 0, 1, \ldots, N$ geldt :

$$\int_a^b w(x)p_m(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k p_m(x_k)$$

als (8.2) van kracht is. Rekening houdend met de definitie volgt hieruit dat de GVAN reeds minstens N is. Uit (8.3) zien we dat er ten minste één veelterm van graad $N+1$

bestaat waarvoor de kwadratuurformule niet exact de integraal voorstelt, nl. x^{N+1}. Vandaar dat de GVAN van (8.1) inderdaad N is.

(b) nodige

Is de GVAN van (8.1) gelijk aan N dan gelden (8.2) en (8.3).

Aangezien x^0, x^1, $x^2, \ldots,$ x^N behoren tot de verzameling van alle reële veeltermen van graad $0, 1, \ldots, N$, volgen de strenge gelijkheden (8.2) rechtstreeks uit de definitie van GVAN. Verder moet ook (8.3) gelden, want ware

$$\int_a^b w(x)x^{N+1}dx = \sum_{k=1}^{n} A_k x_k^{N+1} \ ,$$

dan zou dit samen met de gelijkheden (8.2) toelaten de redenering onder (a) te hernemen, uitgaande van een willekeurige veelterm van graad $\leq N+1$ en zou er geconcludeerd worden dat (8.2) exact geldt voor alle reële veeltermen van graad 0 t.e.m. $N+1$. De GVAN van (8.1) zou dan minstens $N+1$ zijn, hetgeen strijdig is met het gegeven. □

8.1.2 Inbouw in de kwadratuurformule van een minimum GVAN

Theorema 8.1.2

Ongeacht de ligging van $x_1, \ldots, x_n$ in $[a, b]$ is het steeds mogelijk bij een n–puntskwadratuurformule A_1, $A_2, \ldots,$ A_n zo te berekenen dat de GVAN$= n-1$. Bovendien is dit equivalent met het benaderen van $f(x)$ onder het integraalteken door de interpolatieveelterm van Lagrange $p_{n-1}(x)$ met verdelingspunten x_1, $x_2, \ldots, x_n$.

Bewijs

Opdat de GVAN van

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \cong \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

minstens $n-1$ zou zijn, is het nodig en voldoende dat

$$\sum_{k=1}^{n} A_k x_k^j = \int_a^b w(x)x^j dx \qquad \text{voor} \qquad j = 0, 1, \ldots, n-1 \ .$$

Dit kan opgevat worden als een lineair stelsel van n vergelijkingen met n onbekenden $A_1,\, A_2, \ldots,\, A_n$. Daaruit kunnen $A_1,\, A_2, \ldots,\, A_n$ éénduidig opgelost worden als het om een stelsel van Cramer gaat. Daartoe dient de coëfficiëntendeterminant onderzocht te worden, i.e. de volgende determinant van Vandermonde

$$\det = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ x_1 & x_2 & \ldots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \ldots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \ldots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i>j}(x_i - x_j) \neq 0 \quad \text{wegens} \quad x_i \neq x_j \quad \text{als} \quad i \neq j\,.$$

Dus de A_i zijn te bepalen en deze uitdrukkingen geplaatst in de kwadratuurformule zullen een GVAN verschaffen groter of gelijk aan $n-1$. Uit de regel van Cramer volgt de algemene vorm van de oplossing

$$A_k = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 & \int_a^b w(x)dx & \ldots & 1 \\ x_1 & x_2 & \ldots & x_{k-1} & \int_a^b xw(x)dx & \ldots & x_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \ldots & x_{k-1}^{n-1} & \int_a^b x^{n-1}w(x)dx & \ldots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} \Big/ \det$$

Wegens de lineariteit van de integraalbewerking alsmede de definitie van een determinant volgt er dat :

$$A_k = \frac{\displaystyle\int_a^b w(x)dx \begin{vmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 & 1 & \ldots & 1 \\ x_1 & x_2 & \ldots & x_{k-1} & x & \ldots & x_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \ldots & x_{k-1}^{n-1} & x^{n-1} & \ldots & x_n^{n-1} \end{vmatrix}}{\det}$$

of

$$A_k = \frac{\int_a^b w(x)dx(x_n - x_1)(x_n - x_2)\ldots(x_n - x)\ldots(x_n - x_{n-1})(x_{n-1} - x_1)\ldots(x_{n-1} - x)\ldots(x_2 - x_1)}{(x_n - x_1)(x_n - x_2)\ldots(x_n - x_k)\ldots(x_n - x_{n-1})(x_{n-1} - x_1)\ldots(x_{n-1} - x_k)\ldots(x_2 - x_1)}$$

of

$$A_k = \frac{\int_a^b w(x)dx(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)}{(x_k - x_1)(x_k - x_2)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)}\,.$$

Merk op dat A_k effectief onafhankelijk is van $f(x)$. Dit herleidt zich formeel wegens (5.7) en (5.8) tot

$$A_k = \int_a^b \frac{w(x)\Psi(x)dx}{(x - x_k)\Psi'(x_k)} \tag{8.4}$$

met dus hier $\Psi(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$ een veelterm van de n^{de} graad. Hiermee rekening houdend is dan

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) &= \sum_{k=1}^{n} \int_a^b \frac{w(x)\Psi(x)dx}{\Psi'(x_k)(x-x_k)} f(x_k) \\ &= \int_a^b w(x) \sum_{k=1}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_k)(x-x_k)} f(x_k)dx\end{aligned}$$

wat wegens (5.9) ook te schrijven is als $\int_a^b w(x)p_{n-1}(x)dx$ met $p_{n-1}(x)$ de Lagrange veelterm door de punten $x_1, \dots, x_n$. Vandaar dat

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \cong \int_a^b w(x)p_{n-1}(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{8.5}$$

□

Opmerking 8.1.1

Merk op dat hier blijkt dat een benadering van de beschouwde integraal bekomen wordt door het integrandum $f(x)$ onder de integraal te vervangen door een veelterm approximatie bekomen m.b.v. het principe van interpolatie. Veeltermbenaderingen van $f(x)$ kunnen ook op andere manieren gerealizeerd worden, bv. door een Taylorveelterm (zie ook paragraaf 6.1)). In die geest en steunend op theorema 6.1.2 is volgende afleiding van een kwadratuurformule zinvol:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx \int_0^1 \sum_{k=0}^{n} \frac{x^{2k}}{k!} dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{(2k+1)k!}\,.$$

Nochtans is het wenselijk algemene werkwijzen te ontwikkelen waarbij enkel functieëvaluaties vereist worden van het integrandum in een reeks knooppunten. Methoden, die steunen op interpolatie vervullen o.m. die wens. Men kan echter ook $f(x)$ onder het integraalteken vervangen door andere veeltermbenaderingen zoals degene bekomen door Hermite interpolatie (zie paragraaf 5.4) en door spline interpolatie (zie paragraaf 5.5)

Voorbeeld 8.1.1

Bepaal een twee-puntskwadratuursformule opgebouwd met een minimale GVAN voor de benadering van $\int_a^b f(x)dx$. Kies bovendien $x_1 = a$ en $x_2 = b$.

Oplossing

Volgens theorema 8.1.2 is de minimale GVAN gelijk aan 1 en wordt

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx = \sum_{k=1}^{2} A_k f(x_k)\,,$$

waarbij

$$A_1 = \int_{x_1}^{x_2} \frac{(x - x_2)}{(x_1 - x_2)} dx \quad \text{en} \quad A_2 = \int_{x_1}^{x_2} \frac{(x - x_1)}{(x_2 - x_1)} dx \,,$$

of

$$A_1 = A_2 = \frac{x_2 - x_1}{2} \,.$$

De bekomen kwadratuurformule luidt

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)] \tag{8.6}$$

□

Voorbeeld 8.1.2

Steunend op theorema 8.1.2 is het mogelijk rechtstreeks formules van de vorm (8.5) te bekomen d.m.v. de *methode van de onbepaalde coëfficiënten.* We kunnen bv., de kwadratuurformule willen opstellen van de vorm

$$\int_0^1 f(x)dx \approx A_1 f(0) + A_2 f(\frac{1}{2}) + A_3 f(1) \,,$$

die minstens een GVAN=2 bezit. Gebruik makend van (8.2) is hiertoe nodig en voldoende dat

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^1 dx = A_1 + A_2 + A_3 \\ \frac{1}{2} &= \int_0^1 x dx = \frac{1}{2} A_2 + A_3 \\ \frac{1}{3} &= \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{4} A_2 + A_3 \end{aligned}$$

De oplossing van dit stelsel van drie vergelijkingen luidt:

$$A_1 = \frac{1}{6} \qquad A_2 = \frac{2}{3} \qquad A_3 = \frac{1}{6}$$

Het is dan ook evident dat die formule exacte waarden zal produceren voor alle integralen met een integrandum van de vorm $f(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$, waarbij c_0, c_1 en c_2 willekeurige constanten zijn. □

Voorbeeld 8.1.3

Beschouw opnieuw de integraal $\int_0^1 f(x)dx$ maar vervang nu onder het integraalteken $f(x)$ door de kubische Hermite veelterm (5.54) door de punten $a = 0$ en $b = 1$, d.i.:

$$\begin{aligned} H_2(x) &= (2x+1)(x-1)^2 f(0) - (2x^3 - 3x^2) f(1) \\ &+ x(1-x)^2 f'(0) + (x^3 - x^2) f'(1)\,. \end{aligned}$$

Dit resulteert in de volgende kwadratuurformule

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &\approx \int_0^1 H_2(x)dx \\ &= \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) + \frac{1}{12}(f'(0) - f'(1)) \end{aligned}$$

Door een eenvoudige substitutie van veranderlijke bekomen we de volgende kwadratuurformule geldig voor algemene $a < b, (h = b - a)$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + \frac{h^2}{12}(f'(a) - f'(b)) \tag{8.7}$$

□

8.2 Kwadratuurformules van Newton–Cotes van het gesloten (open) type

8.2.1 Formalisme

Voor de Newton–Cotes kwadratuurformules worden speciale keuzen gemaakt voor de gewichtsfunctie $w(x)$ en voor de knooppunten x_k, nl.

- de gewichtsfunctie $w(x) = 1$ voor $\forall\, x \in [a, b]$.
- de verdelingspunten worden bepaald door de volgende regel : het interval $[a, b]$ wordt verdeeld in p *gelijke* deelintervallen van lengte Δx, d.i.

  $$\Delta x = \frac{b-a}{p}\,.$$

  Zo ontstaan de volgende verdelingspunten :

  $$x_k = a + \frac{b-a}{p}k = a + k\Delta x \qquad k = 0, 1, \ldots, p \tag{8.8}$$

  en

  $$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{p-1} < x_p = b\,.$$

In tegenstelling tot de algemene beschouwingen uit voorgaande paragrafen worden benevens de inwendige verdelingspunten x_1, x_2, ..., x_{p-1} nu ook de integratiegrenzen expliciet in de kwadratuurformules in acht genomen; vandaar de terminologie kwadratuurformules van het gesloten type. Er zijn dan uiteraard $p+1$ verdelingspunten, zodat we dan hier ook te maken hebben met een $(p+1)$–puntsformule en de indexering voor deze verdelingspunten start bij 0 i.p.v. bij 1. Merk op dat het integratieinterval expliciet in deelintervallen wordt opgesplitst vanaf $p \geq 2$. Evenwel kan $p = 1$ ook in de theoretische ontwikkeling opgenomen worden. Dan zijn er twee verdelingspunten $x_0 = a$ en $x_1 = b$ (zie ook voorbeeld 8.1.1).

