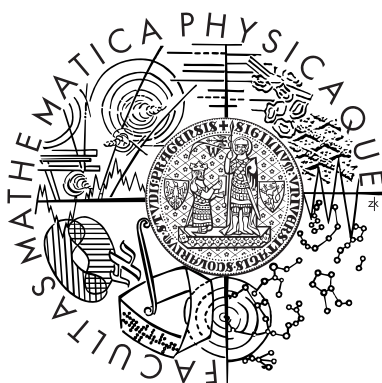


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Petr Bastl

Newton - Cotesova kvadratura

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Josef Kofroň, CSc.

Studijní program: Obecná matematika

2006

Rád bych poděkoval svému vedoucímu práce, panu docentu Kofroňovi, za půjčení studijních materiálů a za rady a poznámky při sepisování samotné práce.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 2.8.2006

Petr Bastl

Obsah

1	Kvadratura	5
1.1	Úvod	5
1.2	Newton - Cotes	6
2	Newton - Cotesovy vzorce	8
2.1	Lichoběžníkové pravidlo	8
2.2	Simpsonovo pravidlo	12
2.3	Vícebodové vzorce	13
2.4	Euler - Maclaurinova formule	14
2.5	Rombergova metoda	15
3	Konvergence	18
3.1	Obecně	18
3.2	Speciálně	20
3.3	Trocha z historie	21
4	Příloha	23
	Literatura	26

Název práce: Newton - Cotesova kvadratura
Autor: Petr Bastl
Katedra (ústav): Katedra numerické matematiky
Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Josef Kofroň, CSc.
e-mail vedoucího: Josef.Kofron@karlin.mff.cuni.cz

Abstrakt: V předložené práci se zabýváme převážně vysvětlením a utříděním nejpoužívanějších Newton - Cotesových vzorců. Jedná se o metodu k aproximaci určitého integrálu. Jednotlivé části jsou doprovázeny ukázkovými příklady pro pochopení problematiky. Dále jsou v práci zmíněny některé důležité faktory ovlivňující konvergenci Newton - Cotesovy integrační metody. Na konci práce jsou přiloženy dva zdrojové kódy psané v programu Borland Pascal 7. Jde o ukázkou lichoběžníkového pravidla a Rombergovy metody.
Klíčová slova: Newton - Cotesovy vzorce, konvergence

Title: Newton - Cotes Quadrature
Author: Petr Bastl
Department: Department of Numerical Mathematics
Supervisor: Doc. RNDr. Josef Kofroň, CSc.
Supervisor's e-mail address: Josef.Kofron@karlin.mff.cuni.cz

Abstract: In present work we study explication and ordination the most used Newton - Cotes formulae. It is a method to approximation definite integral. Particular parts are go with examples to understanding problems. Some important factor are mentioned what influence on convergency Newton - Cotes integrative method. The work contain two source code written in the programme Borland Pascal 7. It is illustration trapezoidal rule and Romberg method. Keywords: Newton-Cotes Formulae, convergency

Kapitola 1

Kvadratura

1.1 Úvod

K řešení problémů z oblastí aplikované matematiky nebo fyziky je často potřeba vyčíslit hodnotu určitého integrálu. Tyto případy se mohou řešit pomocí kvadratury neboli numerické integrace. Jde o aproximaci určitého integrálu, která vypadá následovně :

$$\int_a^b v(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^n H_i f(x_i) + E_n(f), \quad (1.1)$$

kde $\{x_i\}_{i=0}^n$ je dělení intervalu $[a, b]$; x_i se nazývají uzly, $v(x)$ je váhová funkce a H_i jsou koeficienty formule. Aproximace tedy spočívá v jakémsi váhovém průměru funkce f v uzlech x_i . Součet (1.1) se nazývá kvadraturní vzorec, $E_n(f)$ je jeho zbytek.

Numerická integrace je výhodná z několika důvodů. Jak lze vyzorovat z (1.1), funkce může být známa pouze v některých bodech intervalu, dokonce nemusí být znám ani vzorec pro primitivní funkci (např. pro $f(x) = e^{-x^2}$). Existují i případy, kdy známe primitivní funkci, ale použití numerické integrace je snadnější - například neurčitý integrál je dán jako nekonečná řada, nekonečný součin a podobně. Též může být vzorec pro primitivní funkci tak složitý, že je lépe užít numerickou integraci pro výpočet určitého integrálu. Váhová funkce $v(x)$ není samoúčelná. Ve výpočtu je často snazší vyčíslit hodnotu $f(x_i)$ než hodnotu $v(x_i)f(x_i)$. Další výhoda spočívá v tom, že chybu kvadratury tímto způsobem lze vyjádřit pouze pomocí derivací funkce f . To

je výhodné jestliže například váhová funkce nebo některá její derivace není na daném intervalu omezená.

1.2 Newton - Cotes

Newton - Cotesovy vzorce je speciální třída kvadraturních vzorců. Vyznačují se tím, že mají ekvidistantní uzly, což znamená $x_{i+1} - x_i = h$ pro $i = 1, 2, \dots, n - 1$, kde h je konstanta. Koefficienty H_i se nazývají *Cotesova čísla*. Vzorce se dělí na *otevřené* a *uzavřené*. Otevřené vzorce nemají za uzly krajní body intervalu a uzly jsou položeny souměrně podle středu intervalu. Uzavřené vzorce naopak berou krajní body za uzly, tedy $x_0 = a$, $x_n = b$. Newton - Cotesova metoda používá k aproximaci integrálu Lagrangeovy interpolační polynomy. Tato vlastnost je vidět v následující větě, kde je vyjádření koeficientů H_i pro $i = 1, 2, \dots, n - 1$ právě pomocí těchto polynomů. Dále můžeme vyčíst, že metoda není omezena pouze na reálné funkce, ale lze s její pomocí počítat i integrály komplexní funkce.

