

NN31545.0255

INSTITUUT VOOR CULTUURTECHNIEK EN WATERHUISSHOUDING

NOTA 255, d. d. 25 mei 1964

BIBLIOTHEEK DE HAAFF  
Droevendaalsesteeg 3a  
Postbus 241  
6700 AE Wageningen

**Numerieke Integratie-methoden**

W. van Doorne

---

Nota's van het Instituut zijn in principe interne communicatiemid-  
delen, dus geen officiële publikaties.

Hun inhoud varieert sterk en kan zowel betrekking hebben op een  
eenvoudige weergave van cijferreeksen, als op een concluderende  
discussie van onderzoeksresultaten. In de meeste gevallen zullen  
de conclusies echter van voorlopige aard zijn omdat het onder-  
zoek nog niet is afgesloten.

Aan gebruikers buiten het Instituut wordt verzocht ze niet in pu-  
blikaties te vermelden.

Bepaalde nota's komen niet voor verspreiding buiten het Instituut  
in aanmerking.

---

1783892



# Numerieke Integratie-methoden

W. van Doorne

## INHOUD

	blz.
I INLEIDING, OVERZICHT VAN ANALYTISCHE INTEGRATIE-METHODEN	1
II FORMULERING VAN HET PROBLEEM	3
III DEFINITIES EN STELLINGEN UIT DE INTEGRaalREKENING	4
IV VERDERE DEFINITIES EN STELLINGEN	6
V DE EENVOUDIGSTE INTEGRATIE-METHODEN	11
VI INTEGRATIE DOOR AANPASSING VAN VEELTERMEN	13
VII DE NAUWKEURIGHEID DER INTEGRATIE-METHODEN	15
VIII DE CONVERGENTIE VAN INTEGRATIE-METHODEN MET VEELTERM-AANPASSING	17
IX DE INTEGRATIE-METHODE VAN GAUSS	19
X EEN NUMERIEK VOORBEELD	22
XI AFGERONDE INTERPOLATIEPUNTEN BIJ DE GAUSS-INTEGRATIE, VOORBEELD	27
XII MEERVOUDIGE INTEGRALen	29
XIII SAMENVATTING EN SLOTOPMERKINGEN	31
XIV LITERATUUR	32

Bijlage 1 Tabel 1: Integratiecoëfficiënten (equidistante tussenpunten)

Bijlage 2 Tabel 2: Integratiecoëfficiënten (GAUSS) 2A, B, C

Bijlage 3 Het toepassen van een eindcorrectie in tabel 1

Bijlage 4 Figuren 1 tot en met 10

## I. INLEIDING, OVERZICHT VAN ANALYTISCHE INTEGRATIEMETHODEN

Er bestaat een aantal problemen, waarvan het oplossen leidt tot de wens een zogenaamde bepaalde integraal van een functie van één variabele te berekenen. Enkele voorbeelden zijn berekeningen betreffende oppervlakten, ligging van zwaartepunten en het schatten van de gemiddelde functiewaarde over een gegeven interval en het oplossen van differentiaalvergelijkingen.

In slechts een zeer beperkt aantal gevallen kan de integraal analytisch worden bepaald. Wanneer dit mogelijk is, wordt eerst een primitieve van de gegeven functie  $f(x)$  gezocht, dat is een functie  $F$  waarvan de eerste afgeleide gelijk is aan  $f$  en vervolgens berekent men:

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) \quad (1.1)$$

Deze wijze van werken wordt gerechtvaardigd door de hoofdstelling van de integraalrekening. Het bepalen van een primitieve wordt wel onbepaalde integratie genoemd en kan geschieden volgens één der onderstaande methoden of een combinatie ervan, waarvoor naar COURANT wordt verwezen.

De eenvoudigste methode is, dat:

1. een primitieve van  $f$  zonder meer wordt herkend (Band I, pag.181)
2. voorts kan een oplossing volgen door het invoeren van een nieuwe variabele (Band I, pag.182)
3. door middel van partiële onbepaalde integratie (Band I, pag.191)
4. door de integrand  $f(x)$  in een machtreeks te ontwikkelen en de reeks term voor term onbepaald te integreren (Band I, pag.356); dit is een benaderingsmethode
5. door het afleiden van recurrente betrekkingen tussen primitieven waardoor, bij herhaalde toepassing van de gevonden betrekkingen, de gezochte primitieve wordt uitgedrukt in een bekende primitieve (Band I, pag.194)
6. door, wanneer de bewerking onder punt 5 niet leidt tot een afbrekende reeks of produkt, de termen respectievelijk factoren, die voldoende dicht bij nul respectievelijk één liggen te verwaarlozen; dit is dus een benaderingsmethode
7. door herleiding tot een functie met meer dan één variabele, dus door meervoudige (!) integratie (Band II, pag.212).

Nadat een primitieve is gevonden, past men 1.1 toe om de bepaalde integraal te berekenen.

Het komt echter vaak voor, dat de methoden 1, 2, 3, 5 en 7 niet toepasbaar zijn, en/of dat de methoden 4 en 6 divergerende of traag convergerende reeksen leveren. Methode 6 geeft nogal eens aanleiding tot het optreden van zogenaamde asymptotische reeksen, die, in tegenstelling tot convergente reeksen, slechts een resultaat van begrensde nauwkeurigheid leveren. Ze zijn daardoor niet altijd bruikbaar (zie STANTON, pag. 133).

Het is dan ook nuttig te kunnen beschikken over (benaderende) integratiemethoden, waarbij het niet nodig is een primitieve te kennen. Enkele methoden zullen in het volgende worden besproken en toegelicht.

## II. FORMULERING VAN HET PROBLEEM

De volgende twee situaties zullen worden beschouwd:

1. er is door middel van een formule een binnen het gegeven interval  $[a,b]$  continue functie van één variabele gegeven.

Deze functie  $f$  moet worden geïntegreerd tussen de grenzen  $a$  en  $b$ , en we veronderstellen, dat analytische integratie niet mogelijk is.