Door deze geschetste werkwijze zijn in de kwadratuurformules de verdelingspunten dus vastgelegd en blijven de gewichten te bepalen. We streven hierbij een zo hoog mogelijke GVAN na. Vandaar als eerste stap hiertoe, komt er zoals in vorige paragraaf het volgende stelsel ter bepaling van de A_k :

$$\sum_{k=0}^{p} A_k x_k^j = \int_{x_0}^{x_p} x^j dx \qquad\qquad j = 0, 1, \ldots, p\,. \tag{8.9}$$

Uit (8.4) volgt dan, rekening houdend met $w(x) = 1$:

$$\begin{aligned} A_k &= \int_{x_0}^{x_p} \frac{\Psi(x)dx}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} \\ &= \int_{x_0}^{x_p} \frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_p)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_p)} dx \end{aligned}$$

We kunnen dit hier verder vereenvoudigen door de substituties $x = x_0 + s\Delta x$ en $x_k = x_0 + k\Delta x$. Zo verkrijgen we

$$\begin{aligned} A_k &= \int_0^p \frac{s(s-1)\ldots(s-k+1)(s-k-1)\ldots(s-p)}{k(k-1)\ldots 1(-1)\ldots(k-p)} \Delta x ds \\ &= \Big(\frac{x_p - x_0}{p}\Big) \frac{(-1)^{p-k}}{k!(p-k)!} \int_0^p s(s-1)\ldots(s-k+1)(s-k-1)\ldots(s-p)ds \end{aligned}$$

of

$$A_k = (x_p - x_0) B_k^{(p)}$$

waarbij $B_k^{(p)}$ dimensieloze reële grootheden zijn die eens en voor goed te tabelleren zijn met

$$B_k^{(p)} = \frac{(-1)^{p-k}}{p!\,p} \binom{p}{k} \int_0^p s(s-1)\ldots(s-k+1)(s-k-1)\ldots(s-p)ds\,. \tag{8.10}$$

De integraal is hier steeds integreerbaar gezien het integrandum een veelterm in s is. Aldus kunnen de Newton–Cotes kwadratuurformules van het gesloten type genoteerd worden als :

$$\int_{x_0}^{x_p} f(x)dx \cong (x_p - x_0) \sum_{k=0}^{p} B_k^{(p)} f(x_k) \qquad\qquad p = 1, 2, \ldots \tag{8.11}$$

De $B_k^{(p)}$ coëfficiënten zijn rationale getallen (breuk met gehele teller en noemer), positief of negatief. Laat ons als voorbeeld enkele ervan berekenen :

Voorbeeld 8.2.1

De bepaling van $B^{(p)}$ coëfficiënten is relatief eenvoudig, nl.;

$$\begin{aligned}
B_0^{(1)} &= = -\int_0^1 (s-1)ds = -\Big[\frac{s^2}{2} - s\Big]_0^1 = -\Big[\frac{1}{2} - 1\Big] = \frac{1}{2} \\
B_1^{(1)} &= \int_0^1 s ds = \Big[\frac{s^2}{2}\Big]_0^1 = \frac{1}{2} \\
B_0^{(2)} &= \frac{1}{2!2}\binom{2}{0}\int_0^2 (s-1)(s-2)ds = \frac{1}{4}\int_0^2 (s^2 - 3s + 2)ds \\
&= \frac{1}{4}\Big[\frac{s^3}{3} - \frac{3s^2}{2} + 2s\Big]_0^2 = \frac{1}{4}(\frac{8}{3} - \frac{3}{2}4 + 4) = \frac{1}{6} \\
B_1^{(2)} &= -\frac{1}{2!2}\binom{2}{1}\int_0^2 s(s-2)ds = -\frac{1}{2}\int_0^2 (s^2 - 2s)ds = -\frac{1}{2}\Big[\frac{s^3}{3} - \frac{2s^2}{2}\Big]_0^2 \\
&= -\frac{1}{2}[\frac{8}{3} - 4] = \frac{2}{3} \\
B_2^{(2)} &= \frac{1}{2!2}\binom{2}{2}\int_0^2 s(s-1)ds = \frac{1}{4}\int_0^2 (s^2 - s)ds = \frac{1}{4}\Big[\frac{s^3}{3} - \frac{s^2}{2}\Big]_0^2 \\
&= \frac{1}{4}[\frac{8}{3} - 2] = \frac{1}{6}\,.
\end{aligned}$$

□

Voor de overige $B_k^{(p)}$ coëfficiënten met $p \leq 8$ verwijzen we naar de tabel 6. Uit deze tabel kunnen we de volgende symmetrie eigenschap aflezen : $B_k^{(p)} = B_{p-k}^{(p)}$.

Theorema 8.2.1

De coëfficiënten die in het rechterlid van Newton–Cotes kwadratuurformules optreden vertonen de volgende symmetrie eigenschap:

$$B_k^{(p)} = B_{p-k}^{(p)}$$

Bewijs

Uit de definitie (8.10) volgt :

$$B_{p-k}^{(p)} = \frac{(-1)^k}{p!p}\binom{p}{p-k}\int_0^p s(s-1)\dots(s-p+k+1)(s-p+k-1)\dots(s-p)ds\,,$$

p	$B_k^{(p)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$-\frac{928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$-\frac{4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$-\frac{928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

tabel 6

wat na de substitutie $s \to p - s'$ te schrijven is als

$$\begin{aligned} B_{p-k}^{(p)} &= \frac{(-1)^k}{p!p}\binom{p}{k}\int_p^0 (p-s')(p-s'-1)\dots(-s'+k+1)(-s'+k-1) \\ &\qquad \dots(-s')(-ds') \\ &= \frac{(-1)^k}{p!p}\binom{p}{k}(-1)^p\int_0^p (s'-p)(s'-p+1)\dots(s'-k-1)(s'-k+1) \\ &\qquad \dots s'ds' = B_k^{(p)} \end{aligned}$$

□

Theorema 8.2.2

De coëfficiënten die in het rechterlid van Newton–Cotes kwadratuurformules voorkomen voldoen aan

$$\sum_{k=0}^{p} B_k^{(p)} = 1$$

Bewijs

Deze eigenschap is een rechtstreeks gevolg van het feit dat de GVAN van dergelijke Newton–Cotes kwadratuurformule minstens p is (p=1,2,...). Vandaar dat elke Newton–Cotes formule exact is voor $f(x) = x^0 = 1$, d.i.

$$\int_{x_0}^{x_p} dx = (x_p - x_0) \sum_{k=0}^{p} B_k^{(p)} , \qquad \text{waaruit het gestelde}$$

□

8.2.2 Graad van algebraïsche nauwkeurigheid van de Newton-Cotes formules van het gesloten type

Bij constructie zelf is de GVAN minstens p. De vraag stelt zich nu of de GVAN effectief groter dan p kan zijn. Indien GVAN$= p + 1$ dan zou er exact moeten gelden

$$\sum_{k=0}^{p} A_k x_k^{p+1} = \int_{x_0}^{x_p} x^{p+1} dx \,. \tag{8.12}$$

Is er geen gelijkheid dan is GVAN=p en de A_k coëfficiënten volgen uit het stelsel (8.9). Is er een gelijkheid dan zijn de vergelijkingen van het stelsel (8.9) en de betrekking (8.12) slechts compatibel indien hun eliminant gelijk is aan nul, i.e.

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & \displaystyle\int_{x_0}^{x_p} dx \\ x_0 & x_1 & \dots & x_p & \displaystyle\int_{x_0}^{x_p} x dx \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ x_0^{p+1} & x_1^{p+1} & \dots & x_p^{p+1} & \displaystyle\int_{x_0}^{x_p} x^{p+1} dx \end{vmatrix} \stackrel{?}{=} 0$$

of

$$\int_{x_0}^{x_p} \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_p & x \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ x_0^{p+1} & x_1^{p+1} & \dots & x_p^{p+1} & x^{p+1} \end{vmatrix} dx \stackrel{?}{=} 0$$

of

$$\int_{x_0}^{x_p} (x - x_p) \dots (x - x_0)(x_p - x_{p-1}) \dots (x_p - x_0) \dots (x_1 - x_0) dx \stackrel{?}{=} 0 \,.$$

Indien deze eliminant gelijk nul is dan is er compatibiliteit en dan is GVAN $\geq p + 1$. In het ander geval is er geen compatibiliteit en is GVAN $= p$. We kunnen in de

voorgaande integraal alle van nul verschillende factoren schrappen en dan het gedrag t.o.v. nul onderzoeken van

$$\int_{x_0}^{x_p}(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_p)dx \begin{array}{l} \nearrow \\ \searrow \end{array} \begin{array}{lll} = 0 & \text{GVAN} & \geq p+1 \\ \neq 0 & \text{GVAN} & = p \end{array}$$

wat door rekening te houden met de equidistantie van de x_k punten, d.i. $x = x_0 + s\Delta x$, zich herleidt tot

$$\int_0^p s\Delta x(s-1)\Delta x\dots(s-p)\Delta x\Delta x ds = (\Delta x)^{p+2}\int_0^p s(s-1)\dots(s-p)ds\,.$$

We dienen dus nu enkel het gedrag te onderzoeken van

$$\Im_p = \int_0^p s(s-1)\dots(s-p)ds\,. \tag{8.13}$$

We onderscheiden twee gevallen :

(a) *p oneven*

Na een grondige analyse, die buiten het kader van deze cursus valt, kan aangetoond worden dat de integraal $\Im_p \neq 0$, ja zelfs negatief is. D.w.z. de Newton–Cotes kwadratuurformules van het gesloten type met oneven p hebben een GVAN $= p$;

(b) *p even* : $p = 2m$ $(m = 1, 2, \dots)$ In dit geval leest $\Im_p = \Im_{2m}$ als

$$\Im_{2m} = \int_0^{2m} s(s-1)\dots(s-2m)ds\,,$$

wat na substitutie $s = u + m$ transformeert tot

$$\int_{-m}^{m}(u+m)(u+m-1)\dots u\dots(u-m)du$$
$$= \int_{-m}^{m} u(u^2-1)(u^2-4)\dots(u^2-m^2)du\,.$$

Het integrandum is een oneven graadsveelterm. De integratie geschiedt tussen grenzen die symmetrisch liggen t.o.v. nul; daaruit volgt dat de integraal nul is. Vandaar dat voor p even $(2, 4, \dots)$ de GVAN van de Newton–Cotes kwadratuurformules van het gesloten type groter dan of gelijk aan $(p+1)$ wordt. Uiteraard dienen we nu nog te onderzoeken of de graad niet $(p+2)$ kan worden. Daartoe moeten we de eliminant van het stelsel (8.9) en de betrekking

$$\sum_{k=0}^{p} A_k x_k^{p+2} = \int_{x_0}^{x} x^{p+2}dx$$

testen t.o.v. nul; deze luidt

$$\int_{x_0}^{x_p} dx \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 & 1 \\ x_0 & \dots & x_p & x \\ \vdots & & & \\ x_0^p & \dots & x_p^p & x^p \\ x_0^{p+2} & \dots & x_p^{p+2} & x^{p+2} \end{vmatrix} \stackrel{?}{=} 0$$

Na een grondige analyse blijkt dergelijke integraal ook steeds verschillend van nul te zijn; waardoor we kunnen besluiten dat de GVAN van de Newton–Cotes kwadratuurformules voor even p, gelijk is aan $(p+1)$.

Conclusie

Uit voorgaande blijkt dat het voordeliger is de Newton–Cotes formules van het gesloten type met een *even* aantal deelintervallen te gebruiken, boven degene met een *oneven* aantal deelintervallen.

Voorbeeld 8.2.2

Bepaal de waarden van de integraal

$$\int_1^2 (4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)dx \tag{8.14}$$

m.b.v. een Newton–Cotes formule met $p = 2$ en $p = 3$.

Merk vooreerst op dat de waarde van de integraal rechtstreeks te berekenen valt en gelijk is aan 26. Voor $p = 2$ (even) is de GVAN $= p + 1 = 3$, voor $p = 3$ (oneven) is de GVAN $= p = 3$. In beide gevallen levert de kwadratuurformule een exact resultaat voor de integraal.

(a) $p = 2$;
Uit tabel 6 lezen we af dat

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = (x_2 - x_0)\frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}. \tag{8.15}$$

In ons voorbeeld is $x_0 = 1,\ x_1 = 3/2,\ x_2 = 2$ en

$$\int_1^2 (4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)dx = \frac{1}{6}\Big[(4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=1} + 4(4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=3/2} + (4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=2}\Big] = 26.$$

(b) $p = 3$;
Uit tabel 6 lezen we af dat :

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = (x_3 - x_0)\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}. \tag{8.16}$$

In ons voorbeeld is $x_0 = 1,\ x_1 = 4/3\,,\ x_2 = 5/3\,,\ x_3 = 2$ en

$$\begin{aligned}
&\int_1^2 (4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)dx \\
&= \frac{1}{8}\Big[(4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=1} + 3(4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=4/3} + \\
&\quad 3(4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=5/3} + (4x^3 + 3x^2 + 2x + 1)\Big|_{x=2}\Big] = 26\ .
\end{aligned}$$

Voor $p = 2$ zijn slechts drie functieëvaluaties nodig, terwijl voor $p = 3$ er vier evaluaties moeten uitgevoerd worden. □

8.2.3 Foutformules

Vermits men de Newton–Cotes formules kan afleiden uit de toepassing van de Lagrange interpolatieveelterm als benadering van $f(x)$ in $[x_0\,,\,x_p]$ (zie (8.5)) is het logisch de constructie van foutformules aan te vangen met de beschouwing van deze interpolatieveelterm met bijhorende foutterm (zie formule (5.6)), i.e. aangepast aan de huidige notatie

$$f(x) = p_p(x) + \frac{f^{(p+1)}(\alpha)(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_p)}{(p+1)\,!}\ ,\ x_0 \le x \le x_p \tag{8.17}$$

waarbij α een functie is van x, variërend tussen x_0 en x_p als x tussen dezelfde grenzen varieert. Daarenboven moeten $f(x)$, $f'(x), \ldots,$ $f^{(p+1)}(x)$ in $[x_0,\, x_p]$ reële, enkelvoudige, continue functies van x voorstellen. Integreren we in bovenstaande betrekking beide leden van x_0 tot x_p

$$\int_{x_0}^{x_p} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_p} p_p(x)dx + \int_{x_0}^{x_p} \frac{f^{(p+1)}(\alpha)(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_p)}{(p+1)!}\,dx\,. \tag{8.18}$$

Vermits gelet op (8.5) en (8.12)

$$\int_{x_0}^{x_p} p_p(x)dx = \sum_{k=0}^{p} A_k f(x_k) = (x_p - x_0)\sum_{k=0}^{p} B_k^{(p)} f(x_k), \tag{8.19}$$

is de foutterm (procesfout) bij de kwadratuurformule gegeven door

$$\int_{x_0}^{x_p} \frac{f^{(p+1)}(\alpha)(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_p)}{(p+1)!}\,dx\,. \tag{8.20}$$

Teneinde de foutterm in meer expliciete vorm te vinden, denken we aan de mogelijkheid van toepassing van een middelwaardestelling, nl.