Věta 1.2.1 *Nechť funkce $f(z)$ je holomorfní v otevřené množině Ω . Nechť C je uzavřená křivka taková, že $C \subset \Omega$ a body $x_i = -1 + 2i/n$, $i = 0, 1, \dots, n$ leží na této křivce. Potom koeficienty H_i Newton - Cotesovy kvadratury*

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=0}^n H_i f(x_i) + E_n(f) \quad (1.2)$$

jsou tvaru

$$H_i = \int_{-1}^1 \frac{p_{n+1}(x)}{(x - x_i)p'_{n+1}(x_i)} dx, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (1.3)$$

kde

$$p_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

a pro zbytek vzorce $E_n(f)$ platí

$$E_n(f) = \frac{1}{\pi i} \int_C \frac{f(z)q_n(z)}{p_{n+1}(z)} dz, \quad \text{kde} \quad q_n(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{p_{n+1}(z)}{z - x} dx.$$

Funkce uvnitř integrálu (1.3) se nazývá Lagrangeův interpolační polynom. Zjednodušeně řečeno : funkci f aproximujeme pomocí Lagrangeova polynomu a poté obě strany zintegrujeme. Výsledkem je kvadrurní vzorec s chybou aproximace.

Z jiného vyjádření Newton - Cotesovy kvadratury získáme odhad řádu přesnosti definovaný takto:

Definice 1.2.2 *Kvadrurní vzorec má algebraický stupeň přesnosti m , jestliže $E(x^k) = 0$ pro $k = 0, \dots, m$ a $E(x^{m+1}) \neq 0$, kde E je chyba vzorce.*

Nejdříve si uvedeme vzorec Lagrangeova interpolačního vzorce pro funkci $f(x)$ definované na intervalu $[a, b]$:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x)f(x_i) + \frac{p_{n+1}(x)f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad (1.4)$$

kde $\xi \in (a, b)$ a závisí na x , součet je Lagrangeův interpolační polynom, druhý člen uvádí chybu vzorce. Další použité výrazy jsou :

$$p_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j), \quad l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}.$$

Nyní použijeme vzorce (1.4) s uzly odpovídající uzlům kvadratury. Poté obě strany rovnosti vynásobíme vahou $v(x)$ a zintegrujeme-li ji od a do b , dostaneme

$$\int_a^b v(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^n H_i f(x_i) + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b v(x)p_{n+1}(x)f^{(n+1)}(\xi)dx,$$

kde $\xi \in (a, b)$ je závislé na x a

$$H_i = \int_a^b v(x)l_i(x)dx. \quad (1.5)$$

Vzhledem k výskytu $(n+1)$ -ní derivace v chybovém členu lze usuzovat, že vzorec (1.5) bude přesný pro polynomy stupně nejvýše n . Algebraický stupeň přesnosti tedy bude n , kde n je počet uzlů v intervalu $[a, b]$.

Kapitola 2

Newton - Cotesovy vzorce

2.1 Lichoběžníkové pravidlo

Mezi jedny z nejpoužívanějších vzorců patří lichoběžníkové pravidlo. Je to dvoubodový uzavřený vzorec. To znamená, že má pouze dva uzly a to jsou krajní body intervalu. Vzorec je tvaru

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) - \frac{h^3}{12}f''(\xi), \quad (2.1)$$

kde $\xi \in (a, b)$ je závislé na x a $h = b - a$. Poslední výraz (2.1) platí za předpokladu, že $f \in \mathcal{C}^{(2)}[a, b]$. Tento výraz zároveň udává chybu vzorce. Často se však lichoběžníkové pravidlo se uvádí ve tvaru složeného vzorce, kdy se funkce na jednotlivých intervalech spočte pomocí dvoubodového vzorce a výsledné hodnoty se sečtou

$$\int_a^b f(x)dx = h \sum_{i=0}^n f(a + ih) + E_n(f). \quad (2.2)$$

Dvojitá čárka znamená, že první a poslední výraz v součtu se navíc dělí dvěma. Veličina h je jako výše $h = \frac{b-a}{n}$. Výraz $E_n(f)$ dává chybu vzorce

$$E_n(f) = -\frac{nh^3 f''(\xi)}{12} \quad \text{pro jisté } \xi \in (a, b) \quad \text{závislé na } x. \quad (2.3)$$

Použití tohoto pravidla není příliš složité. Lze ho snadno naprogramovat (uvedeno v příloze 1) a použít i na velmi jemné dělení intervalu, přes který

integrujeme. Jde o rychlejší způsob než počítání na papíře, což je časově nevýhodné. Naopak jedna z výhod lichoběžníkového pravidla je možnost výpočtu určitého integrálu přes nekonečný interval. Přesněji formulováno v následující větě.