Maar de gevraagde integraal kan worden opgevat als de oppervlakte, ingesloten door de volgende vier lijnen (figuur 1).

$$x = a; \quad x = b; \quad y = 0; \quad y = f(x) \quad (2.1)$$

(hierbij moet, in verband met de formele definitie van het begrip 'bepaalde integraal' (par.III) de oppervlakte boven de  $x$ -as positief en die onder de  $x$ -as negatief worden gerekend).

De door (2.1) aangeduide oppervlakte zou dus met een planimeter of door grafische integratie kunnen worden bepaald (zie COURANT, Band I, pag. 108). Dit leidt echter tot een in het algemeen weinig nauwkeurig resultaat, zelfs wanneer het gemiddelde van een aantal metingen wordt genomen. Daarom zijn eenvoudige numerieke benaderingsmethoden gewenst, die redelijk nauwkeurig zijn.

2. een andere mogelijkheid is, dat de te integreren functie door een tabel is gegeven, dus door een rij punten

$$(x_i, y_i) \quad \text{waarin } y_i = f(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Hierbij is dus geen formule voor  $f(x)$  bekend en is  $f$  slechts gedefinieerd voor de gegeven waarden  $x = x_i$ . Daarom moeten methoden van numerieke integratie voorhanden zijn, die uitsluitend gebruik maken van een stel gegeven punten.

Ter voorbereiding worden in de paragrafen III en IV enkele definities en stellingen behandeld, die voor de theorie van de numerieke integratie van belang zijn.

III. DEFINITIES EN STELLINGEN UIT DE INTEGRAALREKENING

1. de bepaalde integraal over het interval [a,b] van een functie die binnen dit interval continu is, aan te duiden door:

$$S = \int_a^b f(x)dx,$$

wordt als volgt gedefinieerd:

Het interval [a,b] wordt gesplitst in een aantal deelintervallen door middel van een willekeurig aantal tussenpunten  $x_i$ , waarbij:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 \dots \dots < x_{n-1} < x_n = b$$

Nu wordt in elk interval  $[x_i, x_{i+1}]$ , eventueel op de rand ervan, een punt  $t_i$  gekozen en men vormt de uitdrukking (figuur 2, waarin  $n = 4$ ):

$$S_n = \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \cdot f(t_i) \tag{3.1}$$

Wanneer  $\lim_{n \rightarrow \infty} S_n$  bestaat en deze onafhankelijk is van de keuze van  $x_i$  en  $t_i$  dan wordt de bepaalde integraal gedefinieerd door:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S \tag{3.2}$$

Hieruit volgt de mogelijkheid de integraal S te benaderen door middel van de sommatie (3.1). Maakt men namelijk  $x_{i+1} - x_i$  kleiner door n groter te kiezen, dan zal bij voldoende grote n de grootheid  $S_n$  willekeurig dicht tot S kunnen worden gebracht. Men heeft hierbij nog een zekere vrijheid bij de keuze van  $t_i$ , waarvan we in paragraaf V gebruik zullen maken.

2. de middelwaardestelling van de integraalrekening wijst op het bestaan van een 'middelwaarde' t tussen a en b, zδ, dat geldt:

$$S = (b - a) \cdot f(t) \quad a \leq t \leq b \tag{3.4}$$

waarbij  $t$  in het algemeen niet nader kan worden bepaald.

Dit betekent meetkundig (figuur 3), dat de oppervlakte  $S$  gelijk is aan die van de rechthoek  $abcd$ . De waarde  $f(t)$  kan worden opgevat als het gemiddelde van de functie-waarden over het interval  $[a,b]$ .

Wanneer men in (3.1) de  $t_i$  zou doen samenvallen met de middelwaarden in de intervallen  $[x_i, x_{i+1}]$ , dan zou  $S$  gelijk zijn aan  $S_n$ , en dus exact bekend zijn. Aangezien genoemde keuze van  $t_i$  in de praktijk niet kan worden gemaakt, neemt men hiervoor een schatting, bijvoorbeeld:

$$t_i = x_i ; t_i = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$$

of iets dergelijks.

IV. ANDERE DEFINITIES EN STELLINGEN

1. de binomiaalcoëfficiënt, aangegeven door:

$$\binom{x}{k} \quad ('x \text{ boven } k')$$

waarin x een reëel en k een niet-negatief geheel getal is, wordt als volgt gedefinieerd:

$$\binom{x}{0} = 1$$

en

$$\binom{x}{k} = \frac{x}{k} \cdot \frac{x-1}{k-1} \cdot \dots \cdot \frac{x-(k-1)}{1} \quad \text{voor } k = 1, 2, 3, \dots$$

Hieruit volgt de belangrijke relatie:

$$\binom{x}{k} = \binom{x-1}{k} + \binom{x-1}{k-1} \tag{4.1}$$

die kan worden bewezen door op de termen van het rechterlid van (4.1) de definitie van de binomiaalcoëfficiënt toe te passen.

In het geval, dat  $x = 0, 1, 2, \dots$  volgt uit (4.1) een recursief schema ter berekening van binomiaalcoëfficiënten bij kleine waarden van x en k, de zogenaamde driehoek van Pascal volgens onderstaande tabel:

x \ k	0	1	2	3	4	5	6
0	1	0	0	0	0	0	-
1	1	1	0	0	0	0	-
2	1	2	1	0	0	0	-
3	1	3	3	1	0	0	-
4	1	4	6	4	1	0	-
5	1	5	10	10	5	1	-
6	-	-	-	-	-	-	-

Bijvoorbeeld bij  $x = 5$  en  $k = 3$  komt er:

$$\binom{5}{3} = \frac{5 \cdot 4 \cdot 3}{3 \cdot 2 \cdot 1} = 10$$



2. het m-de verschil van de functie f ter plaatse x = a wordt als volgt verkregen.