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx\ , \qquad a \le \xi \le b \tag{8.21}$$

waarbij $f(x)$ minstens continu is in $[a, b]$. Een *voldoende* voorwaarde om deze stelling te mogen toepassen is dat $g(x)$ niet van teken verandert in $[a, b]$. Dit toegepast op de bovenstaande foutterm levert :

$$\int_{x_0}^{x_p} \frac{f^{(p+1)}(\alpha(x))(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_p)}{(p+1)!}\,dx$$
$$\frac{f^{(p+1)}(\alpha(\xi))}{(p+1)!}\int_{x_0}^{x_p}(x-x_0)\dots(x-x_p)dx\ ,$$
$$\text{met} \quad x_0 < \xi < x_p \qquad \text{en} \qquad x_0 < \alpha(\xi) < x_p\,. \tag{8.22}$$

Zulks is slechts gewaarborgd voor toepassing als $(x-x_0)\dots(x-x_p)$ niet van teken verandert in $[x_0,\, x_p]$. Men vindt echter op eenvoudige wijze dat

$$\begin{array}{lll} (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_p) & \text{negatief is als} & x_{p-1} < x < x_p \\ & \text{positief is als} & x_{p-2} < x < x_{p-1} \\ & \text{negatief is als} & x_{p-3} < x < x_{p-2} \\ & \text{enz.} & \end{array}$$

Slechts in één geval verandert die uitdrukking niet van teken in $[x_0,\, x_p]$, nl. voor $p = 1$ en slechts dan is de middelwaardestelling van toepassing. In dit bijzonder geval wordt de foutterm

$$\frac{f''(\alpha)}{2!}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)dx = \frac{f''(\alpha)}{2!}(\Delta x)^3\int_0^1 s(s-1)ds =$$
$$\frac{f''(\alpha)}{2}(x_1-x_0)^3\int_0^1(s^2-s)ds = -\frac{1}{12}f''(\alpha)(x_1-x_0)^3\,. \tag{8.23}$$

Aldus verkrijgen we voor $p = 1$, rekening houdend met de $B_k^{(1)}$ coëfficiënten uit tabel 6 als kwadratuurformule

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \;=\; (x_1-x_0)\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2} - \frac{f''(\alpha)}{12}(x_1-x_0)^3\ , \qquad x_0 < \alpha < x_1\ . \tag{8.24}$$

Deze formule is in de literatuur bekend als de trapeziumregel, omwille van de meetkundige interpretatie die men er kan aan hechten (zie figuur 6).
Deze trapeziumregel vertolkt dat de integraal benaderd wordt door het oppervlak tussen x–as, koorde en ophaallijnen.

figuur 6

Als α varieert in $[x_0, x_1]$ dan is $f''(\alpha)$ begrensd, nl. $|f''(\alpha)| < M$; Uit (8.24) volgt :

$$\left| \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx - (x_1 - x_0)\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} \right| < \frac{M}{12}(x_1 - x_0)^3 \tag{8.25}$$

wat ons een maat oplevert voor de bovengrens op de fout. Uit het gedrag van (8.24) volgt tevens dat de GVAN = 1 voor $p = 1$, want $f''(\alpha) = 0$ als $f(x)$ een lineaire functie is van x. Voor $f(x)$ een kwadratische of hogere graadsveelterm in x, is de foutterm steeds verschillend van nul. Dit is in volledige overeenstemming met de algemene beschouwingen uit definitie 8.1.1 omtrent de GVAN.

Voor $p > 1$ dient een fouttermonderzoek doorgevoerd te worden, dat niet steunt op de middelwaardestelling, vermits die niet van toepassing is. Bepaalde methoden steunen op partiële–integratietechnieken, andere doen beroep op zgn. *Peano kernen.*

8.2.4 De foutvoorstelling van Peano

Bij de bespreking van de procesfout bij een benadering van een benoemde integraal door een kwadratuurformule van het type (8.1) is het interessant de fout

$$R(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{8.26}$$

te beschouwen als een lineaire functionaal gedefinieerd over een klasse functies. Lineaire functionalen R bezitten de eigenschap dat

$$R(cf) = cR(f) \tag{8.27}$$

voor elke constante c en

$$R(f + g) = R(f) + R(g)\,. \tag{8.28}$$

Voor de afleiding van de procesfout volgens Peano zullen we vertrekken van een algemenere klasse kwadratuurformules dan degene van Newton-Cotes, m.a.w. we zullen beschouwen dat:

$$\begin{aligned} \int_b^a f(x)dx \;\approx\; & I(f) = \sum_{k=0}^{m_0} a_{k0} f(x_{k0}) + \sum_{k=0}^{m_1} a_{k1} f'(x_{k1}) + \dots \\ & + \sum_{k=0}^{m_n} a_{kn} f^{(n)}(x_{kn}) \end{aligned} \tag{8.29}$$

Voorbeelden hiervan zijn de Newton-Cotes formules waarbij $a_{kj} = 0$ voor $j = 1, \dots, n$ en de formule (8.7) uit voorbeeld 8.1.3 waarbij $a_{kj} = 0$ voor $j = 2, \dots, n$. De procesfout kan dan voorgesteld worden door

$$R(f) = \int_a^b f(x)dx - I(f)\,. \tag{8.30}$$

Theorema 8.2.3 (Theorema van Peano)

Veronderstel $R(P) = 0$ voor alle veeltermen $P \in \Pi_n$, d.w.z. elke veelterm met een graad kleiner of gelijk n wordt exact geïntegreerd door de kwadratuurformule of m.a.w. $GVAN = n$, dan is de procesfout voor alle functies $f \in C^{n+1}[a,b]$ gegeven door:

$$R(f) = \int_a^b f^{(n+1)}(t)K(t)dt\,, \tag{8.31}$$

waarbij

$$K(t) = \frac{1}{n!}R_x[(x-t)_+^n]\,, \tag{8.32}$$

met

$$(x-t)_+^n = \begin{cases} (x-t)^n & \text{als} \quad x \geq t \\ 0 & \text{als} \quad x < t\,, \end{cases} \tag{8.33}$$

en $R_x[(x-t)_+^n]$ staat voor de procesfout voor $(x-t)_+^n$ wanneer die laatste wordt beschouwd als functie van x. De functie $K(t)$ wordt de Peano kern van de operator R genoemd.

Bewijs

Beschouw de Taylorreeksontwikkeling (6.1) voor $f(x)$ rond $x = a$, i.e.

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + E_n(x)\,. \tag{8.34}$$

De restterm (6.3) kan in de volgende gedaante geschreven worden:

$$\begin{aligned} E_n(x) &= \frac{1}{n!}\int_a^x f^{(n+1)}(t)(x-t)^n dt \\ &= \frac{1}{n!}\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt\,. \end{aligned}$$

Nu laten we de lineaire operator R inwerken op (8.34); dit geeft aanleiding wegens $R(P) = 0$ voor alle $P \in \Pi_n$ tot:

$$R(f) = R(E_n(x)) = \frac{1}{n!}R_x\Big(\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt\Big)\,. \tag{8.35}$$

Om nu $R(f)$ verder om te vormen, dienen we de R_x operator te verwisselen met de integratieoperator. Wegens de eigenschappen (8.27)-(8.28) kan bewezen worden dat die beide operatoren commuteren (bewijs valt buiten het kader van deze nota's), zodat

$$\begin{aligned} R(f) &= \frac{1}{n!}\int_a^b f^{(n+1)}(t)R_x(x-t)_+^n dt \\ &= \int_a^b f^{(n+1)}(t)K(t)dt \end{aligned}$$

□

Voorbeeld 8.2.3

We zullen Peano's theorema toepassen op de Newton-Cotes kwadratuurformule van het gesloten type met $p = 2$ voor $a = -1$ en $b = 1$. Dan is $R(f)$ (zie tabel 6) gegeven door

$$R(f) = \int_{-1}^{1} f(x)dx - \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1)) \,.$$

We weten tevens dat elke veelterm $P \in \Pi_3$ exact wordt geïntegreerd; d.w.z. dat het theorema toepasbaar is voor $n = 3$. De Peano kern is in dit geval:

$$\begin{aligned} K(t) &= \frac{1}{6} R_x[(x-t)_+^3] \\ &= \frac{1}{6}\Big[\int_{-1}^{1}(x-t)_+^3 dx - \frac{1}{3}\Big((-1-t)_+^3 + 4(0-t)_+^3 + (1-t)_+^3\Big)\Big] \,. \end{aligned}$$

Door te steunen op de definitie (8.33) vinden we voor $t \in [-1, 1]$ dat

$$\int_{-1}^{1}(x-t)_+^3 dx = \int_{t}^{1}(x-t)^3 dx = \frac{(1-t)^4}{4}$$

en

$$(-1-t)_+^3 = 0 \quad (1-t)_+^3 = (1-t)^3$$

$$(-t)_+^3 = \begin{cases} 0 & \text{als} \quad t \geq 0 \\ -t^3 & \text{als} \quad t < 0 \,. \end{cases}$$

Met deze gegevens kunnen we de Peano kern expliciet afleiden:

$$K(t) = -\frac{1}{72}(1-t)^3(1+3t) \,, \tag{8.36}$$

voor $0 \leq t \leq 1$ en

$$K(t) = -\frac{1}{72}(1+t)^3(1-3t) \,, \tag{8.37}$$

voor $-1 \leq t \leq 0$; □

We wensen op te merken dat de Peano kern $K(t)$ voor een grote klasse van kwadratuurformules een vast teken bezit in het integratieinterval $[a, b]$, d.w.z. het middelwaardetheorema kan toegepast worden, d.i.:

$$R(f) = f^{(n+1)}(\xi) \int_a^b K(t)dt \tag{8.38}$$

voor $\xi \in]a, b[$. Vermits de integraal van $K(t)$ onafhankelijk is van f, kan zijn waarde gemakkelijk bepaald worden door R te laten inwerken bv. op de veelterm $f(x) = x^{n+1}$, d.i

$$\begin{aligned} R(x^{n+1}) &= (n+1)! \int_a^b K(t)dt \\ &= (n+1)! \frac{R(f)}{f^{(n+1)}(\xi)} \end{aligned}$$

of

$$R(f) = \frac{R(x^{n+1})}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \tag{8.39}$$

Voorbeeld 8.2.4

Voor de kwadratuurformule uit voorbeeld 8.2.3 kunnen gemakkellijk natrekken dat $K(t) \leq 0$ voor $-1 \leq t \leq 1$. Tevens weten we dat alle $P \in \Pi_3$ exact geïntegreerd worden. Dit leidt tot

$$R(f) = \frac{R(x^4)}{24} f^{(4)}(\xi)$$

Hierin is

$$R(x^4) = \int_{-1}^{1} x^4 dx - \frac{1}{3} \times 1 - \frac{4}{3} \times 0 - \frac{1}{3} \times 1 = -\frac{4}{15}\,,$$

zodat de procesfout voor die kwadratuurformule wordt

$$-\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$$

□

Door nu de formules afgeleid in voorbeelden 8.2.3 en 8.2.4 te herleiden van het interval $[-1, 1]$ naar het algemene interval $[a, b]$ verkrijgen we de Newton-Cotes kwadratuur formule voor $p = 2$, i.e.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = (x_2 - x_0)\frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6} - \frac{(x_2 - x_0)^5}{2880} f^{(iv)}(\alpha) \quad \text{met } x_0 < \alpha < x_2 \tag{8.40}$$

hetgeen in de literatuur bekend is als *Simpson regel*; ter referentie geven we hier ook het resultaat voor $p = 3$:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = (x_3 - x_0)\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8} - \frac{(x_3 - x_0)^5}{6480} f^{(iv)}(\gamma) \quad \text{met } x_0 < \gamma < x_3\,. \tag{8.41}$$

Merk op dat in beide gevallen de foutterm en in het bijzonder de orde van de afgeleide van het integrandum in overeenstemming is met de corresponderende GVAN van de kwadratuurformule.