Věta 2.1.1 *Nechť $f(x)$ je sudá funkce. Pak platí*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2)f(x)dx = T(h) - E(h),$$

kde

$$T(h) = h \left(f(0) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} f(nh) \exp(-n^2 h^2) \right).$$

Jestliže navíc pro komplexní funkce f platí, že $f(z)$ nemá mezi reálnou osou a přímkami $z = \pm i\pi/h$ žádné singularity, pak

$$E(h) = 2 \exp\left(-(\pi/h)^2\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-x^2)f(x - i\pi/h)}{1 - \exp(-2\pi ix/h - 2\pi^2/h^2)} dx.$$

Pro ilustraci metody jsou uvedeny příklady:

Příklad 1. Odvoďte vzorec lichoběžníkového pravidla.

Odvození provedeme pomocí aproximace Lagrangeovými polynomy. Integrál rozdělíme následovně

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x)dx.$$

Dělení $\{x_i\}_{i=0}^n$ uvažujeme ekvidistantní. Předpokládejme, že $f \in \mathcal{C}^{(2)}[a, b]$. Tento předpoklad je nutný, abychom mohli použít věty o zbytku Lagrangeových polynomů. V každém intervalu $[x_i, x_{i+1}]$ aproximujeme funkci pomocí vzorce (1.4) pro $n = 1$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_1(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f''(\xi_i)}{2!} p_2(x)dx$$

Nyní oba integrály postupně upravíme:

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_1(x) dx &= \left[\frac{(x-x_i)^2}{2(x_i-x_{i+1})} f(x_i) + \frac{(x-x_{i+1})^2}{2(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}) \right]_{x=x_i}^{x_{i+1}} \\ &= \frac{(x_{i+1}-x_i)}{2} [f(x_{i+1}) + f(x_i)]. \end{aligned}$$

Označme $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$. Je zřejmé, že $h = h_1 = h_2 = \dots = h_n$. Sečtením všech výrazů dostaneme:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)].$$

Odtud plyne první část vzorce (2.2). Zbývá odvodit chybový člen.

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f''(\xi_i)}{2!} p_2(x) dx &= \frac{f''(\xi_i)}{2} \left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2(x_i+x_{i+1})}{2} + xx_ix_{i+1} \right]_{x=x_i}^{x_{i+1}} \\ &= \frac{f''(\xi_i)}{2} \frac{(x_i-x_{i+1})^3}{6} = -\frac{f''(\xi_i)(x_{i+1}-x_i)^3}{12}, \end{aligned}$$

pro jisté $\xi_i \in (x_i, x_{i+1})$ závislé na x . Pro $x_{i+1} - x_i$ použijeme stejné značení jako v předešlém případě a dostaneme:

$$\sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f''(\xi_i)}{2!} p_2(x) dx = -\frac{h^3}{12} [f''(\xi_0) + f''(\xi_1) + \dots + f''(\xi_{n-1})].$$

Nyní uvedeme Lagrangeovu větu, ze které odvodíme chybový člen.

Věta 2.1.2 *Nechť funkce g je definovaná na intervalu $[a, b]$ a nechť jsou splněny následující podmínky:*

- (1) g je spojitá na intervalu $[a, b]$,
- (2) $g(x)$ existuje pro všechna $x \in (a, b)$.

Potom existuje $\xi \in (a, b)$ tak, že $g'(\xi) = \frac{g(b)-g(a)}{b-a}$.

Pro naši potřebu zavedeme $g(x) = f'(x)$, $g'(x) = f''(x)$. Z věty vyplývá rovnost $\frac{g'(\xi_1)+g'(\xi_2)}{2} = g'(\xi)$ pro $\xi_1 \in (a, c)$, $\xi_2 \in (c, b)$, $\xi \in (a, b)$

a $h = b - c = c - a$ takto:

$$\frac{g'(\xi_1) + g'(\xi_2)}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{g(c) - g(a)}{c - a} + \frac{g(b) - g(c)}{b - c} \right] = \frac{g(b) - g(a)}{2h} = g'(\xi),$$

pro $\xi \in (a, b)$. Z rovnosti $g'(x) = f''(x)$ plyne

$$f''(\xi_0) + f''(\xi_1) + \cdots + f''(\xi_{n-1}) = n f''(\xi),$$

pro určité $\xi \in (a, b)$ závislé na x . Tímto dostáváme úplný vzorec (2.2).

Příklad 2. Použijte lichoběžníkové pravidlo s dělením na 4 podintervaly pro integrál $\int_1^{1.5} \sin x dx$ a srovnejte s přesnou hodnotou.

Dosadíme do vzorce s $h = \frac{1.5-1}{4} = 0.125$

$$\begin{aligned} \int_1^{1.5} \sin x dx &= h \sum_{i=0}^4 f(1 + ih) = 0.125 \left[\frac{f(1)}{2} + f(1.125) + f(1.25) + \right. \\ &\quad \left. + f(1.375) + \frac{f(1.5)}{2} \right] = 0.4690 \end{aligned}$$

se zaokrouhlením na 4 desetinná místa. Přesná hodnota integrálu je $[-\cos x]_1^{1.5} = 0.4696$, tedy je vidět, že aproximace se blíží přesnému řešení. O konvergenci metody až později.

Příklad 3. Spočítejte hodnotu integrálu $I = \int_0^1 1/(1 + e^{1-2x}) dx$ s dělením na 2 a 4 intervaly.