We beschouwen de functiewaarden:

$$f(a); f(a + h); f(a + 2h) \dots\dots$$

waarin h een (vaak klein te kiezen) toename van x voorstelt en definiëren het m-de verschil van f ter plaatse x = a, aan te duiden door  $\Delta_a^m f(x)$  of, wanneer geen verwarring dreigt, door  $\Delta_a^m$ , als volgt:

$$\Delta_a^0 f(x) = f(a) \tag{4.3}$$

en:

$$\Delta_a^m f(x) = \Delta_{a+h}^{m-1} f(x) - \Delta_a^{m-1} f(x) \quad m = 1, 2, \dots \tag{4.4}$$

In het bijzonder volgt hieruit voor m = 1

$$\Delta_a^1 f(x) = f(a + h) - f(a)$$

Deze definitie levert de mogelijkheid de eerste, tweede en hogere verschillen ter plaatse x = a, x = a + h, ..... te berekenen met behulp van een tabel van functiewaarden.

Een voorbeeld moge dit verduidelijken. Is bijvoorbeeld:

$$f(x) = x^3; a = 1; h = 1$$

dan komt er:

x	$f(x) = \Delta_x^0$	$\Delta_x^1$	$\Delta_x^2$	$\Delta_x^3$	
1	1	7	12	6	(4.5)
2	8	19	18	6	
3	27	37	24		
4	64	61			
5	125				

Om enkele belangrijke betrekkingen voor m-de verschillen aan te geven merken we op, dat door herhaalde toepassing van de definitie blijkt, dat, kort genoteerd geldt:

$$\Delta_a^0 = 1 \cdot f_a \quad \rightarrow \quad f_a = 1 \cdot \Delta_a^0$$

$$\Delta_a^1 = 1 \cdot f_{a+h} - 1 \cdot f_a \quad \rightarrow \quad f_{a+h} = 1 \cdot \Delta_a^0 + 1 \cdot \Delta_a^1$$

$$\Delta_a^2 = 1 \cdot f_{a+2h} - 2 \cdot f_{a+h} + 1 \cdot f_a \quad \rightarrow \quad f_{a+2h} = 1 \cdot \Delta_a^0 + 2 \cdot \Delta_a^1 + 1 \cdot \Delta_a^2$$

$$\Delta_a^3 = 1 \cdot f_{a+3h} - 3 \cdot f_{a+2h} + 3 \cdot f_{a+h} - 1 \cdot f_a \quad \rightarrow \quad f_{a+3h} = 1 \cdot \Delta_a^0 + 3 \cdot \Delta_a^1 + 3 \cdot \Delta_a^2 + 1 \cdot \Delta_a^3$$

Hieruit blijkt duidelijk hoe de m-de verschillen met de functie-waarden samenhangen. De optredende coëfficiënten zijn de binomiaalcoëfficiënten volgens (4.2).

Algemeen geldt:

$$\Delta_a^m [\Delta_a^k f(x)] = \Delta_a^{m+k} [f(x)] \quad , \quad \text{korter: } \Delta_a^m \Delta_a^k = \Delta_a^{m+k} \quad m, k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

$$\Delta_a^m = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \binom{m}{j} \cdot f(a + jh) \quad (4.7)$$

$$f(a + mh) = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{m}{j} \cdot \Delta_a^j \quad (4.8)$$

De reeksen (4.7) en (4.8) breken af bij  $j > m$  omdat dan  $\binom{m}{j} = 0$ . Om aan te duiden hoe dergelijke gelijkheden worden bewezen, tonen we de juistheid van (4.8) aan, in de veronderstelling, dat (4.6) en (4.7) zijn bewezen.

Het bewijs van (4.8) wordt geleverd volgens het beginsel van de inductie: de stelling wordt aangevoerd voor  $m = 0$  en wordt verondersteld te gelden voor willekeurige  $m = k$ . Volgt daaruit de geldigheid voor  $m = k + 1$ , dan is daarmee de stelling bewezen voor elke  $m$ . Dus:

bij  $m = 0$ : volgens (4.2) en (4.3) is het gestelde juist

bij  $m = k$ : volgens aanname is het gestelde juist

$$\begin{aligned}
 \text{bij } m=k+1: \quad \sum_{j=0}^{\infty} \binom{m}{j} \Delta_a^j &= \sum_{j=1}^{\infty} \binom{k+1}{j} \Delta_a^j + \Delta_a^0 = \sum_{j=1}^{\infty} [\binom{k}{j} + \binom{k}{j-1}] \Delta_a^j + \Delta_a^0 = \\
 &= \sum_{j=0}^{\infty} \binom{k}{j} \Delta_a^j + \sum_{j=0}^{\infty} \binom{k}{j} \Delta_a^j \Delta_a^1 = f_{a+kh} + \Delta_a^1 f_{a+kh} = \\
 &= \Delta_{a+kh}^0 + \Delta_{a+kh}^1 = \Delta_{a+h+kh}^0 = f_{a+mh}
 \end{aligned}$$

Door vergelijking van eerste en laatste lid blijkt de juistheid van (4.8).