8.2.5 Herhaalde toepassing van Newton–Cotes kwadratuurformules van het gesloten type

Niets belet ons bij de praktische berekening van een Riemann integraal in twee fasen te werk te gaan.

(a) het gegeven integratieinterval eerst op te splitsen in een aantal al of niet gelijke deelintervallen, nl.

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{m-1}}^{x_m} f(x)dx\,. \tag{8.42}$$

(b) op elk van de resulterende integralen een Newton–Cotes formule met bepaalde p toe te passen.

Vermits in fase (a) er geen gelijke deelintervallen vereist zijn, kan men de keuze zo maken dat er een sterkere concentratie van intervallen gekozen wordt daar waar $f(x)$ snel van waarde verandert.

Voorbeeld 8.2.5

Het geval $p = 1$

Uit (8.24) volgt

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{m-1}(x_{j+1} - x_j)\frac{f(x_j) + f(x_{j+1})}{2} - \frac{1}{12}\sum_{j=0}^{m-1} f''(\alpha_j)(x_{j+1} - x_j)^3\,.$$

Deze formule wordt relatief eenvoudig wanneer de eerste onderverdeling (fase a) van $[a, b]$ in gelijke deelintervallen is uitgevoerd, nl.

$$x_{j+1} - x_j = \frac{b-a}{m}\,.$$

Dan herleidt bovenstaande formule zich tot

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx \\
&\quad = \frac{b-a}{m}\sum_{j=0}^{m-1}\frac{f(x_j) + f(x_{j+1})}{2} - \frac{(b-a)^3}{12m^3}\sum_{j=0}^{m-1} f''(\alpha_j)\,, \qquad x_j < \alpha_j < x_{j+1} \\
&\quad = \frac{b-a}{2m}\left[f(a) + 2f(x_1) + 2f(x_2)\ldots + 2f(x_{m-1}) + f(b)\right] - \frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\xi)
\end{aligned} \tag{8.43}$$

met $a < \xi < b$ en waarbij $\sum_{j=0}^{m-1} f''(\alpha_j) = mf''(\xi)\,.$ □

Voorbeeld 8.2.6

Het geval $p = 2$

Uit (8.40) volgt

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{m-1}(x_{2j+2} - x_{2j})\frac{f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1}) + f(x_{2j+2})}{6}$$
$$-\frac{1}{2880}\sum_{j=0}^{m-1} f^{(iv)}(\beta_{2j})(x_{2j+2} - x_{2j})^5\,, \qquad x_{2j} < \beta_{2j} < x_{2j+2}\,.$$

Bij het geval van gelijkmatige verdeling in fase (a), nl.

$$x_{2j+2} - x_{2j} = \frac{b-a}{m}$$

wordt bovenstaande relatie

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx \\
&\quad = \frac{b-a}{m}\left[\frac{f(a)}{6} + \frac{2}{3}f(x_1) + \frac{f(x_2)}{6} + \frac{f(x_2)}{6} + \frac{2}{3}f(x_3) + \ldots + \frac{f(b)}{6}\right] \\
&\qquad\qquad -\frac{(b-a)^5}{2880m^5}\sum_{j=0}^{m-1} f^{(iv)}(\beta_{2j}) \\
&\quad = \frac{b-a}{6m}\,[f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \ldots \\
&+ \quad 4f(x_{2m-1}) + f(b)] - \frac{(b-a)^5}{2880m^4}f^{(iv)}(\eta) \qquad (8.44)
\end{aligned}$$

met $a < \eta < b$ en waarbij $\sum_{j=0}^{m-1} f^{(iv)}(\beta_{2j}) = mf^{(iv)}(\eta)\,.$ □

Conclusie

Uit (8.43) en (8.44) volgt dat bij de ontdubbeling van de intervallen na een eerste toepassing, d.w.z. m vervangen door $2m$ in bovenstaande formules,

- bij de trapeziumregel de fout ruwweg gelijk wordt aan 1/4 van de fout bij de eerste toepassing;
- bij de Simpsonregel de fout ruwweg gelijk wordt aan 1/16 van de fout bij de eerste berekening.

8.2.6 Newton–Cotes formules van het open type

We zoeken nu naar een benadering van de numerieke waarde van $\int_{x_0}^{x_p} f(x)dx$ van de vorm :

$$\int_{x_0}^{x_p} f(x)dx \cong \sum_{k=1}^{p-1} C_k f(x_k)$$

waarbij net zoals bij het gesloten type

$$x_k = x_0 + \frac{x_p - x_0}{p} k \,.$$

Het totale integratieinterval wordt hier ook opgedeeld in p gelijke delen, maar in de som in het rechterlid zijn geen bijdragen van de vorm $f(x_0)$ en $f(x_p)$ aanwezig. In de praktijk is $p \geq 3$. We vereisen net zoals voor het gesloten type terug de hoogst mogelijke GVAN die voor een formule van dergelijk type aanvaardbaar is ; de te bepalen coëfficiënten C_k volgen als oplossingen van het volgende stelsel van $(p-1)$ vergelijkingen :

$$\int_{x_0}^{x_p} x^j dx = \sum_{k=1}^{p-1} C_k x_k^j \qquad (j = 0, 1, \ldots, p-2) \tag{8.45}$$

wat een GVAN $\geq p-2$ waarborgt. De oplossing van het stelsel (8.45) verloopt op analoge wijze als beschreven voor de bepaling van de coëfficiënten A_k in paragraaf 8.2.1 en levert dat

$$C_k = (x_p - x_0) D_k^{(p)}$$

met

$$\begin{aligned} D_k^{(p)} &= \frac{(-1)^{p-k-1}}{(p-2)!\,p} \binom{p-2}{k-1} \int_0^p (s-1)(s-2)\ldots(s-k+1)(s-k-1)\ldots \\ &\qquad\qquad (s-p+1)ds \,. \end{aligned} \tag{8.46}$$

De getalwaarden van de coëfficiënten $D_k^{(p)}$ zijn net zoals de coëfficiënten $B_k^{(p)}$ bij het gesloten type eens en voor goed te tabelleren (zie tabel 7). De Newton–Cotes kwadratuurformule van het open type kan dan ook algemeen als volgt genoteerd worden

$$\int_{x_0}^{x_p} f(x)dx \cong (x_p - x_0) \sum_{k=1}^{p-1} D_k^{(p)} f(x_k) \,. \tag{8.47}$$

Net zoals de coëfficiënten $B_k^{(p)}$ bezitten de coëfficiënten $D_k^{(p)}$ een reeks eigenschappen. Zij zijn alle rationaal ; voorts is

$$D_k^{(p)} = D_{p-k}^{(p)} \,. \tag{8.48}$$

p	$D_k^{(p)}$						
3	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
4	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$				
5	$\frac{11}{24}$	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{24}$	$\frac{11}{24}$			
6	$\frac{11}{20}$	$-\frac{14}{20}$	$\frac{26}{20}$	$-\frac{14}{20}$	$\frac{11}{20}$		
7	$\frac{611}{1440}$	$-\frac{453}{1440}$	$\frac{562}{1440}$	$\frac{562}{1440}$	$-\frac{453}{1440}$	$\frac{611}{1440}$	
8	$\frac{460}{945}$	$-\frac{954}{945}$	$\frac{2196}{945}$	$-\frac{2459}{945}$	$\frac{2196}{945}$	$-\frac{954}{945}$	$\frac{460}{945}$

tabel 7

Tevens geldt ook weer

$$\sum_{k=1}^{p-1} D_k^{(p)} = 1\,.$$

Net zoals voor de formules van het gesloten type kan de GVAN voor de formules van het open type meer in detail bestudeerd worden. De resultaten zijn echter zo analoog dat we ze enkel vermelden. Voor een $(p-1)$–puntsformule van het type (8.45) of (8.47) is GVAN $= p-1$ als p even is, en is GVAN $= p-2$ als p oneven is. Ook de foutformules kunnen vanuit een analoog gezichtspunt behandeld worden. Rekening houdend met de coëfficiënten $D_k^{(p)}$ uit tabel 7 krijgen we :

– voor $p = 3$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = (x_3 - x_0)\frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \frac{(x_3 - x_0)^3}{36} f''(\alpha)\,, \qquad x_0 < \alpha < x_3 \tag{8.49}$$

– voor $p = 4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx \;=\; (x_4 - x_0)\frac{2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)}{3} + \frac{7(x_4 - x_0)^5}{23040} f^{(iv)}(\beta) \qquad x_0 < \beta < x_4\,. \tag{8.50}$$

Merk wel op dat de procesfouten weergegeven in (8.49) en (8.50) op een analoge manier kunnen afgeleid worden als in het geval van het gesloten type.

Deze formules worden in praktijk weinig of niet gebruikt bij het berekenen van de numerieke waarde van een convergente integraal. Zij zijn wel nuttig voor gebruik in andere numerieke methoden, bv. in de methode van Milne bij de numerieke integratie van gewone differentiaalvergelijkingen (zie hoofdstuk 9, paragraaf 9.3.3).

8.3 Kwadratuurformules van het Gaussische type of kwadratuurformules met hoogste GVAN

We streven hier uiteraard opnieuw naar een benadering voor een integraal van de gedaante (8.1), m.a.w.

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \cong \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{8.51}$$

waarbij $a \leq x_1 < x_2 \ldots < x_n \leq b$. Een eerste groot verschil met de kwadratuurformules van Newton–Cotes is dat de ligging van de punten $x_1, \ldots, x_n$ willekeurig gelaten wordt. Er wordt slechts geëist dat ze om het even waar in $[a, b]$ zouden gelocaliseerd zijn, ten einde een zo groot mogelijke GVAN de realizeren. Bovendien is doorgaans de gewichtsfunctie $w(x)$ verschillend van een constante, d.w.z. een effectieve functie van x.

De n–puntsformule (8.51) bezit $2n$ vrijheidsgraden, nl. de ligging van de knooppunten x_1, x_2, ..., x_n en de n gewichtscoëfficiënten A_1, $A_2, \ldots,$ A_n. Vandaar de theoretische mogelijkheid om het volgende stelsel vergelijkingen in x_i en A_i voor te stellen :

$$\sum_{k=1}^{n} A_k x_k^j = \int_a^b w(x)x^j dx \qquad\qquad j = 0, 1, \ldots, 2n-1\,. \tag{8.52}$$

Indien men dit stelsel kan oplossen dan weten we uit theorema 8.1.1 dat de GVAN $\geq 2n-1$, wat benaderend tweemaal groter is dan de GVAN van de Newton–Cotes formules. Bovengenoemd stelsel is jammer genoeg niet lineair in de $2n$ onbekenden, zodat men geen zekerheid bezit over het bestaan van een oplossing, noch over de enigheid van de oplossing; daarenboven is er ook geen voor de hand liggende oplossingsmethode. Vandaar voor de oplossing van het probleem, een andere werkwijze die we in een reeks fasen kunnen indelen.

8.3.1 Bepaling van A_1, $A_2, \ldots,$ A_n

Van de $2n$ voorgestelde vergelijkingen (8.52) kunnen we de n eerste beschouwen (d.i. voor $j = 0, 1, \ldots, n-1$) teneinde A_1, A_2, ..., A_n eruit op te lossen, ongeacht de ligging der x_i ($i = 1, \ldots, n$). Dit probleem werd reeds opgelost in paragraaf 8.1.2 en heeft geleid tot

$$A_k = \int_a^b \frac{w(x)\Psi(x)dx}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} \tag{8.53}$$

met $\Psi(x) = (x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_n)$. Hiermee is bij constructie GVAN $\geq n - 1$ reeds bereikt.