Dosadíme do (2.2) pro $n = 2$

$$I \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2(1+e)} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2(1+e^{-1})} \right] = \frac{1}{2},$$

pro $n = 4$

$$I \simeq \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2(1+e)} + \frac{1}{1+e^{1/2}} + \frac{1}{2} + \frac{1}{1+e^{-1/2}} + \frac{1}{2(1+e^{-1})} \right] = \frac{1}{2}.$$

Přesná hodnota integrálu je však

$$I = \int_0^1 1/(1 + e^{1-2x})dx = \left[\frac{1}{2} \ln(e^{2x} - e) \right]_0^1 = \frac{1}{2}.$$

Tedy chyba je nulová. Totéž nastane při libovolném počtu dělení intervalu.

Poznámka k př.3 Vlastnosti popsané v příkladu 3 si povšiml Churchhouse [1]. Ten také dokázal, že hodnota integrálu

$$I = \int_0^1 F(x)dx \quad \text{pro} \quad F(x) = \frac{f(x)}{f(x) + f(1-x)}$$

se vždy rovná $1/2$ a při použití lichoběžníkového pravidla dostaneme výsledek s nulovou chybou.

2.2 Simpsonovo pravidlo

Zatímco v prvním případě šlo o aproximaci pomocí lineární funkce, Simpsonovo pravidlo užívá funkci kvadratickou. Jde o tříbodový vzorec.

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \quad (2.4)$$

kde $\xi \in (a, b)$, $h = \frac{b-a}{2}$, $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = b$. Z posledního členu (2.4) udávající chybu vzorce plyne, že vzorec platí, jestliže $f \in \mathcal{C}^{(4)}[a, b]$.

Simpsonovo pravidlo se používá také spíše ve složeném vzorci. Pro ten je však důležité, aby interval, přes který se integruje, byl rozdělen na sudý počet podintervalů:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + \dots + 2f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}] + E_n(f), \quad (2.5)$$

kde $f_i = f(x_i)$, $h = (b-a)/n$ a pro $\xi \in (a, b)$ závislé na x dostáváme zbytek

$$E_n(f) = -\frac{1}{90}h^4 f^{(4)}(\xi).$$

Příklad 1. Pomocí Simpsonova pravidla spočtete hodnotu integrálu $I = \int_1^{1.5} \sin x dx$ s $n = 4$.

Dosazením do vzorce (2.5) s $h = (1.5 - 1)/4 = 1/8$ získáme

$$I \simeq \frac{1}{24} \left[\sin\left(\frac{5}{4}\right) + 4 \sin\left(\frac{3}{2}\right) + 2 \sin\left(\frac{7}{4}\right) + 4 \sin(2) + \sin\left(\frac{9}{4}\right) \right] = 0.4718$$

se zaokrouhlením na 4 desetinná místa.

$$\left(I = \int_1^{1.5} \sin x dx = [-\cos x]_1^{1.5} \doteq 0.4700 \right)$$

2.3 Vícebodové vzorce

Podobným způsobem jako předchozí se dají odvodit i vícebodové vzorce. Převážně se formulují ve složených vzorcích. Pro přehled uvedeme pár následných vzorců.

Nejprve 4-bodové Simpsonovo 3/8 pravidlo:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{3}{8} h \left(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right) - \frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi), \quad (2.6)$$

5ti-bodové Booleovo pravidlo:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{2}{45} h \left(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4) \right) - \frac{8}{945} h^7 f^{(4)}(\xi), \quad (2.7)$$

kde v obou případech poslední člen ve výrazu udává chybu vzorce a $\xi \in (a, b)$ závisí na x .

2.4 Euler - Maclaurinova formule

Tato formulace vychází z lichoběžníkového pravidla.

$$\int_a^b f(x)dx = h \sum_{r=0}^n f(x_r) - \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} \left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right) + E_m(f) \quad (2.8)$$

s $x_r = a + rh$, $h = \frac{b-a}{n}$ a zbytkem

$$E_m(f) = -\frac{nh^{2m+3}B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in (a, b).$$

Výrazy B_p označují Bernoulliho čísla, definovaná vzorcem

$$B_n = 4n \int_0^{\infty} \frac{f^{(2n-1)}(t)}{e^{2\pi t} - 1} dt,$$

nebo pomocí Bernoulliho polynomů

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x) \frac{1}{n!}, \quad \text{kde pak } B_n = B_n(0).$$

Důkaz Euler - Maclaurinovy formule lze nalézt např. v [2]. Dále si všimněme, že první součet na pravé straně (2.8) je přímo lichoběžníkové pravidlo. Lze tedy předpokládat, že E.- M. vzorec dává větší přesnost výpočtu.

Příklad 1. Spočítejte hodnotu integrálu $I = \int_{-1}^1 e^{-x} dx$ pro $n = 4$, $m = 2$.

Dosadíme do vzorce (2.8) s $h = 1/2$:

$$\frac{1}{2}(e^{-1} + e^{-1/2} + 1 + e^{1/2} + e) - \left[\frac{B_2}{2!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{B_4}{4!} \left(\frac{1}{2}\right)^4 \right],$$

kde $B_2 = 1/6$ a $B_4 = -1/30$. Vyjde nám $I = 3.14995 \doteq 3.15$.