Ter inleiding van een laatste stelling betreffende m-de verschillen grijpen we terug op tabel (4.5). Wanneer deze nog wordt uitgebreid met enkele x-waarden, dan blijkt het derde verschil voor elke x, gelijk aan 6 te zijn. Algemeen geldt dan ook:

Voor een n-de graadsveelterm (4.9)

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n \quad (a_n \neq 0)$$

geldt:

$$\Delta_x^n = n! a_n h^n = \text{constante} \neq 0; \quad \Delta_x^{n+1} = 0$$

3. de veeltermen van LAGRANGE, aangeduid met  $Q_j$  worden gedefiniëerd door:

$$Q_j(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_n)}{(x_j-x_1)(x_j-x_2)\dots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\dots(x_j-x_n)} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

(4.10)

Dit zijn veeltermen van de graad n-1 in x, waarvoor geldt:

$$Q_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{als } i = j \\ 0 & \text{als } i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$

(4.11)

Zo geldt bijvoorbeeld als n = 3:

$$Q_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

Wordt nu met behulp van de  $Q_j$  en een aantal gegeven constanten  $y_j$  (niet alle gelijk aan nul) de veelterm  $Q$  gevormd volgens:

$$Q(x) = y_1 \cdot Q_1(x) + y_2 \cdot Q_2(x) + \dots + y_n \cdot Q_n(x) \quad (4.12)$$

dan geldt wegens (4.11):

$$Q(x_j) = y_j$$

Dus stelt  $Q(x)$  in het algemeen een  $(n-1)$  - de graads kromme voor, die door de gegeven punten  $(x_j, y_j)$  gaat, terwijl het volgens de algebra de enige  $(n-1)$  - de graads kromme met deze eigenschap is. In bijzondere gevallen kunnen in (4.12) een of meer van de hoogste graadstermen wegvallen. Deze mogelijkheid zullen we buiten beschouwing laten.

V. DE EENVOUDIGSTE INTEGRATIEMETHODEN

We beschouwen een functie, die in formule- of tabelvorm is gegeven (paragraaf II) en voeren hierbij een kortere notatie in.

De punten  $x = a + th$  ( $a$  en  $h$  constant) zullen worden aangegeven door de waarde van  $t$ , we gaan in feite op een nieuwe variabele  $t$  over. Sprekend over de punten  $x_{-1/3}, x_0, x_2$  zullen we hiermede de punten  $x = a - \frac{1}{3}h, x = a, x = a + 2h$  bedoelen. De bijbehorende functiewaarden zijn dan  $y_{-1/3}, y_0$  en  $y_2$ .

De functie zal binnen het integratie-interval  $[a,b]$  continu worden verondersteld, zodat het bestaan van de bepaalde integraal is verzekerd. Door deze veronderstelling moet bij een getabelleerde functie tussen de tabelwaarden worden geïnterpoleerd, hetgeen voorlopig nog geen moeilijkheden zal bieden.

Enkele numerieke integratiemethoden, die rechtstreeks uit de integraaldefinitie volgen, zijn:

1. kies de  $x_i$  uit paragraaf III zó, dat:

$$x_{i+1} - x_i = \text{constante } h > 0 \text{ en } t_i = x_i \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

Dan ontstaat de eerste rechthoekregel (figuur 4):

$$S = \int_a^b f(x) dx \approx h(y_0 + y_1 + \dots + y_{n-2} + y_{n-1}) = S_1^{\#}$$

2. de keuze  $t_i = x_{i+1}$  levert de tweede rechthoekregel (figuur 5):

$$S \approx h(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} + y_n) = S_2$$

3. omdat:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} S_2 = S$$

kan worden gesteld:

$$S \approx \frac{1}{2}(S_1 + S_2)$$

waardoor de trapeziumregel ontstaat (figuur 6)

$$S \approx \frac{1}{2}h(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \dots + 2y_{n-1} + y_n)$$

x) Het symbool  $\approx$  zal betekenen: 'wordt geschat op'

4. door de keuze  $t_i = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$  komt men tot de raaklijnregel (fig. 7a, b: in plaats van de raaklijn mag iedere 'niet vertikale' rechte worden gebruikt, want de verkregen oppervlakten zijn steeds gelijk aan de oppervlakte van de rechthoek in figuur 7b).

$$S \approx h(y_{1/2} + y_{3/2} + \dots + y_{n-1/2})$$

Als inleiding tot de volgende paragraaf kan het volgende worden opgemerkt.

Bij de rechthoek-regels wordt de oorspronkelijke kromme vervangen door een 'horizontale' rechte, althans over een in de praktijk klein interval ter lengte  $h$ . Dit is de eenvoudigste wijze van interpoleren voor tussengelegen punten. Bij toepassing van de trapeziumregel wordt de kromme benaderd door het polygoon door de punten  $(x_i, y_i) \dots i = 0, 1, \dots, n$ .

VI. INTEGRATIE DOOR AANPASSING VAN VEELTERMEN

In het voorgaande werd de curve  $y = f(x)$  vervangen door een polygoon. Een andere mogelijkheid is in plaats van de gegeven curve een kromme van de graad  $k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) te gebruiken bij de integratie. Hiertoe grijpen we terug op (4.8).

Wordt in (4.8)  $m$  als continue variabele opgevat, dan stelt het rechterlid een veelterm in  $m$  voor, die voor  $m = 0, 1, 2, \dots$  juist de waarden  $f(a + mh)$  aanneemt. Een voorbeeld geeft aan, hoe hiervan kan worden gebruik gemaakt.

Wil men bijvoorbeeld door de punten:

$$(a + jh, f(a + jh)) \quad j = 0, 1, 2 \quad h = \text{constante} > 0$$

een tweede-graads curve leggen, dan kan de vergelijking hiervan direct worden opgeschreven, deze wordt wegens (4.8)

$$y = \Delta_a^0 + \binom{m}{1} \Delta_a^1 + \binom{m}{2} \Delta_a^2 \quad (m = \frac{x - a}{h})$$

omdat de hogere verschillen volgens (4.9) geen bijdrage leveren.

Algemener geformuleerd:

De vergelijking van de  $k$ -de graads kromme door de gegeven punten:

$$(a + jh, f(a + jh)) \quad j = 0, 1, \dots, k \quad h = \text{constante} > 0$$

luit:

$$y = \sum_{j=0}^k \binom{t}{j} \Delta_a^j \quad (\text{nieuwe variabele: } t = \frac{x - a}{h}) \quad (6.1).$$

Deze formule is voor het directe doel geschikter dan (4.12).