8.3.2 Bepaling van de ligging van de verdelingspunten $x_1,\, x_2, \dots,\, x_n$

We zoeken naar een mogelijkheid om de GVAN groter dan $(n - 1)$ te maken. Daartoe beschouwen we in deze paragraaf de verzameling van alle reële veeltermen van graden n, $n + 1, \dots, 2n - 1$ en we beschouwen de kwadratuurformule voor al deze veeltermen, d.w.z. in de algemene formule (8.51) wordt $f(x)$ vervangen door één van deze veeltermen die we $p(x)$ zullen noteren en

$$n \leq \mathrm{gr}(p(x)) \leq 2n - 1\,.$$

Vooreerst construeren we op basis van a priori willekeurig gekozen verdelingspunten $x_1, x_2, \dots, x_n$ de interpolatieveelterm $p_{n-1}(x)$ van Lagrange die bij $p(x)$ behoort. Er ontstaat zeker

$$p(x) = p_{n-1}(x) + \text{foutterm}\,.$$

Er is zeker een foutterm, vermits $\mathrm{gr}(p(x)) \geq n$ en $\mathrm{gr}(p_{n-1}(x)) \leq n - 1$. Steunend op (5.9) kunnen we dit explicieter schrijven als

$$p(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} p(x_k) + s(x)\,. \tag{8.54}$$

Hierin is $s(x)$ een van nul verschillende veelterm waarbij

$$\mathrm{gr}(s(x)) = \mathrm{gr}(p(x))$$

of

$$n \leq \mathrm{gr}(s(x)) \leq 2n - 1\ .$$

Bij constructie zelf is het linkerlid van (8.54) gelijk aan de eerste term van het rechterlid voor $x = x_1,\, x_2,\, \dots,\, x_n$. Vandaar dat

$$s(x_1) = 0\ , \quad s(x_2) = 0\ , \dots\ , \quad s(x_n) = 0\,.$$

D.w.z. dat $s(x)$ deelbaar is door $\Psi(x) = (x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_n)$ of

$$s(x) = \Psi(x) q(x)$$

waarbij voor de quotiëntveelterm $q(x)$

$$0 \leq \mathrm{gr}(q(x)) \leq n - 1\,.$$

Hierdoor herleidt (8.54) zich tot

$$p(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} p(x_k) + \Psi(x)q(x)\,. \tag{8.55}$$

Vermenigvuldig nu beide leden van (8.55) met $w(x)$ en integreren we van a tot b, d.i.

$$\begin{aligned}\int_a^b w(x)p(x)dx &= \int_a^b w(x) \sum_{k=1}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} p(x_k)dx + \int_a^b w(x)\Psi(x)q(x)dx \\ &= \sum_{k=1}^{n} \left(\int_a^b \frac{w(x)\Psi(x)dx}{\Psi'(x_k)(x - x_k)} \right) p(x_k) + \int_a^b w(x)\Psi(x)q(x)dx\end{aligned}$$

wat wegens (8.53) ook te schrijven is als

$$\int_a^b w(x)p(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k p(x_k) + \int_a^b w(x)\Psi(x)q(x)dx\,.$$

Het linkerlid is de integraal van de reële veelterm $p(x)$ die we wensen te berekenen. De eerste term in het rechterlid is de bijhorende kwadratuurformule. Telkens de tweede term in het rechterlid gelijk wordt aan nul is de kwadratuurformule exact. Anders gezegd, wensen we dat (8.51) exact zou gelden voor alle veeltermen van graad kleiner of gelijk $(2n - 1)$ dan moet

$$\int_a^b w(x)\Psi(x)q(x)dx = 0 \tag{8.56}$$

voor alle $q(x)$ behorend tot de verzameling van reële veeltermen met graad $0, 1, \ldots,$ $n - 1$. Dit is de zgn. orthogonaliteitsvoorwaarde waaraan $\Psi(x)$ moet voldoen. Er dient opgemerkt te worden dat het niet uit de voorgaande redenering blijkt waarom de graad van $p(x)$ begrensd wordt door $(2n - 1)$. Uit hetgeen volgt zal blijken dat het niet mogelijk is met een veelterm $\Psi(x)$ van de n^{de} graad te voldoen aan de voorwaarde (8.56) als $q(x)$ een willekeurige reële veelterm van graad n of groter mag zijn, d.w.z. als $\mathrm{gr}(p(x)) > 2n - 1$.

Beschouwen we nu in het interval $[a, b]$ een verzameling orthogonale veeltermen $\{\phi_0(x),\ \phi_1(x), \ldots, \phi_n(x)\}$ gedefinieerd t.o.v. de gewichtsfunctie $w(x)$ die voldoen aan (6.17) met $\gamma_k = 1$, d.i.

$$\int_a^b w(x)\phi_k(x)\phi_j(x)dx = \delta_{jk}\,. \tag{8.57}$$

Vermits nu $\Psi(x)$ een veelterm is van de n^{de} graad, volgt uit theorema 6.3.2 dat deze kan geschreven worden als een lineaire combinatie van $\phi_0,\ \phi_1, \ldots,\ \phi_n$, nl.

$$\Psi(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x) \quad \text{met} \quad c_n \neq 0\,. \tag{8.58}$$

Uitdrukken dat (8.51) een formule is met GVAN $= n$ leidt tot de voorwaarde (8.56) met $q(x)$, in dit geval een willekeurige reële veelterm van graad 0, d.w.z. een willekeurige reële constante of ook $\phi_0(x)$. In dit geval herleidt (8.56) zich, rekening houdend met (8.58) tot

$$\int_a^b w(x)[c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)]\phi_0(x)dx = 0$$

wat wegens (8.57) leidt tot $c_0 = 0$.

Op analoge wijze uitdrukken dat (8.51) een kwadratuurformule is met GVAN gelijk aan $n+1$ leidt tot (8.56) met $q(x)$ een willekeurige veelterm van graad 1, welke steeds te schrijven is als een lineaire combinatie van ϕ_0 en ϕ_1, i.e.

$$q(x) = g_0\phi_0(x) + g_1\phi_1(x) \qquad \text{met} \qquad g_1 \neq 0\,.$$

Hierdoor luidt (8.56), steunend op (8.58) waarin $c_0 = 0$:

$$\int_a^b w(x)[g_0\phi_0(x) + g_1\phi_1(x)][c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)]dx = 0$$

wat wegens (8.57) leidt tot $g_1c_1 = 0$. Hieruit volgt dat ook $c_1 = 0$ daar $g_1 \neq 0$. Dezelfde redenering kan aldus herhaald worden t.e.m. GVAN $= 2n-1$, m.a.w. $\mathrm{gr}(p(x)) = 2n-1$, waaruit $\mathrm{gr}(q(x)) = n-1$, d.i.

$$q(x) = h_0\phi_0(x) + h_1\phi_1(x) + \ldots + h_{n-1}\phi_{n-1}(x) \quad \text{met} \quad h_{n-1} \neq 0$$

waarbij reeds uit het voorgaande werd afgeleid dat $c_0 = c_1 = c_2 = \ldots = c_{n-2} = 0$. Aldus luidt (8.56) in dit geval

$$\int_a^b w(x)[h_0\phi_0(x) + h_1\phi_1(x) + \ldots + h_{n-1}\phi_{n-1}(x)][c_{n-1}\phi_{n-1} + c_n\phi_n]dx = 0\,,$$

waaruit wegens (8.57) $h_{n-1}c_{n-1} = 0$, en dus $c_{n-1} = 0$. Dergelijke redenering toont dan dat

$$\Psi(x) = c_n\phi_n(x)\,, \tag{8.59}$$

d.w.z. de te nemen verdelingspunten $x_1, x_2, \ldots, x_n$ zijn dus de wortelpunten van $\phi_n(x) = 0$. Uit theorema 6.4.3 weten we bovendien dat deze n wortelpunten verschillend zijn en alle liggen in het interval $[a, b]$. Merk tevens op dat indien men bovenstaande werkwijze zou verder zetten tot GVAN $= 2n$, we een reële veelterm $q(x)$ moeten beschouwen van de graad n, nl.

$$q(x) = s_0\phi_0(x) + s_1\phi_1(x) + \ldots + s_n\phi_n(x) \qquad \text{met} \qquad s_n \neq 0$$

waardoor (8.56) aanleiding zou geven tot

$$\int_a^b w(x)[s_0\phi_0(x) + s_1\phi_1(x) + \ldots + s_n\phi_n(x)]c_n\phi_n(x)dx = 0$$

of

$$s_n c_n = 0\,.$$

Dit leidt tot een strijdig resultaat omdat noch s_n, noch c_n nul kunnen worden, waaruit volgt dat de GVAN van n–punts Gaussische kwadratuurformules inderdaad $(2n-1)$ is, de grootste GVAN die kan bereikt worden.

8.3.3 Omvorming van de formule (8.53) voor A_k

Vooreerst kunnen we opmerken dat zowel in de teller als in de noemer van (8.53) $\Psi(x)$ (resp. $\Psi'(x_k)$) kunnen vervangen worden door $c_n\phi_n(x)$ en $c_n\phi'_n(x_k)$. Vermits bij constructie de coëfficiënt van x^n in $\Psi(x)$ gelijk is aan 1 zullen we in verdere uiteenzetting het volgend verband tussen $\Psi(x)$ en $\phi_n(x)$ aanvaarden :

$$\Psi(x) = \phi_n(x)/r_n$$

waarbij r_n de coëfficiënt is van x^n in $\phi_n(x)$ (zie ook (6.25)), m.a.w. $c_n = 1/r_n$. We noteren hier om verwarring te vermijden de hoogste graadscoëfficiënt in $\phi_n(x)$ als r_n, daar waar we voor diezelfde grootheid in hoofdstuk 6 de notatie A_n hebben gebezigd. Op die wijze is (8.53) reeds te schrijven als

$$A_k = \int_a^b \frac{w(x)\phi_n(x)dx}{\phi'_n(x_k)(x-x_k)}\,.$$

Deze integraalvoorstelling van A_k kan nog gevoelig vereenvoudigd worden door te steunen op de identiteit van Christoffel–Darboux, die geldt voor $\{\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_n\}$ behorend bij $w(x) \geq 0$ (zie theorema 6.4.6)

$$\sum_{j=0}^{n-1} \phi_j(x)\phi_j(y) = \frac{r_{n-1}}{r_n}\,\frac{\phi_n(x)\phi_{n-1}(y) - \phi_{n-1}(x)\phi_n(y)}{(x-y)} \tag{8.60}$$

met x, $y \in$ R of C, $x \neq y$ en r_n, r_{n-1} respectievelijk de coëfficiënten van x^n en x^{n-1} in $\phi_n(x)$ en $\phi_{n-1}(x)$.
Stel nu in (8.60) $y = x_k$ met x_k de numerieke waarde van de k^{de} wortel van $\phi_n(x) = 0$, dan krijgen we

$$\sum_{j=0}^{n-1} \phi_j(x)\phi_j(x_k) = \frac{r_{n-1}}{r_n}\,\frac{\phi_n(x)\phi_{n-1}(x_k)}{(x-x_k)}\,.$$

Hiermee rekening houdend kan de uitdrukking voor A_k als volgt herschreven worden :

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{\phi_n'(x_k)} \int_a^b w(x) \frac{r_n}{r_{n-1}} \frac{1}{\phi_{n-1}(x_k)} \sum_{j=0}^{n-1} \phi_j(x)\phi_j(x_k)dx \\ &= \frac{r_n}{r_{n-1}} \frac{1}{\phi_{n-1}(x_k)\phi_n'(x_k)} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\phi_j(x_k)}{\phi_0(x_k)} \int_a^b w(x)\phi_j(x)\phi_0(x)dx \end{aligned}$$

of

$$A_k = \frac{r_n}{r_{n-1}} \frac{1}{\phi_n'(x_k)\phi_{n-1}(x_k)} \ . \tag{8.61}$$

8.3.4 Foutterm behorend bij de algemene kwadratuurformule van Gauss

Deze foutterm is op grond van theoretisch onderzoek gebleken van dezelfde natuur te zijn als de foutterm bij Newton–Cotes kwadratuurformules, nl. een coëfficiënt vermenigvuldigd met de $(2n)^{de}$ afgeleide van $f(x)$ in een punt η $(a < \eta < b)$. De orde van deze afgeleide is in overeenstemming met de GVAN $= 2n - 1$. De bepaling van deze bovengenoemde coëfficiënt kan op veel wijzen gebeuren. Een mogelijkheid bestaat erin $f(x)$ in de kwadratuurformule te vervangen door een willekeurige reële veelterm van de graad $2n$, d.i.

$$f(x) = c_0x^{2n} + c_1x^{2n-1} + \ldots + c_{2n} \ , \qquad (c_0 \neq 0) \ .$$

Dan is uiteraard $f^{(2n)}(x) = c_0(2n)!$ Mits rekening te houden met bovenstaande opmerking bezit de foutterm de vorm

$$\kappa_n c_0(2n)! \qquad (\kappa_n \text{ nog te bepalen coëfficiënt})$$

wanneer het integrandum een reële veelterm van graad $2n$ is. Nu kunnen we ook echter $f(x)$ Euclidisch delen door $\phi_n(x)$, nl.