2.5 Rombergova metoda

Romberg [3] odvodil metodu aproximace integrálu s rostoucím řádem přesnosti. Jedná se o jakési zobecnění lichoběžníkového pravidla. Metoda využívá lichoběžníkového pravidla (2.2) s dělením na $1, 2, 4, 8 \dots, 2^k$ podintervalů. Rombergova metoda vychází z lichoběžníkového pravidla následující extrapolací zvané též T-schéma :

$$\begin{array}{cccc} T_{0,0} & & & \\ T_{1,0} & T_{1,1} & & \\ T_{2,0} & T_{2,1} & T_{2,2} & \\ T_{3,0} & T_{3,1} & T_{3,2} & T_{3,3} \\ \vdots & & & \end{array}$$

Prvek $T_{k,0}$ udává hodnotu (2.2) pravidla s použitím 2^k podintervalů a zbývající prvky vychází ze vztahu, který bude odvozen níže:

$$T_{k+1,i+1} = (4^{i+1}T_{k+1,i} - T_{k,i}) / (4^{i+1} - 1). \quad (2.9)$$

Vzhledem k použití lichoběžníkového pravidla v prvním přiblížení T-schématu a explicitnímu vzorci (2.9) můžeme tuto situaci naprogramovat (uveďeno v příloze 2). Za programovací jazyk jsem zvolil Borland Pascal. Struktura zdrojového kódu je přímočará. Ve výsledné matici nejdříve pomocí lichoběžníkového pravidla spočteme hodnoty v prvním sloupci T-schématu. Hodnoty v dalších sloupcích už se počítají pomocí vzorce (2.9) a hodnot prvního sloupce. Jako výslednou hodnotu program zobrazí člen matice s koeficienty $T[n, n]$, které udávají námi zadanou velikost matice.

Věta 2.5.1 *Nechť funkce f má všechny derivace z (2.2) v intervalu $[-1, 1]$. Potom lichoběžníkové pravidlo (2.2) může být vyjádřeno ve tvaru*

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = h \sum_{i=0}^n f(x_i) + \sum_{j=1}^{\infty} t_j h^{2j},$$

kde $x_i = -1 + ih$, $h = \frac{2}{n}$ a koeficienty t_j závisí pouze na funkci f .

Odvození Rombergovy metody je založeno na předešlé větě, jejíž důkaz můžeme nalézt v [4], a použití indukce podle indexu i pro členy $T_{k,i}$. Nechť

šířka každého podintervalu lichoběžníkového pravidla (2.2) je $h_k = 2^{1-k}$, čili předpokládáme 2^k podintervalů v (2.2). Potom z věty (2.5.1) dostáváme

$$I = T_{k,0} + t_1 h_k^2 + t_2 h_k^4 + \dots \quad (2.10)$$

Jestliže zdvojnásobíme počet podintervalů ve vzorci (2.2) dostaneme

$$I = T_{k+1,0} + \frac{1}{4} t_1 h_k^2 + \frac{1}{16} t_2 h_k^4 + \dots \quad (2.11)$$

Nyní pomocí obou rovnic provedeme eliminaci koeficientu t_1 .

$$I = \frac{1}{3}(4T_{k+1,0} - T_{k,0}) - \frac{1}{4} t_2 h_k^4 + \dots$$

Výraz $\frac{1}{3}(4T_{k+1,0} - T_{k,0})$ je první přiblížení Rombergovy metody, v T-schématu označeno symbolem $T_{k+1,1}$. Dalším opakováním tohoto postupu s výrazem $I = T_{k+1,1} + r_2 h_k^4$ získáme vztah (2.9).

Při zvyšování počtu podintervalů v lichoběžníkovém pravidle se bude zmenšovat chyba vzorce, tudíž bude konvergovat k přesné hodnotě integrálu. Chyba vzorce (2.2)

$$E_n(f) = -\frac{nh^3 f''(\xi)}{12} = \frac{(b-a)^3 f''(\xi)}{12n^2}$$

konverguje k nule pro $n \rightarrow \infty$ a pro $|f''(\xi)| \leq M < \infty$. Tuto situaci ilustruje posloupnost $\{T_{k,0}\}_{k=0}^{\infty}$. Rychlost konvergence je řádu $O(n^2)$.

Věta 2.5.2 *Nechť I je přesná hodnota integrálu $\int_0^1 f(x)dx$ a $T_{k,i}$ je člen Rombergova T-schématu. Potom má vzorec $T_{k,i}$ chybu*

$$I - T_{k,i} = (-1)^{i+1} \frac{1}{(2i+2)!} \frac{1}{4^{(i+1)k}} \frac{1}{2^{i(i+1)}} B_{2i+2} f^{(2i+2)}(\xi),$$

kde $\xi \in (0, 1)$ a výraz B_j označuje Bernoulliho čísla.

Z této věty vyplývá konvergence nejen pro posloupnost $\{T_{k,0}\}_{k=0}^{\infty}$, ale pro každou posloupnost $\{T_{k,i}\}_{k=0}^{\infty} \quad \forall i = 0, 1, \dots, k$. Vybraná posloupnost $\{T_{k,k}\}_{k=0}^{\infty}$ má tedy nejrychlejší konvergenci. V tom také spočívá hlavní výhoda Rombergovy metody - značné urychlení konvergence k přesnému řešení úlohy.

Příklad 1. Spočtete integrál $I = \int_{-1}^1 1/(3+x)dx$ pomocí Rombergovy metody pro $n = 1, 2, 4, 8, 16$.