Wordt nu het interval  $[a, b]$  waarover moet worden geïntegreerd in  $k$  even lange deelintervallen met lengte  $h$  verdeeld, dan kan men stellen:

$$S = \int_a^{a+kh} f(x) dx \approx \int_a^{a+kh} y dx = h \cdot \int_0^k y dt$$

$$S = h \cdot \int_0^k [y_0 + t(y_1 - y_0) + \frac{t(t-1)}{2}(y_2 - 2y_1 + y_0) + \dots + \binom{t}{k} \Delta_a^k] dt \quad (6.2)$$

Wordt hierin  $k = 1$  gesteld, dus bij vervanging van  $f(x)$  door een eerste-  
graads veelterm, dan volgt er:

$$S \approx h \cdot \int_0^1 [y_0 + t(y_1 - y_0)] dt = h [y_0 t + \frac{1}{2} (y_1 - y_0) t^2] \Big|_0^1 = \\ = \frac{1}{2} h(y_0 + y_1)$$

Dit is de trapeziumregel voor twee ordinaten

Bij  $k = 2$  en  $k = 3$  (veeltermen van tweede en derde graad) volgen uit  
(6.2) respectievelijk de eerste en tweede regel van SIMPSON

$$k = 2 : \quad S \approx \frac{1}{3} h(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

en:

$$k = 3 : \quad S \approx \frac{3}{8} h(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

Door beschouwing van de laatste drie formules blijkt, dat hierin de  
waarde van  $S$  wordt geschat door een gewogen gemiddelde van de ordinaten  
 $y_0, y_1, \dots, y_k$  te vermenigvuldigen met de lengte van het integratie-interval,  
die  $k \cdot h$  bedraagt. Een overzicht van gewichtsfactoren voor  $k \leq 9$  treft men  
aan in tabel 1. Aldus wordt in feite een schatting van het in paragraaf III.2  
vermelde gemiddelde  $f(t)$  gemaakt en daarna de middelwaardestelling (3.4) toe-  
gepast.



VII. DE NAUWKEURIGHEID DER INTEGRATIEMETHODEN

Tot dusver werden uitsluitend integratie-voorschriften afgeleid, de mate waarin de exacte waarde van S werd benaderd komt nu ter sprake.

We definiëren daartoe de fout  $\epsilon$  van de schatting van S als het verschil van de geschatte en exacte waarde van S. Een en ander zal bij de trapeziumregel worden toegelicht (twee ordinaten).

Er geldt dan:

$$\epsilon = \frac{1}{2} h(y_0 + y_1) - \int_a^{a+h} f(x) dx \quad (7.1)$$

Een eerste manier om  $\epsilon$  te schatten kan aan (6.2) worden ontleend. Laat men namelijk in (6.2) onbepaald veel termen toe, dus wordt een hogere graads aanpassing gebruikt, en wordt vervolgens (6.2) gebruikt om (7.1) te berekenen, dan ontstaat voor  $\epsilon$  een (oneindige) reeks. Deze kan na de eerste term, die niet identiek gelijk aan nul is, worden afgebroken. Hierdoor kan worden gesteld (de eerste twee termen vallen weg):

$$\epsilon \approx - h \cdot \int_0^1 \frac{t(t-1)}{2} (y_2 - 2y_1 + y_0) dt = \frac{1}{12} h \cdot \Delta_a^2 f(x)$$

Deze werkwijze toegepast op integratiemethoden, afgeleid uit veelterm aanpassing, levert soortgelijke uitdrukkingen voor  $\epsilon$ . Enkele voorbeelden zijn:

eerste rechthoekregel :  $\epsilon \approx - \frac{1}{2} h \cdot \Delta_a^1$

Simpson :  $\epsilon \approx \frac{1}{90} h \cdot \Delta_a^4$

De kennis van  $\epsilon$  op een dergelijke wijze verkregen eist de constructie van een tabel van m-de verschillen, men zie de laatste kolom van tabel 1 en de toelichting daarop.

Een andere mogelijkheid is, te trachten  $\epsilon$  niet te schatten met hogere verschillen, maar met behulp van hogere afgeleiden. Daartoe zullen deze begrippen met elkaar in verband worden gebracht, waarbij gebruik wordt gemaakt van de middelwaardestelling uit de differentiaalrekening (zie Nota 204, paragraaf V).

Volgens genoemde stelling geldt:

$$\Delta_x^1 = f(x+h) - f(x) = h \cdot f'(x + \theta h) = h \cdot (\Delta_{x+h}^0)' \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

evenzo:

$$\Delta_x^2 = h \cdot (\Delta_{x+\theta_1 h}^1)' = h^2 \cdot (\Delta_{x+\theta_2 h}^0)'' = h^2 \cdot f''(x + \theta_2 h) \quad 0 \leq \theta_1 \leq 1 \\ 0 \leq \theta_2 \leq 2$$

Door inductie naar n volgt:

$$\Delta_a^n f(x) = h^n \cdot f^{(n)}(a + \theta h) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad 0 \leq \theta \leq n$$

Bij gebruik van deze gelijkheid ontstaan de in tabel 1 vermelde schattingen van  $\varepsilon$  (zie toelichting bij tabel 1). Een andere wijze om tot deze schattingen te komen wordt aangegeven in COURANT<sup>x)</sup> (pag. 306), een operatorenmethode wordt toegelicht in MILNE<sup>x)</sup>, pagina 108 en STANTON<sup>x)</sup>, pagina 125.

Hier, doet zich het feit voor, dat bestaanbaarheid en kennis van de afgeleiden van de te integreren functie nodig is, terwijl voor integreerbaarheid slechts de continuïteit van  $f$  behoeft te worden geëist. In paragraaf 10 komen we hierop terug.

<sup>x)</sup> In genoemde werken worden de exacte uitdrukkingen voor  $\varepsilon$  afgeleid, die gelijk zijn aan de uitdrukkingen in tabel 1, echter met andere waarde van  $\theta$ . Aangezien  $\theta$  niet nader kan worden bepaald, kan men volstaan met de hier afgeleide benadering van  $\varepsilon$ . In bijlage 3 wordt aangegeven hoe de exacte uitdrukkingen voor  $\varepsilon$  kunnen worden gevonden.