$$f(x) = \phi_n(x)Q(x) + r(x) \, , \tag{8.62}$$

waarbij $Q(x)$ een reële veelterm van graad n is en $r(x)$ de restveelterm met graad kleiner of gelijk aan $(n-1)$. Door vermenigvuldiging van beide leden met $w(x)$ en de integratie van a naar b in (8.62) krijgen we

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \int_a^b w(x)\phi_n(x)Q(x)dx + \int_a^b w(x)r(x)dx \ . \tag{8.63}$$

De veelterm $Q(x)$ is ontwikkelbaar in termen van $\{\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_n\}$, nl.

$$Q(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i\phi_i(x)$$

Hierdoor herleidt de eerste integraal in het tweede lid zich tot α_n. Kiest men n verschillende abscispunten $x_1, x_2, \ldots, x_n$ en construeert men de interpolatieveelterm van Lagrange $p_{n-1}(x)$ zodat $p_{n-1}(x_k) = r(x_k)$, dan ontstaat wegens $\mathrm{gr}(r(x)) \leq n-1$ de gelijkheid

$$p_{n-1}(x) = r(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_k)(x-x_k)} r(x_k)\,.$$

Aldus wordt (8.63)

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \alpha_n + \sum_{k=1}^{n} r(x_k) \int_a^b \frac{\Psi(x)w(x)}{\Psi'(x_k)(x-x_k)} dx\,. \tag{8.64}$$

Kiezen we nu voor $x_1, x_2, \ldots, x_n$ de wortels van $\phi_n(x)$ dan is

$$\begin{aligned}
&\Psi(x) = \phi_n(x)/r_n, \\
&\int_a^b \frac{\Psi(x)w(x)}{\Psi'(x_k)(x-x_k)} dx = \int_a^b \frac{w(x)\phi_n(x)}{\phi_n'(x_k)(x-x_k)} dx = A_k, \\
&f(x_k) = r(x_k)\ ,
\end{aligned}$$

en (8.64) is te schrijven als

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + \alpha_n\,.$$

Hieruit blijkt dat α_n de foutterm voorstelt ; α_n is de coëfficiënt van ϕ_n in $Q(x)$, d.w.z. $\alpha_n = c_0/r_n^2$.
Uit gelijkstelling van de twee resultaten bekomen voor de foutterm, volgt er

$$\kappa_n c_0 (2n)! = \frac{c_0}{r_n^2} \qquad \text{of} \qquad \kappa_n = \frac{1}{(2n)!\, r_n^2}\,.$$

Hiermee rekening houdend en tevens gebruik makend van (8.61) wordt de kwadratuurformule van Gauss met foutterm :

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \frac{r_n}{r_{n-1}} \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{\phi_n'(x_k)\phi_{n-1}(x_k)} + \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!\, r_n^2}\,, \quad a < \eta < b\,. \tag{8.65}$$

Voorbeeld 8.3.1(Gauss–Legendre formules)

In voorbeeld 6.4.1 werden de Legendre veeltermen $P_n(x)$ geconstrueerd. Voor deze veeltermen is $w(x) = 1$, $a = -1$, $b = +1$. Zoals gedefinieerd in (6.19) voldoen ze aan de orthogonaliteitsbetrekking

$$\int_{-1}^{1} P_k(x)P_l(x)dx = \frac{2}{2k+1}\,\delta_{kl}\,.$$

Om een orthogonaliteitsbetrekking van de gedaante (8.57) te zijn dienen we $\phi_n(x)$ te definiëren als

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}}\, P_n(x)\,. \tag{8.66}$$

Uit (6.22) en (8.65) kunnen we tevens r_n, de coëfficiënt van x^n in $\phi_n(x)$ bepalen, i.e.

$$r_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \sqrt{\frac{2n+1}{2}}\,.$$

Hiermee rekening houdend herleidt de algemene vorm (8.65) zich tot de volgende Gauss–Legendre kwadratuurformule

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{P_n'(x_k) P_{n-1}(x_k)} + \frac{f^{(2n)}(\eta) 2^{2n+1} (n!)^4}{[(2n)!]^3\,(2n+1)}\,.$$

Wanneer een integraal van de vorm

$$\int_a^b f(x)dx \qquad\qquad (a, b \text{ willekeurig})$$

aangeboden wordt, dan kan deze steeds herleid worden tot een integraal waar de Gauss–Legendre formules kunnen op toegepast worden. Het interval $[a, b]$ kan steeds herleid worden tot een interval $[-1, 1]$ door de substitutie

$$x = \frac{1}{2}(b-a)t + \frac{1}{2}(a+b)$$

en bovenstaande integraal herleidt zich tot

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} F(t)dt\,.$$

□

Voorbeeld 8.3.2(Gauss–Laguerre formules)

De orthogonale Laguerre veeltermen kunnen als volgt gedefinieerd worden (zie ook oefeningen) als

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \tag{8.67}$$

en voldoen aan

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = \delta_{n,m}$$

m.a.w. $w(x) = e^{-x}$, $a = 0$ en $b = \infty$.
Om een orthogonaliteitsbetrekking van de gedaante (8.57) te bekomen, stellen we

$$\phi_n(x) = L_n(x)\,.$$

Hiermee rekening houdend en steunend op (8.67) leidt men gemakkelijk af dat

$$r_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

en de Gauss–Laguerre formule leest

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x)dx = -n^{-1} \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{L_n'(x_k) L_{n-1}(x_k)} + \frac{f^{(2n)}(\eta)(n!)^2}{(2n)!} \tag{8.68}$$

□

Voorbeeld 8.3.3(Gauss–Chebyshev formules)

De Chebyshev veeltermen werden ingevoerd in voorbeeld 6.4.2. Hieruit weten we dat

$$w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}\,, \qquad a = -1 \quad \text{en} \qquad b = +1\,.$$

Bovendien geldt voor elke $n \geq 1$

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x) T_m(x) dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2}\,\delta_{nm}\,.$$

In paragraaf 6.5 hebben we aangestipt dat de coëfficiënt van x^n in $T_n(x)$ 2^{n-1} is. Bovengenoemde eigenschappen in acht nemend kunnen we vooropstellen dat

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, T_n(x) \qquad \text{en} \\ r_n &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, 2^{n-1} \end{aligned}$$

en de formule (8.65) leest in dit bijzonder geval

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)dx}{\sqrt{1-x^2}} = \pi \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{T_n'(x_k) T_{n-1}(x_k)} + \frac{2\pi}{(2n)!\,2^{2n}} f^{(2n)}(\eta)\,. \tag{8.69}$$

In dit geval kennen we de waarden van x_k. Het zijn de wortelpunten van $T_n(x) = 0$, nl. (zie theorema 6.5.1)

$$x_k = \bar{x}_k = \cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)\,, \qquad\qquad (k = 1, 2, \ldots, n)\,.$$

Steunend op formules uit paragraaf (6.5) vinden we

$$T_n'(x_k) = \frac{n\,\sin\Big(\dfrac{2k-1}{2}\,\pi\Big)}{\sin\Big(\dfrac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)} = \frac{n(-1)^{k+1}}{\sin\Big(\dfrac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)}\,.$$

Anderzijds is $T_{n-1}(x_k)$ bij definitie gelijk aan

$$\begin{aligned} T_{n-1}(x_k) &= \cos\Big[(n-1)\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)\Big] \\ &= \cos\Big(\frac{2k-1}{2}\,\pi\Big)\cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big) + \sin\Big(\frac{2k-1}{2}\,\pi\Big)\sin\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big) \\ &= (-1)^{k+1}\sin\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)\,. \end{aligned}$$

Hieruit volgt dat $T_n'(x_k)T_{n-1}(x_k) = n$. Dit introducerend in (8.69) levert

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} f\left(\cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)\right) + \frac{2\pi}{(2n)!\,2^{2n}}\,f^{(2n)}(\eta)\,.$$

Merk op dat hieruit volgt dat in het hier beschouwde geval, alle gewichtscoëfficiënten A_k gelijk en constant zijn, nl. $A_k = \dfrac{\pi}{n}$. □

Opmerking 8.3.1

Voor al deze belangrijke types van Gauss formules, en nog een reeks andere, heeft men eens en voor altijd gedetailleerde lijsten aangelegd, bevattende :

- de rij orthonormale veeltermen $\phi_0(x)$, $\phi_1(x), \ldots, \phi_n(x)$ tot een behoorlijke hoge orde n;
- de nulpunten x_1, $x_2, \ldots,$ x_n van $\phi_n(x)$
- de numerieke waarden der bijbehorende coëfficiënten A_1, $A_2, \ldots,$ A_n, die men in de kwadratuurformules nodig heeft.

Dit alles kan geraadpleegd worden in bv.

- M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, U.S. Government Printing Office (1964)
- A. Stroud and D. Secrest, *Gaussian Quadrature Formulas*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1966).

Ter illustratie geven we hierna respectievelijk de wortels en een reeks A_k waarden behorend bij Legendre en Laguerre kwadratuurformules uit bovengenoemde werken overgenomen (tabellen 8 en 9).

n	x_k	A_k
2	±0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
3	±0.77459 66692 41483	0.55555 55555 55556
	0.00000 00000 00000	0.88888 88888 88889
4	±0.86113 63115 94053	0.34785 48451 37454
	±0.33998 10435 84856	0.65214 51548 62546
5	±0.90617 98459 38664	0.23692 68850 56189
	±0.53846 93101 05683	0.47862 86704 99366
	0.00000 00000 00000	0.56888 88888 88889
6	±0.93246 95142 03152	0.17132 44923 79170
	±0.66120 93864 66265	0.36076 15730 48139
	±0.23861 91869 83197	0.46791 39345 72691

tabel 8 (Gauss–Legendre)

2	0.58578 64376 27	0.85355 33905 93
	3.41421 35623 73	0.14644 66094 07
3	0.41577 45567 83	0.71109 30099 29
	2.29428 03602 79	0.27851 77335 69
	6.28994 50829 37	0.01038 92565 016
4	0.32254 76896 19	0.60315 41043 42
	1.74576 11011 58	0.35741 86924 38
	4.53662 02969 21	0.03888 79085 150
	9.39507 09123 01	0.00053 92947 05561
5	0.26356 03197 18	0.52175 56105 83
	1.41340 30591 07	0.39866 68110 83
	3.59642 57710 41	0.07594 24496 817
	7.08581 00058 59	0.00361 17586 7992
	12.64080 08442 76	0.00002 33699 723858

tabel 9 (Gauss–Laguerre)

8.4 Romberg integratie

Het algoritme dat we in dit hoofdstuk zullen beschrijven draagt de naam van *Romberg*, die als eerste een recursieve vorm voor die methode gaf. We veronderstellen dat een benaderende waarde vereist is voor de integraal

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{8.70}$$

De functie f en het interval $[a, b]$ blijven onveranderd gedurende de verdere discussie. De beschrijving van het algoritme zal in verschillende fasen worden aangebracht.