Nejprve spočteme výrazy $T_{k,0}$ pro $k = 0, 1, 2, 3, 4$ pomocí vzorce (2.2) a dostaneme první sloupec T-schématu

$$T_{0,0} = 0.750000$$

$$T_{1,0} = 0.708333$$

$$T_{2,0} = 0.697024$$

$$T_{3,0} = 0.694120$$

$$T_{4,0} = 0.693391$$

Dále ze vztahu (2.9) spočteme hodnoty $T_{k,1}$ pro $k = 1, \dots, 4$.

$$T_{1,1} = 0.694444$$

$$T_{2,1} = 0.693254$$

$$T_{3,1} = 0.693155$$

$$T_{4,1} = 0.693148$$

Poslední hodnoty jsou řazeny stejně jako v uvedeném T-schématu :

$$T_{2,2} = 0.693175$$

$$T_{3,2} = 0.693148 \quad T_{3,3} = 0.693148$$

$$T_{4,2} = 0.693148 \quad T_{4,3} = 0.693147 \quad T_{4,4} = 0.693147.$$

Přesná hodnota $I = \ln 2 = 0.693147$. Ať již bereme za výsledek metody posloupnost $\{T_{k,k}\}_{k=0}^4$ nebo jen člen $T_{4,4}$ je zřejmé, že metoda k řešení konverguje. Vzhledem k tomu, že veškeré hodnoty ve výpočtu jsou zaokrouhleny na 6 desetinných míst, je řešení uvedeno s touto chybou.

Kapitola 3

Konvergence

3.1 Obecně

Důležitá vlastnost pro každou iterační metodu je její přiblížení k přesnému řešení. V této kapitole se zaměříme právě na otázku konvergence Newton - Cotesovy kvadratury. Nejdříve uvedeme Banach - Steinhausovu větu o konvergenci operátorů. Tuto větu použijeme v důkazu věty o divergenci Newton - Cotesovy metody.

Věta 3.1.1 (*Banach - Steinhaus*) *Nechť T_n je posloupnost spojitých lineárních operátorů zobrazujících Banachův prostor R_1 do Banachova prostoru R_2 . Pak T_n konverguje k lineárnímu operátoru T právě tehdy, pokud platí následující podmínky:*

- (1) *existuje takové K , že platí $\|T_n\| < K$ pro všechna n ,*
- (2) *$T_n f \rightarrow T f$ pro každou funkci $f \in X \subset R_1$, X je hustá v R_1 .*

Následující věta se zabývá pouze konvergencí funkcí $f \in \mathcal{C}[-1, 1]$. Každý integrál přes interval $[a, b]$ lze však vhodnou transformací převést na integrál přes $[-1, 1]$ z funkce spojitě na tomto intervalu.

Věta 3.1.2 *Newton - Cotesova kvadratura nekonverguje pro každou funkci $f \in \mathcal{C}[-1, 1]$.*

Důkaz První podmínka Banach - Steinhausovy věty není splněna. Přesto je možné zkonstruovat spojitou funkci f , pro kterou $Q_n f$ konverguje. Předpokládejme tedy, že $Q_n f$ konverguje, ačkoliv $\|Q_n\| \not\leq C$ pro všechna n . Zvolme spojitě funkce tak, že

$$Q_n f_n = \|Q_n\| \quad \text{a} \quad |f_n(x)| \leq 1$$

Protože $\|Q_n\|$ není omezená, existuje posloupnost $n_k \in \mathbb{N}$ taková, že

$$\|Q_{n_k}\| \leq k!k \rightarrow \infty \quad \text{pro } k \rightarrow \infty,$$

což je ve sporu s konvergencí podle Banach - Steinhausovy věty. Nyní stačí dokázat, že $\|Q_n\|$ není omezená a důkaz je hotov. K tomu použijeme asymptotický rozvoj vah A_i , které uvedl Ouspenski [2]:

$$A_n = \frac{2}{n(\ln n)^2}(1 + s_n), \quad \text{kde } s_n \rightarrow 0 \quad \text{pro } n \rightarrow \infty$$

a

$$A_k = -\frac{2}{n(\ln n)^2} \binom{n-1}{k-1} \left[\frac{(-1)^{k-1}}{k-1} + \frac{(-1)^{n-k}}{n-k} \right] (1 + t_n)$$

s $t_n \rightarrow 0$ pro $n \rightarrow \infty$ pro $k = n-1$. Součtem absolutních hodnot dostáváme odhad

$$\|Q_n\| = \sum_{k=1}^n |A_k| \geq \frac{2}{n(\ln n)^2} \left[2 + \sum_{k=2}^{n-1} \binom{n-1}{k-1} \left| \frac{(-1)^{k-1}}{k-1} + \frac{(-1)^{n-k}}{n-k} \right| \right] b_n,$$

kde $b_n \equiv \min \left\{ |1 - |s_n||, |1 - |t_n|| \right\} \leq 1$ a $b_n \rightarrow 1$ pro $n \rightarrow \infty$. Zároveň předpokládáme, že n je dostatečně velké tak, aby $b_n > 0$. Necht'

$$a_k^{(n)} \equiv \left| \frac{(-1)^{k-1}}{k-1} + \frac{(-1)^{n-k}}{n-k} \right| = \frac{1}{(k-1)(n-k)} |(n-k)(-1)^{k-1} + (k-1)(-1)^{n-k}|.$$

Povšimněme si, že posloupnost $a_k^{(n)}$ monotónně klesá pro $k \leq [n/2]$. Dosadíme-li za $n = 2N + 1 > 2$, dostaneme

$$\begin{aligned} a_k^{(n)} &= \frac{1}{(k-1)(2N+1-k)} |(2N+1-k)(-1)^{k-1} + (k-1)(-1)^{k-1}| \\ &= \frac{2N}{(k-1)(2N+1-k)} \\ &= \frac{n-1}{(k-1)(n-k)} \geq \frac{1}{(n-2)^2}, \quad k = n-1. \end{aligned}$$