VIII. DE CONVERGENTIE VAN INTEGRATIEMETHODEN MET VEELTERM-AANPASSING

In het voorgaande werd  $f(x)$  ten behoeve van het integreren in het integratie-interval  $[a, a + kh]$  vervangen door een  $k$ -de graads veelterm bij een vaste 'stapgrootte'  $h$ .

Van de hieruit bij verschillende  $k$  voortvloeiende integratiemethoden kan worden verlangd, dat ze convergeren, dat wil zeggen dat bij een voldoende kleine waarde van  $h$  de numeriek benaderde integraalwaarde willekeurig dicht tot de exacte waarde kan worden gebracht, dus dat  $\epsilon$  samen met  $h$  tot nul nadert. Bovendien is het gewenst, dat  $\epsilon$  voldoende snel kleiner wordt.

Volgens paragraaf VII geldt er (zie de voetnoot in die paragraaf)

$$\epsilon \approx c_k h \cdot \Delta^p f(a) \quad \text{en} \quad \epsilon \approx c_k h^{p+1} f^{(p)}(\theta) \dots \dots a \leq \theta \leq a + kh$$

waarin  $c_k$  bij zekere  $k$  constant is, en  $p$  een geheel getal groter dan  $k$  voorstelt. Neemt men nu aan, dat  $|f^{(p)}(x)|$  en/of  $|\Delta^p f(x)|$  in het integratie-interval een bovengrens  $M$  heeft, dan is ook  $\epsilon$  begrensd als  $h \ll 1$ . Dus dan is:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon \ll |c_k| \cdot M \cdot \lim_{h \rightarrow 0} \left\{ \frac{h^{p+1}}{h^{p+1}} \right\} = 0$$

waaruit de convergentie volgt.

Verder blijken voor  $k < 8$  de gewichtscoefficienten (tabel 1) positief te zijn. Brengt men de gemeenschappelijke factor in rekening, dan is de som der gewichten gelijk aan  $kh$ .

Meetkundig betekent dit bijvoorbeeld bij  $k = 3$ , dat het integratie-interval in vier aaneensluitende deelintervallen wordt gesplitst met lengten respectievelijk:

$$\frac{3}{8} h, \frac{2}{8} h, \frac{2}{8} h \text{ en } \frac{3}{8} h$$

en dat hierop rechthoeken worden geconstrueerd met hoogten respectievelijk:

$$y_0, y_1, y_2 \text{ en } y_3$$

waarna de som der oppervlakten van de rechthoeken als benadering van

S wordt beschouwd (figuur 8: tweede regel van SIMPSON).

Maar deze werkwijze komt overeen met wat wordt gedaan bij de definitie van de bepaalde integraal, als men de tussenpunten  $t_i$  kiest volgens figuur 8.

Het bovenstaande geldt voor  $k \ll 8$ . Men kan dus, bij een vast integratie-interval verwachten, dat bij hogere waarde van  $k$ , dus kleine deel-intervallen, de integratieformule nauwkeuriger zal zijn.

In aansluiting hierop kan worden opgemerkt, dat de integratie door veel-term-aanpassing in het algemeen nauwkeurig kan geschieden door:

1. het gegeven integratie-interval te splitsen in deel-intervallen en binnen elk zo'n deel-interval een 'k-de graads integratie-regel' toe te passen.

of:

2. een regel van voldoende hoge graad te gebruiken over het gehele integratie-interval.

Dit laatste blijkt wel vaak, maar niet altijd mogelijk (zie BENNET, pag. 34).

### IX. DE INTEGRATIEMETHODE VAN GAUSS

In het voorgaande werd bij de integratie gebruik gemaakt van equidistante  $x$ -waarden. Bij de hieronder te bespreken methode van GAUSS wordt door een geschikte keuze van de absciswaarden de nauwkeurigheid bij het integreren belangrijk opgevoerd.

Men gaat ervan uit, dat een aantal (niet-equidistante) waarden  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ;  $x_i < x_{i+1}$ ;  $x_1 = a$ ;  $x_n = b$ ) en de bijbehorende functiewaarden zijn gegeven. Nu wordt getracht met behulp van de gegeven  $x_i$ -waarden in  $[a, b]$  een  $n$ -tal extra waarden  $x_j$  en bijbehorende functiewaarden  $y_j$  te vinden (interpoleren), die aan nader te omschrijven voorwaarden voldoen.

Denkt men zich nu de  $x$ -waarden in volgorde van toenemende grootte geplaatst, waarbij ze worden aangeduid door  $x_m$  ( $m = 1, 2, \dots, 2n$ ) met functiewaarden  $y_m$ , dan stelt men zich voor de gezochte integraal te schatten door:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{m=1}^{2n} w_m \cdot y_m$$

Het blijkt verder mogelijk, de gewichtsfactoren  $w_i$  van de oorspronkelijke  $y_i$  gelijk aan nul te maken door een geschikte keuze van de  $x_j$ 's. De methode van GAUSS werkt dus met  $2n$  punten waarvan slechts de  $n$  geïnterpoleerde expliciet in rekening worden gebracht, dus:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^n w_j \cdot y_j \tag{9.1}$$

Alvorens nader in te gaan op de integratiemethode wordt het integratie-interval  $[a, b]$  getransformeerd in het interval  $[-1, 1]$ , door over te gaan op een nieuwe variabele  $t$ , die met  $x$  samenhangt volgens:

$$x = \frac{1}{2} [a + b + t(b - a)] \tag{9.2}$$

De nu bekend veronderstelde  $x_j$  laten we overeenkomen met de nieuwe waarden  $t_j$ , waarmee de integratie zal worden uitgevoerd.