8.4.1 Recursieve trapeziumregel

Laat ons de herhaalde trapeziumregel waarbij gebruik gemaakt wordt van n gelijke subintervallen met lengte $h = (b - a)/n$ noteren als $T(n)$, d.w.z dat formule (8.43) kan geschreven worden als

$$T(n) = \frac{b-a}{n}\Big[\sum_{i=1}^{n-1} f(a + i\frac{b-a}{n}) + \frac{1}{2}(f(a) + f(b))\Big] \tag{8.71}$$

Beschouwen we nu het interval $[0, 1]$ en de expliciete formules voor $T(1), T(2), T(4)$ en $T(8)$, d.i.

$$\begin{aligned}
T(1) &= \frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(1) \\
T(2) &= \frac{1}{4}f(0) + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) + \frac{1}{4}f(1) \\
T(4) &= \frac{1}{8}f(0) + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{1}{2}) + f(\frac{3}{4})] + \frac{1}{8}f(1) \\
T(8) &= \frac{1}{16}f(0) + \frac{1}{8}[f(\frac{1}{8}) + f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{8}) + f(\frac{1}{2}) \\
&+ f(\frac{5}{8}) + f(\frac{3}{4}) + f(\frac{7}{8})] + \frac{1}{16}f(1)
\end{aligned}$$

Het is duidelijk dat wanneer $T(2n)$ berekend wordt, we voordeel kunnen halen uit het werk verricht bij de berekening van $T(n)$. Enkel de termen optredend in $T(2n)$ die niet reeds aanwezig zijn in $T(n)$ moeten berekend worden. Bijvoorbeeld uit de voorgaande berekeningen zien we dat:

$$\begin{aligned}
T(2) &= \frac{1}{2}T(1) + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) \\
T(4) &= \frac{1}{2}T(2) + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] \\
T(8) &= \frac{1}{2}T(4) + \frac{1}{8}[f(\frac{1}{8}) + f(\frac{3}{8}) + f(\frac{5}{8}) + f(\frac{7}{8})]\,.
\end{aligned}$$

Theorema 8.4.1

Met $h = (b-a)/2n$ kan de algemene formule geldig voor elk interval $[a,b]$ als volgt genoteerd worden:

$$T(2n) = \frac{1}{2}T(n) + h[f(a+h) + f(a+3h) + f(a+5h) + \ldots + f(a+(2n-1)h)]$$

of

$$T(2n) = \frac{1}{2}T(n) + h\sum_{i=1}^{n} f(a+(2i-1)h)\,. \tag{8.72}$$

Bewijs

We bewijzen formule (8.72) door vooreerst $T(2n)$ te schrijven in termen van $T(n)$, i.e.

$$T(2n) = \frac{1}{2}T(n) + [T(2n) - \frac{1}{2}T(n)]$$

Door gebruik te maken van (8.71) kan de uitdrukking tussen rechte haakjes geschreven worden als:

$$T(2n) - \frac{1}{2}T(n) = h\sum_{i=1}^{2n-1} f(a+ih) - h\sum_{i=1}^{n-1} f(a+2ih) = h\sum_{i=1}^{n} f(a+(2i-1)h)\,.$$

Vermits elke term in de tweede som van de vorm $f(a+2ih)$ is, worden door de termen uit die tweede som alle even-genummerde termen in de eerste som geëlimineerd. In de resulterende som, wordt het bereik van i bekomen door vast te stellen dat in de eerste som de eerste oneven-genummerde term $f(a+h)$ is en de laatste overgebleven term $f(a+(2n-1)h)$. □

De integraal I kan nu benaderd worden door een recursieve trapeziumregel. Als er 2^n gelijke subintervallen zijn, levert (8.72) die regel, nl.

$$T(2^n) = \frac{1}{2}T(2^{n-1}) + \frac{b-a}{2^n}\sum_{i=1}^{2^{n-1}} f(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^n}).$$

8.4.2 Het algoritme van Romberg

De recursieve trapeziumregel wordt gebruikt in het Romberg algoritme. Laat $R(n,0)$ een notatie zijn voor de trapeziumregel met 2^n subintervallen. Dan is

$$\begin{cases} R(0,0) = \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)] \\ \\ R(n,0) = \frac{1}{2}R(n-1,0) + \dfrac{b-a}{2^n}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{n-1}} f(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^n}) \end{cases} \tag{8.73}$$

De schattingen $R(0,0), R(1,0), R(2,0), \ldots, R(M,0)$ worden berekend voor een niet te grote waarde van M, en er zijn geen duplicaten in de functie evaluaties. In de rest van het Romberg algoritme dienen bijkomende waarden $R(n,m)$ berekend te worden. Al deze waarden kunnen geïnterpreteerd worden als benaderingen van de integraal I. Meer evaluaties van het integrandum f zijn niet noodzakelijk na de berekening van het element $R(M,0)$. De opeenvolgende kolommen van de R-matrix voor $n \geq 1$ en $m \geq 1$ worden geconstrueerd met de volgende formule (de afleiding van die formule volgt in de volgende paragraaf)

$$R(n,m) = R(n,m-1) + \frac{1}{4^m - 1}[R(n,m-1) - R(n-1,m-1)] \tag{8.74}$$

De berekening is zeer eenvoudig. De bedoeling is een tabel op te bouwen van de vorm

$$\begin{array}{lllllll}
R(0,0) & & & & & & \\
R(1,0) & R(1,1) & & & & & \\
R(2,0) & R(2,1) & R(2,2) & & & & \\
R(3,0) & R(3,1) & R(3,2) & R(3,3) & & & \\
R(4,0) & R(4,1) & R(4,2) & R(4,3) & R(4,4) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
R(M,0) & R(M,1) & R(M,2) & R(M,3) & R(M,4) & \ldots & R(M,M)
\end{array}$$

8.4.3 Afleiding van formule (8.74)

Het Romberg integratiealgoritme steunt op de zg. *Euler-Maclaurin* formule. Deze laatste formule steunt op eigenschappen van *Bernoulli veeltermen*. De Bernoulli veeltermen vormen een oneindige rij met vele bruikbare eigenschappen. De laagste-orde veeltermen zijn:

$$\begin{aligned}
B_0(t) &= 1 \\
B_1(t) &= t - \frac{1}{2} \\
B_2(t) &= t^2 - t + \frac{1}{6} \\
B_3(t) &= t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{1}{2}t.
\end{aligned}$$

Zij worden gedefinieerd door de vergelijkingen

$$\sum_{k=0}^{n} \binom{n+1}{k} B_k(t) = (n+1)t^n \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)\,. \tag{8.75}$$

Voorbeeld 8.4.1

Bepaal $B_0(t)$ en $B_1(t)$ uit (8.75)

Oplossing

Vermits

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}$$

halen we uit (8.75) voor $n = 0$ dat $B_0(t) = 1$. Voor $n = 1$ volgt uit (8.75) dat

$$B_0(t) + 2B_1(t) = 2t$$

waaruit $B_1(t) = t - \dfrac{1}{2}$ □

Het volgende theorema somt de eigenschappen van de Bernoulli veeltermen op, die we voor de afleiding van het Romberg algoritme en de Euler-Maclaurin formule nodig hebben.

Theorema 8.4.2

De Bernoulli veeltermen hebben de volgende eigenschappen:

(i) $B'_n = nB_{n-1} (n \geq 1)$

(ii) $B_n(t+1) - B_n(t) = nt^{n-1} (n \geq 2)$

(iii) $B_n(t) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} B_k(0) t^{n-k}$

(iv) $B_n(1-t) = (-1)^n B_n(t)\,.$

Bewijs

Betrekking (i) wordt bewezen door inductie. Het geval $n = 1$ is verifieerbaar uit het feit dat $B_1(t) = t - \dfrac{1}{2}$ en $B_0(t) = 1$. Onderstel dat $B'_k = kB_{k-1}$ voor $k = 1, 2, \ldots, n-1$. Dan bekomen we door vergelijking (8.75) af te leiden en opnieuw gebruik te maken van vergelijking (8.75) dat:

$$\sum_{k=1}^{n} \binom{n+1}{k} B'_k(t) = n(n+1)t^{n-1} = (n+1) \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k(t)\,. \tag{8.76}$$

M.b.v. de inductiehypothese kan vergelijking (8.76) in de volgende vorm gebracht worden:

$$(n+1)B'_n + \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n+1}{k} kB_{k-1} = (n+1) \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k\,.$$

Door beide leden te delen door $n+1$ en gebruik te maken van de identiteit

$$\frac{k}{n+1}\binom{n+1}{k} = \binom{n}{k-1}$$

verkrijgen we:

$$B_n' + \sum_{k=1}^{n-1}\binom{n}{k-1}B_{k-1} = \sum_{k=0}^{n-1}\binom{n}{k}B_k\,.$$

Na schrapping van gelijke termen bekomen we (i).

Om vergelijking (ii) te bewijzen gebruiken we (i) in herhaling, d.i.

$$\begin{aligned}
B_n''(t) &= n(n-1)B_{n-2}(t)\\
B_n'''(t) &= n(n-1)(n-2)B_{n-3}(t)\\
&\vdots\\
B_n^{(k)}(t) &= n(n-1)\ldots(n-k+1)B_{n-k}(t)\,.
\end{aligned}$$

Aldus luidt de Taylorreeks voor B_n als volgt:

$$B_n(t+h) = \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}B_n^{(k)}(t)h^k = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}B_{n-k}(t)h^k\,. \tag{8.77}$$

Geef hierin h de waarde 1 en gebruik de identiteit

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}$$

en vergelijking (8.75) om vergelijking (ii) te bekomen, i.e.:

$$\begin{aligned}
B_n(t+1) &= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}B_k(t) = B_n(t) + \sum_{k=0}^{n-1}\binom{n}{k}B_k(t)\\
&= B_n(t) + nt^{n-1}\,.
\end{aligned}$$

Door $t=0$ en $h=t$ in te voeren in (8.77), bekomen we vergelijking (iii).

Om vergelijking (iv) af te leiden, gebruiken we (ii) met t vervangen door $-t$. Het resultaat is

$$\begin{aligned}
B_n(1-t) - B_n(-t) &= n(-1)^{n-1}t^{n-1}\\
&= (-1)^{n-1}[B_n(t+1) - B_n(t)]\,.
\end{aligned}$$

Wanneer dit wordt geschreven in de vorm

$$(-1)^n B_n(t+1) - B_n(-t) = (-1)^n B_n(t) - B_n(1-t) \equiv F(t)$$

herkennen we hierin een vergelijking van het type $F(1+t) = F(t)$, welke impliceert dat F een periodieke functie is met periode 1. Vermits F een veelterm is moet het derhalve een constante zijn, d.w.z.

$$(-1)^n B_n(t) - B_n(1-t) = c_n \,.$$

Na afleiding van die vergelijking verkrijgt men door gebruik te maken van (i)

$$(-1)^n B_n'(t) + B_n'(1-t) = (-1)^n n B_{n-1}(t) + n B_{n-1}(1-t) = 0 \,,$$

wat equivalent is met (iv). □

Theorema 8.4.3

De functie $G(t) = B_{2n}(t) - B_{2n}(0)$ bezit geen wortelpunten in het open interval $]0,1[$.

Bewijs

We zetten $t = 0$ in vergelijkingen (ii) en (iv) van het voorgaande theorema. Dit resulteert in:

$$B_n(0) = B_n(1) = (-1)^n B_n(0) \,,$$

wat betekent dat $B_3(0) = B_5(0) = B_7(0) = \ldots = 0$. Veronderstel nu dat G een nulpunt bezit in $]0,1[$. Vermits $G(0) = G(1) = 0$ zien we d.m.v. Rolle's theorema dat G' minstens twee nulpunten bezit in $]0,1[$. Vermits B_{2n-1} een veelvoud is van G', bezit B_{2n-1} ook minstens twee nulpunten in $]0,1[$. Maar B_{2n-1} verdwijnt ook bij 0 en 1, zodat B_{2n-1}' minstens drie nulpunten bezit in $]0,1[$. Daaruit volgt dat B_{2n-2} ook minstens drie nulpunten bezit in $]0,1[$. Voort redenerend op die wijze, kunnen we concluderen dat B_k, voor oneven indices $k < 2n$, tenminste twee nulpunten moet bezitten in $]0,1[$. Zo ook bezit B_3 minstens twee nulpunten in $]0,1[$ alsook de twee nulpunten in 0 en 1. Dit is onmogelijk, vermits B_3 een kubische veelterm is. □

Theorema 8.4.4

Als de functie f $2n$ continue afgeleiden bezit in $[0,1]$, dan is

$$\int_0^1 f(t)dt = \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{b_{2k}}{(2k)!}[f^{(2k-1)}(1) - f^{(2k-1)}(0)] + R \tag{8.78}$$

waarbij

$$R = -\frac{b_{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \quad (0 < \xi < 1) \quad \textit{en} \quad b_k = B_k(0)$$

de Bernoulli getallen zijn. Deze formule is bekend als de Euler-Maclaurin formule.