Zatímco pro $n = 2N$ máme

$$\begin{aligned} a_k^{(n)} &= \frac{1}{(k-1)(2N-k)} |(2N-k)(-1)^{k-1} + (k-1)(-1)^k| \\ &= \frac{|2N-2k+1|}{(k-1)(2N-k)} \\ &= \frac{|n-2k+1|}{(k-1)(n-k)} \geq \frac{1}{(n-2)^2}, \quad k = 2(1)n-1. \end{aligned}$$

Z předchozího vyplývá

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n A_k &= \frac{2}{n(\ln n)^2} \left[2 + \sum_{k=2}^{n-1} \binom{n-1}{k-1} \frac{1}{(n-2)^2} \right] b_n \\ &= \frac{2}{n(\ln n)^2} \left[2 + \frac{2^{n-1} - 2}{(n-2)^2} \right] b_n \\ &\geq \frac{2^n - 4}{n(n-2)^2(\ln n)^2} b_n = \frac{2^n}{n(n-2)^2(\ln n)^2} \bar{b}_n, \end{aligned}$$

kde $\bar{b}_n \equiv b_n(1 - 2^{2-n}) \leq 1$, tedy $\bar{b}_n \rightarrow 1$ pro $n \rightarrow \infty$. Tedy pro Newton - Cotesovu metodu $\|Q_n\| = \sum |A_k|$ není omezená a nemůže být zaručena konvergence pro každou funkci $f \in C[-1, 1]$. \square

3.2 Speciálně

Věta z předchozí části byla o divergenci kvadratury. Další věta je o konvergenci, ale již na funkce klade větší požadavky. Dále si všimněme směru implikace. Věta totiž nic neříká o konvergenci metody pro funkce, které danou podmínku nesplňují. Například funkce $f(x) = \frac{1}{x^3} e^{-\frac{1}{x^2}}$ není holomorfní v nule (podrobněji v příkladu), ale její integrál vyčíslený pomocí lichoběžníkového pravidla přesto konverguje k přesnému řešení.

Příklad Funkce $f(x) = \frac{1}{x^3} e^{-\frac{1}{x^2}}$ není definována v nule. Z limity plyne, že v nule má odstranitelnou izolovanou singularitu

$$\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = 0.$$

Funkce $f(x)$ je holomorfní jen v prstencovém okolí nuly, ale ne v nule. Určitý integrál lze spočítat přímo z primitivní funkce:

$$\int_{-1}^2 \frac{e^{-\frac{1}{x^2}}}{x^3} dx = \left[\frac{e^{-\frac{1}{x^2}}}{2} \right]_{x=-1}^2 = 0.20546.$$

Určitý integrál počítaný pomocí lichoběžníkového pravidla s dělením na 100 podintervalů je $I = 0.20548$. Tedy hodnota opravdu konverguje k přesnému řešení, přestože není holomorfní v okolí nuly.

Věta 3.2.1 *Newton - Cotesova kvadratura konverguje pro funkce $f(z)$, které jsou holomorfní v kruhu komplexní roviny o poloměru alespoň 2.*

Důkaz Použijeme větu o zbytku rozvoje [5] pro funkce holomorfní na množině $|z| < R$. Odtud plyne

$$\|E_n\| = \sum_{k=n(2)}^{\infty} \varepsilon^{2k} \left(\int_{-1}^1 x^k dx - \sum_{i=1}^n A_i x_i^k \right)^2, \quad \varepsilon = \frac{1}{R} < 1, n \text{ sudé}$$

Jestliže n je liché, potom $k = n + 1(2)\infty$. Nyní omezíme $\|E_n\|$ takto,

$$\begin{aligned} \|E_n\| &= \sum_{k=n(2)}^{\infty} \left[\left(\frac{2\varepsilon^k}{k+1} \right)^2 - \frac{4}{k+1} \sum_{i=1}^n A_i (\varepsilon^2 x_i)^k + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_i A_j \varepsilon^{2k} x_i^k x_j^k \right] \\ &< \sum_{k=n(2)}^{\infty} \left(\frac{2\varepsilon^k}{k+1} \right)^2 + \frac{4\varepsilon^{2n} a_n}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{1-\varepsilon^2 x_i} + \varepsilon^{2n} a_n^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{1-\varepsilon^2 x_i x_j} \\ &< 4\varepsilon^{2n} \sum_{k=n(2)}^{\infty} \left(\frac{1}{k+1} \right)^2 + \frac{4\varepsilon^{2n} a_n}{1-\varepsilon^2} + \frac{n^2 \varepsilon^{2n} a_n^2}{1-\varepsilon^2}, \end{aligned}$$

kde $a_n \equiv \sum_{i=1}^n |A_i|$. Dále víme, že $\frac{1}{k+1} < \frac{1}{n}$, $x_i \leq 1$ a

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{1-\varepsilon^2 x_i} < \frac{n}{1-\varepsilon^2}, \quad \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{1-\varepsilon^2 x_i x_j} < \frac{n^2}{1-\varepsilon^2}.$$