Volgens GAUSS wordt de te integreren functie vervangen door de

veelterm  $Q(t)$  uit (4.12), waarvan de curve door de punten  $(t_m, y_m)$  gaat. Integreert men  $Q(t)$  over  $[-1, 1]$ , dan komt er:

$$\int_{-1}^{+1} f(t) dt \approx \int_{-1}^{+1} Q(t) dt = \int_{-1}^{+1} \left[ \sum_{m=1}^{2n} Q_m(t) \cdot y_m \right] dt = \sum_{j=1}^n \left[ \int_{-1}^{+1} Q_j(t) dt \right] \cdot y_j$$

Door vergelijking met (9.1) volgt hieruit:

$$w_j = \int_{-1}^{+1} Q_j(t) dt \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (9.3)$$

De  $w_j$ -waarden hangen blijkbaar niet af van de te integreren functie, ze kunnen dus (afhankelijk van  $n$ ) worden getabelleerd.

Nu voegt men aan de bekend veronderstelde interpolatie-waarden  $t_j$  de gegeven absciswaarden, aan te duiden door  $t_{n+1}, t_{n+2}, \dots, t_{2n}$  toe. Dit geeft aanleiding tot het ontstaan van veeltermen  $Q_{n+k}$  waarvoor geldt:

als

$$F_n(t) = (t-t_1) \cdot (t-t_2) \cdot \dots \cdot (t-t_n)$$

en

$$G_k(t) = (t-t_{n+1}) \cdot (t-t_{n+2}) \cdot \dots \cdot (t-t_{n+k-1}) \cdot (t-t_{n+k+1}) \cdot \dots \cdot (t-t_{2n})$$

dan is:

$$Q_{n+k}(t) = \frac{F_n(t) \cdot G_k(t)}{F_n(t_{n+k}) \cdot G_k(t_{n+k})} \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (9.4)$$

Hieruit volgt, dat  $w_{n+k}$  evenredig is met:

$$\int_{-1}^{+1} F_n(t) \cdot G_k(t) dt \quad (9.5)$$

De grootheid  $G_k(t)$  stelt een veelterm in  $t$  van de graad  $n-1$  voor. Deze kan worden opgevat als een gewogen som van  $t^0 (=1), t^1, \dots, t^{n-1}$ . Dit houdt in, dat de uitdrukking (9.5) en dus ook  $w_{n+k}$  gelijk aan nul wordt, als voldaan is aan het stelsel van voorwaarden:

$$\int_{-1}^{+1} F_n(t) \cdot t^p dt = 0 \quad p = 0, 1, \dots, n-1 \quad (9.6)$$

Dit is een stelsel vergelijkingen in de onbekenden  $t_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ), dat de gewenste oplossingen voor  $t_j$  blijkt te leveren.

Door in (9.6)  $F_n(t)$  volledig uit te schrijven blijkt, dat  $t_j$  en  $(-t_j)$  tegelijkertijd aan (9.6) voldoen. Is  $n$  oneven, dan is er sprake van een 'middelste waarde' van  $t_j$ , waarvoor  $t_j = -t_j$  en die dus gelijk is aan nul. De bij twee tegengestelde waarden van  $t_j$  behorende  $w_j$ 's zijn gelijk; dit zal volgen uit het behandelde in paragraaf 11. Rekening houdend met de laatste opmerkingen zijn in tabel 2 de uit (9.6) berekende  $t_1, \dots, t_n$  vermeld, met de corresponderende gewichten  $w_1, \dots, w_n$ .

Tot dusver werd alles uitgedrukt in de variabele  $t$ , zodat nog moet worden overgegaan op de oorspronkelijke variabele  $x$ . In verband met (9.2) volgt er:

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

Dus de integratie-regel krijgt de volgende gedaante:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}(b-a) \sum_{j=1}^n w_j \cdot f\left(\frac{a+b}{2} + t_j \cdot \frac{b-a}{2}\right) \quad (9.7)$$

waarin  $w_j$  en  $t_j$  aan tabel 2 worden ontleend.

Ook bij de GAUSS-integratie kan een schattingsformule voor de fout worden verkregen. Zonder bewijs wordt hier vermeld, dat een der mogelijke formules luidt:

$$\varepsilon = \frac{-2}{2n+1} \cdot \left[ \frac{(n!)^2}{(2n)!} \right]^2 \cdot \frac{(b-a)^{2n}}{(2n)!} \cdot f^{(2n)}(\theta) \quad a < \theta < b \quad (9.8)$$

De hierin optredende coëfficiënt van  $f^{(2n)}(\theta)$  heeft de limiet nul als men  $n$  onbeperkt laat toenemen. (Een bewijs wordt verkregen door voor de faculteiten de benaderingsformule van STIRLING, zie BRONSTEIN pag. 138, in te vullen). Is de functie  $f^{(2n)}(x)$  continu binnen  $[a, b]$ , dan heeft de absolute waarde van deze functie een bovengrens  $M_n$ . Hierdoor geldt, in verband met het voorgaande:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon = 0$$

Door dus voldoende interpolatie-punten te gebruiken kan de fout willekeurig klein worden gemaakt.

X. EEN NUMERIEK VOORBEELD

Bij wijze van voorbeeld zullen we de waarde van de integraal:

$$S = \int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0,69314718 \text{ (afgerond)} \quad (10.1)$$

op verschillende manieren numeriek benaderen.