Bewijs

Uit vergelijking (i) van theorema 8.4.2, weten we dat

$$B_n(t) = \frac{1}{n+1} B'_{n+1}(t)\,.$$

Door gebruik te maken van die formule en van partiële integratie, kunnen we schrijven dat:

$$\int_0^1 f(t)dt = \int_0^1 f(t)B_0(t)dt = B_1(t)f(t)\Big|_0^1 - \int_0^1 B_1(t)f'(t)dt\,. \tag{8.79}$$

Vermits $B_1(1) = \frac{1}{2}$ en $B_1(0) = -\frac{1}{2}$ kan (8.79) in de volgende vorm geschreven worden:

$$\int_0^1 f(t)dt = \frac{1}{2}[f(1) + f(0)] - \int_0^1 B_1(t)f'(t)dt\,.$$

De integratie in die vergelijking kan opnieuw uitgevoerd worden m.b.v. partiële integratie zodat

$$\int_0^1 f(t)dt = \frac{1}{2}[f(1) + f(0)] - \frac{b_2}{2}[f'(1) - f'(0)] + \frac{1}{2}\int_0^1 B_2(t)f''(t)dt\,.$$

Dit proces kan verder gezet worden en vermits we weten dat

$$B_n(0) = B_n(1) = b_n$$

en

$$b_3 = b_5 = b_7 = \ldots = 0\,,$$

verkrijgen we na $2n$ stappen

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(t)dt &= \frac{1}{2}[f(1) + f(0)] - \sum_{k=1}^{n} \frac{b_{2k}}{(2k)!}[f^{(2k-1)}(1) - f^{(2k-1)}(0)] \\ &+ \frac{1}{(2n)!}\int_0^1 B_{2n}(t)f^{(2n)}(t)dt\,.\end{aligned}$$

De laatste term in de som kan weergegeven worden in de vorm:

$$\frac{b_{2n}}{(2n)!}[f^{(2n-1)}(1) - f^{(2n-1)}(0)] = \frac{b_{2n}}{(2n)!}\int_0^1 f^{(2n)}(t)dt\,.$$

Dit laat toe de formule te schrijven zoals weergegeven in de formulering van het theorema; nochtans is de restterm nu:

$$R = \frac{1}{(2n)!}\int_0^1 [B_{2n}(t) - b_{2n}]f^{(2n)}(t)dt\,.$$

Uit theorema 8.4.3 weten we dat de functie $B_{2n}(t) - b_{2n}$ niet van teken verandert in $]0,1[$. Derhalve is het middelwaardetheorema voor integralen toepasbaar en is R te schrijven als

$$R = \frac{1}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \int_0^1 [B_{2n}(t) - b_{2n}] dt \,.$$

Vermits $B_{2n} = B'_{2n+1}/(2n+1)$ en vermits $B_{2n+1}(t)$ nul is bij $t = 0$ en $t = 1$, bekomen we finaal

$$R = -\frac{b_{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \,.$$

□

Om nu de oorsprong van vergelijking (8.74) te verklaren vertrekken we van de Euler-Maclaurin formule (8.78), i.e.

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t)dt &= \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)] \\ &- A_{2m} f^{(2m)}(\xi_0) \,, \end{aligned} \tag{8.80}$$

waarbij ξ_0 een punt is tussen 0 en 1. Uit het voorgaande weten we dat de A_k in relatie staan tot de Bernoulli getallen. Uit die basisformule kunnen we het volgende in twee stappen bekomen: pas vergelijking (8.80) toe op de functie g gedefineerd als $g(t) = f(x_i + ht)$ met $h = x_{i+1} - x_i$ en ga in de resulterende integraal over op de nieuwe veranderlijke $t = (x - x_i)/h$. Dit levert:

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx &= \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})] \\ &+ \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k} h^{2k} [f^{(2k-1)}(x_i) - f^{(2k-1)}(x_{i+1})] \\ &- A_{2m} h^{2m+1} f^{(2m)}(\xi_i) \,. \end{aligned} \tag{8.81}$$

We laten de som operatie $\sum_{i=0}^{2^n-1}$ inwerken op beide leden van (8.81). Als $x_i = a + ih$ voor $0 \leq i \leq 2^n$ en $h = (b-a)/2^n$, dan

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{2^n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \\ &+ \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k} h^{2k} [f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)] \\ &- A_{2m}(b-a) h^{2m} f^{(2m)}(\xi) \,, \end{aligned} \tag{8.82}$$

waarbij $\xi \in]a,b[$. Voor de bepaling van de vorm van de foutterm hebben we dezelfde techniek gebruikt als bij de afleiding van (8.43) en (8.44). De eerste term in (8.82) is de trapeziumbenadering voor I, waarbij subintervallen met lengte $h = (b-a)/2^n$ gebruikt worden. D.w.z. dat vergelijking (8.82) ons leert dat

$$I = R(n,0) + c_2h^2 + c_4h^4 + c_6h^6 + \ldots + c_{2m-2}h^{2m-2} + c_{2m}h^{2m}f^{(2m)}(\xi)\,, \qquad (8.83)$$

met $f \in C^{2m}[a,b]$ en $\xi \in]a,b[$ en $R(n,0)$ gedefinieerd in (8.73). Deze vergelijking is geldig voor willekeurige h en de coëfficiënten $c_2, c_4, \ldots, c_{2m}$ zijn onafhankelijk van h. Vermits vergelijking (8.83) een speciaal geval is van vergelijking (7.32) hebben we onmiddellijk (8.74) door toepassing van de Richardson's extrapolatieanalyse en rekening houdend met het resultaat (7.36), d.i.

$$R(n,m) = \frac{4^m}{4^m-1}R(n,m-1) - \frac{1}{4^m-1}R(n-1,m-1)\,,$$

wat ook in de vorm (8.74) kan neergeschreven worden.

Voorbeeld 8.4.2

Bereken m.b.v het Romberg algoritme een benadering voor

$$\int_0^\pi \sin x dx\,.$$

Beperk M tot 5.

Oplossing

Uit (8.73) berekenen we $R(0,0)$ tot $R(5,0)$, d.i.

$$\begin{aligned}
R(0,0) &= \frac{\pi}{2}[\sin 0 + \sin \pi] = 0;\\
R(1,0) &= \frac{1}{2}[R(0,0) + \pi \sin\frac{\pi}{2}] = 1.57079633;\\
R(2,0) &= \frac{1}{2}[R(1,0) + \frac{\pi}{2}(\sin\frac{\pi}{4} + \sin\frac{3\pi}{4})] = 1.89611890;\\
R(3,0) &= \frac{1}{2}[R(2,0) + \frac{\pi}{4}\\
&\times\ (\sin\frac{\pi}{8} + \sin\frac{3\pi}{8} + \sin\frac{5\pi}{8} + \sin\frac{7\pi}{8})] = 1.97423160;\\
R(4,0) &= 1.99357034;\\
R(5,0) &= 1.99839336\,.
\end{aligned}$$

Aan de hand van (8.74) worden dan de overige R-waarden gegenereerd; deze zijn weergegeven in volgende tabel.

□

0					
1.57079633	2.09439511				
1.89611890	2.00455976	1.99857073			
1.97423160	2.00026917	1.99998313	2.00000555		
1.99357034	2.00001659	1.99999975	2.00000001	1.99999999	
1.99839336	2.00000103	2.00000000	2.00000000	2.00000000	2.00000000

Algemene nota

Het onderwerp *Numerieke Integratie* is één van de oudste uit de numerieke analyse en er bestaat een zeer grote literatuur over deze materie. Niettemin verschijnen er nog steeds en zeer frequent nieuwe wetenschappelijke werken over dit onderwerp. Vele nieuwe resultaten leveren methoden voor speciale klassen van problemen, zoals bijvoorbeeld algoritmen voor integranda met een oscillerend karakter. Een uitstekend overzicht van het reeds bekende werk wordt geboden in het boek van *P.J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration, Computer Science and Applied Mathematics, 1984*. Het bezit een zeer uitgebreide bibliografie, een verzameling computerprogramma's en vele methoden voor zeer speciale vormen van integralen. Het bijzonder gebied van meerdimensionale integratie, welke niet aan bod gekomen is in deze nota's, is veel minder ontwikkeld. Er wordt wel zeer actief wetenschappelijk onderzoek op verricht. Numerieke integratiepakketten zijn opgenomen in de NAG-bibliotheek en een speciaal pakket voor integratie nl. *QUADPACK* is sinds enkele jaren beschikbaar (*R. Piessens, E. De Doncker, C. Überhuber and D. Kahaner, QUADPACK, A quadrature subroutine package, series in computational Math. 1, Springer-Verlag, Berlin 1983*).

Opnieuw dook hier in dit hoofdstuk de naam *Newton* op. Bemerk dat we reeds algoritmen en methoden van zijn hand hebben geïntroduceerd in de hoofdstukken over wortelbepaling en interpolatieveeltermen. Hier is zijn naam gekoppeld aan deze van Cotes. *Roger Cotes* (1682-1716) werd geboren in Leicester en stierf vrij jong te Cambridge. Hij kreeg zijn opleiding aan het befaamde Trinity College te Cambridge. Hij was een leerling van Newton en van 1709 tot 1713 besteedde hij hoofdzakelijk zijn tijd aan de voorbereiding van de tweede uitgave van de *Principia*, het basiswerk voor de hedendaagse fysica. Postuum zijn de werken van Cotes uitgegeven in 1722 onder de titels *Harmonia Mensurarum* en *Opera Miscellanea*. Een groot deel van de Harmonia Mensurarum wordt gewijd aan de vereenvoudiging en integratie van rationale algebraïsche uitdrukkingen.

Ook *Gauss* kwam hier ook opnieuw voor met een zeer frequent gebruikte methode voor numerieke integratie. We bespraken reeds theorieën van hem voor de oplossing van stelsels lineaire vergelijkingen, over de schrijfwijze van de interpolatieveelterm in termen van machten van centrale differenties en over zijn bijdrage aan het kleinste kwadratenvraagstuk. Hieruit blijkt nogmaals, zoals het ook het geval was bij Newton, dat het onderzoeksgebied van wiskundigen/ natuurkundigen vroeger zeer uitgebreid was. In veel gevallen gaven zij nieuwe impulsen aan. Gauss kan gezien worden als één van de laatsten wiens interessegebieden zo

universeel waren.

Er zijn verschillende grote wiskundigen met de naam Bernoulli bekend. Zij waren allen met elkaar verwant, en waren allen afkomstig uit Bazel. Hun academische carrière speelde zich hoofzakelijk af aan de universiteit van Bazel. De stamvader van dit geslacht was *James* of *Jacob Bernoulli* (1687-1705). Deze wiskundige realizeerde zich zeer vlug de kracht van het infinitesimaal rekenen als instrument in de analyse. Hij publiceerde vele wetenschappelijke werken. In *Ars Conjectandi*, uitgegeven in 1713 werden de fundamentele principes over waarschijnlijkheidsrekenen uiteengezet; in dit werk werden de getallen gedefinieerd, die later als de Bernoulli getallen werden aangegeven.

Leonhard Euler (1707-1783) behoorde ook tot de school van wiskundigen uit Bazel. Hij was de zoon van een Lutheraanse predikant. Hij werd opgeleid in zijn geboortestad Bazel onder de leiding van *John Bernoulli*, de jongere broer van James. Hij vormde met diens zonen, Daniel en Nicholas, een vriendengroep voor het leven. Het werk van Euler kan als volgt opgesomd worden: hij creëerde een groot gedeelte van de analyse en herdacht bijna alle takken van de pure wiskunde, die toen bekend waren. Hij vulde vele details op, voegde nieuwe bewijzen toe en herschikte alles in een consistent geheel.

Thomas Simpson (1710-1761) behoorde tot de Engelse school. Zijn vader was een wever in Leicestershire en hij verwierf zijn wiskundige kennis dank zij eigen inspanningen. Zijn wiskundige interesse werd het eerst gewekt door de zonneëclips die plaats vond in 1724. Toen gaf hij het weven op en door constant en hard werken bestudeerde hij als autodidact de toen bekende wiskunde. In 1735 was hij in staat verschillende open vragen op te lossen welke zich situeerden in het gebied van het infinitesimaalrekenen. Toen verhuisde hij naar Londen en in 1743 werd hij aangesteld als leraar wiskunde in Woolwich, een positie die hij bleef innemen tot aan zijn dood. Hij schreef een groot aantal wetenschappelijke werken. Zijn werk situeerde zich in verschillende takken van de wetenschappen, nl. in de fysica, sterrenkunde, wiskunde en in het bijzonder in de analyse, meetkunde en algebra. Hij was in zijn werk duidelijk beïnvloed door Newton en medewerkers.

G.Peano en *W. Romberg* zijn wiskundigen van deze eeuw. De Italiaan *Guiseppe Peano* (1858–1932) werkte aan de universiteit van Turijn. Hij werd bekend omwille van zijn bijdragen tot de formele logica, vooral voor het systeem van axioma's, dat zijn naam draagt. I.v.m. fouttermen bij kwadratuurformules kunnen we verwijzen naar twee korte artikelen:

- Resto nelle formule di quadratura expresso con un integrale definito, Atti Accad. Nat. Lincei. Rend. 22 (1913) 562–569.
- Residuo in formulas de quadratura, Mathesis 39 (1914) 5–10

Hij schreef tevens een reeks van andere artikelen over problemen in de numerieke analyse. Het werk van de Skandinaviër Romberg is van recentere datum. Zijn recursieve manier om betere waarden te bekomen voor de waarde van een benoemde integraal is beschreven in :

- Vereinfachte numerische Integration, Norske Vid. Selsk. Forh. (Trondheim) 28 (1955) 30–36.