Tedy $\|E_n\| < \frac{\varepsilon^{2n}}{1-\varepsilon^2} \left[4 \sum_{k=n}^{\infty} \left(\frac{1}{k+1} \right)^2 + 4a_n + n^2 a_n^2 \right]$, kde součet uvnitř závorky jde k nule pro $n \rightarrow \infty$. Pro konvergenci jsou tedy důležité výrazy $n^2 \varepsilon^{2n} a_n^2$, a_n . Dostáváme, $n \varepsilon^n a_n \frac{\varepsilon^{n 2^n}}{(\ln n)^2} \rightarrow 0$ pro $n \rightarrow \infty$ jestliže $\varepsilon \leq 1/2$, což znamená konvergenci jestliže $R \geq 2$. \square

3.3 Trocha z historie

Newton - Cotesova kvadratura je jedna ze starších kvadrturních metod. Otázkou konvergence této metody se mezi prvními zabýval Stieltjes ve své korespondenci s Hermitem. Ouspenski [6] v roce 1925 odvodil asymptotické vyjádření pro váhové funkce a z chování $\|Q_n\|$ vyvodil, že tato kvadratura

není vhodná metoda pro praktické využití. V pozdějších letech Kusmin [7] dokázal, že kvadratura nekonverguje pro každou funkci $f \in \mathcal{C}^0[-1, 1]$ a následně, roku 1933, Polya [8] ukázal, že kvadratura není konvergentní pro každou holomorfní funkci. Jako příklad si vzal funkci

$$g(z) = - \sum_{k=4}^{\infty} a^{k!} \frac{\sin k![(z+1)/2]}{\cos \pi[(z+1)/2]}, \quad \frac{1}{2} < a < 1,$$

kde $g(z)$ je holomorfní v pásu $| \operatorname{Im}(z) | < \frac{2}{\pi} \log 2$. Následně se podařilo Davisovi dokázat, že Newton - Cotesova metoda konverguje alespoň pro všechny funkce $f \in E_\rho$ pro $\rho > 4$; pro $\rho = 4$ je \mathbb{E}_ρ taková elipsa, že $g(z) \notin \mathbb{E}_\rho$. Nicméně prudký růst $\|Q_n\|$ omezuje použitelnost a kvůli zaokrouhlovacím chybám v $f(x_i)$ může být nepřesná i pro malé h , kde h určuje délku jednotlivých podintervalů.

Kapitola 4

Příloha

Příloha 1

```
program Lichobeznik;
var a,b,h,x,y,suma:real;
    n,i:integer;
function fce(x:real):real;
begin
    fce:=1/(3+x); {zde je přímo zadaná funkce z příkladu 1}
end;

BEGIN
writeln('Zadejte meze integrálu a počet podintervalů')
read(a,b,n);
suma:=0;
h:=(b-a)/n;
for i:=0 to n do;
begin
    x:=a+i*h;
    y:=fce(x);
    if (i=0) or (i=n) then y:=y/2;
    suma:=suma+y;
end;
suma:=h*suma;
writeln('Výsledek je',suma:10:10);
END.
```

Příloha 2

```
program Romberg;
const max=50;
type matice=array [0..max,0..max] of real;
var   T:matice;
      ctyri:longint;
      i,k,n:integer;
      a,b:real;

procedure Tisk(C:matice;radky,sloupce:integer);
var i,j:integer;
begin
  for i:=0 to radky do;
    begin;
      for j:=0 to sloupce do write(C[i,j]:5:6,' , ');
      writeln;
    end;
  end;

function licho(k:integer):real;
var suma,x,y,h:real;
    j,ka:integer;
function fce(x:real):real;
begin;
  fce:=1/(3+x);
end;
begin
  suma:=0;
  ka:=1;
  if k<>0 then for j:=1 to k do ka:=ka*2;
  h:=(b-a)/ka;
  for j:=0 to ka do;
    begin
      x:=a+j*h;
      y:=fce(x);
      if (j=0) or (j=ka) then y:=y/2;
      suma:=suma+y;
```



```

    end;
    suma:=h*suma;
    lich:=suma;
    end;

BEGIN
writeln('Zadejte meze integrálu a počet iterací:');
read(a,b,n);
ctyri:=1;
for i:=0 to n do;
    for k:=0 to n do T[k,i]:=0;
for k:=0 to n do T[k,0]:=lich(k);
for i:=0 to (n-1) do;
    begin
        ctyri:=ctyri*4;
        for k:=i to (n-1) do
            T[k+1,i+1]:=(ctyri*T[k+1,i]-T[k,i])/(ctyri-1);
        end;
writeln('Výsledek je:',T[n,n]);
END.

```

Literatura

- [1] Churchhouse R. F.: *Perfect Numerical Integration by Simpson's Rule*, Math. Gaz., 1975, str.159–162.
- [2] Ralston A.: *A First Course in Numerical Analysis*, MacGraw-Hill Book Company, 1956.
- [3] Romberg W.: *Vereinfachte numerische Integration*, Det. Kong. Norske Videuskabers Forhandlinger, 1955, str.30–36.
- [4] Ralston A., Rabinowitz P.: *A First Course in Numerical Analysis*, MacGraw-Hill, New York, second edition, 1978.
- [5] Engels H.: *Numerical Quadrature and Cubature*, Academic Press, 1980, str.134–135.
- [6] Ouspenski J.: *Sur les valeurs asymptotiques des coefficients de cotes*, Bull. Am. Math. Soc., 1925, str.145–156.
- [7] Kusmin R. O.: *Concerning the Theory of Mechanical Quadratures*, Leningrad, 1931, str.5–14.
- [8] Polya G.: *Über die konvergenz von quadraturverfahren*, Math. Zeitschrift, 1933, str.264–286.