Eerst worden veeltermen van de graad  $k = 1, 2$  en  $4$  aangepast, zoals aangegeven in onderstaande tabel. De stapgrootte  $h$  bedraagt  $0,25$ . De trapeziumregel ( $k=1$ ) wordt hierbij toegepast op elk tweetal opeenvolgende ordinaten  $y_j$  en de resultaten gesommeerd, bij  $k = 2$  wordt het integratie-interval in twee dubbele intervallen verdeeld. Bij  $k = 4$  kan de 'vierdegraadsregel' direct worden toegepast. De berekeningen verlopen volgens onderstaand overzicht.

			k = 1		k = 2		k = 4	
j	$x_j$	$y_j = \frac{1}{x_j}$	$C_j$	$C_j \cdot y_j$	$C_j$	$C_j \cdot y_j$	$C_j$	$C_j \cdot y_j$
0	1,00	1,00000	1	1,00000	1	1,00000	7	7,00000
1	1,25	0,80000	2	1,60000	4	3,20000	32	25,60000
2	1,50	0,66667	2	1,33333	2	1,33333	12	8,00000
3	1,75	0,57143	2	1,14286	4	2,28571	32	18,28571
4	2,00	0,50000	1	0,50000	1	0,50000	7	3,50000
			<u>+ 8</u>	<u>+ 5,57619</u>	<u>+ 12</u>	<u>+ 8,31904</u>	<u>+ 90</u>	<u>+ 62,38571</u>
$S \approx \frac{\sum C_j y_j}{\sum C_j}$				0,69702		0,69325		0,69317
S				<u>0,69315</u>		<u>0,69315</u>		<u>0,69315</u>
e				<u>0,00387</u>		<u>0,00011</u>		<u>0,00003</u>
eindcorrectie <sup>x)</sup>				<u>- 0,00391</u>		<u>- 0,00012</u>		<u>- 0,00006</u>
e'				<u>- 0,00004</u>		<u>- 0,00001</u>		<u>- 0,00003</u>

De fout neemt hier af bij gebruik van een hogere graadsveelterm.

<sup>x)</sup> zie bijlage 3



Laten we vervolgens  $\epsilon$  onbekend veronderstellen en trachten de waarde ervan te schatten. In ons voorbeeld 10.1 geldt voor de n-de afgeleide van  $f(x)$ :

$$f^{(n)}(x) = (-1)^n n! x^{-n-1} \tag{10.2}$$

Voor  $k = 1$  volgt uit (10.2) en de laatste kolom van tabel 1, dat bij twee opeenvolgende ordinaten geldt:

$$\epsilon = \epsilon_2 = \frac{1}{12} h^3 (-1)^2 2! \theta^{-3} = \frac{1}{6} h^3 \theta^{-3}$$

waarin  $\theta$  een niet nader te bepalen punt in het interval  $[1,2]$  aanduidt. Maar men kan wel een binnen dit interval geldende bovengrens van de absolute waarde van  $\epsilon_2$  verkrijgen door  $\theta$  gelijk aan 1 te stellen. Bij gebruik van vijf ordinaten, dus vier deelintervallen binnen  $[1,2]$ , geldt dan ook:

$$|\epsilon| \leq 4 \cdot \left| \frac{1}{6} h^3 \right| = \frac{2}{3} h^3$$

Wanneer  $k = 2$  of  $4$  vindt men op dezelfde wijze, dat  $|\epsilon|$  niet groter dan  $\frac{8}{15} h^5$ , respectievelijk  $\frac{384}{63} h^7$  kan zijn. Dit zijn bedragen, die in ruime mate kunnen afwijken van de juiste waarde van  $|\epsilon|$ , zoals wordt gedemonstreerd in de volgende tabel, waarin met  $h = 0,25$  is gewerkt.

( $h = 0,25$ )	$k = 1$	$k = 2$	$k = 4$
bovengrens $ \epsilon $	0,01042	0,00052	0,00037
juiste $ \epsilon $	0,00387	0,00020	0,00002

Omgekeerd kan men een zekere nauwkeurigheid eisen en de waarde van  $h$  hierbij aanpassen. Verlangt men bijvoorbeeld als  $k = 4$  dat  $\epsilon$  in absolute waarde kleiner dan  $10^{-4}$  wordt, dan moet:

$$\frac{384}{63} h^7 < 10^{-4} \quad \text{en dus} \quad h < 0,206 \quad \text{dus kies } h = 0,20$$

Deze waarde van  $h$  is kleiner dan strikt nodig is om de gewenste nauwkeurigheid te bereiken.

Heeft  $f(x)$  een wat ingewikkelder vorm dan in ons voorbeeld, dan zal in het algemeen niet eenvoudig volgens het bovenstaande een grens voor  $|\varepsilon|$  aan te geven zijn door de gecompliceerde vorm van de (hogere) afgeleiden van  $f(x)$ . Ook zijn vaak, zoals in het geval van een getabelleerde functie, de afgeleiden niet bekend. Dan kan nog met  $m$ -de verschillen worden gewerkt bij het schatten van  $\varepsilon$ . In het voorbeeld verloopt deze berekening als  $h = 0,25$  en  $k = 1$  respectievelijk  $2$  als volgt:

j	$x_j$	$y_j = \Delta^0$	$\Delta^1$	$\Delta^2$	$\Delta^3$	$\Delta^4$
0	1,00	1,00000	- 0,20000	+ 0,06667	- 0,02858	+ 0,01430
1	1,25	0,80000	- 0,13333	+ 0,03809	- 0,01428	
2	1,50	0,66667	- 0,09524	+ 0,02381		
3	1,75	0,57143	- 0,07143			
4	2,00	0,50000				

en verder

$$\text{bij } k = 1: \quad \varepsilon = 4 \cdot \frac{1}{12} h \Delta^2(y_0) = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot 0,06667 = 0,00556$$

$$\text{bij } k = 2: \quad \varepsilon = 2 \cdot \frac{1}{90} h \Delta^4(y_0) = \frac{1}{45} \cdot \frac{1}{4} \cdot 0,01430 = 0,00008$$

Men vergelijkte deze waarden voor  $\varepsilon$  met die uit de eerste tabel van deze paragraaf.

Het zal na het voorgaande duidelijk zijn, dat onze formules voor  $\varepsilon$  niet in de eerste plaats zijn bedoeld om een nauwkeurige schatting van deze grootte te geven, maar om de orde van grootte van  $\varepsilon$  te leren kennen. De formules waarin de hogere machten van  $h$  voorkomen, geven een indruk hoe snel ' $\varepsilon$  naar nul gaat' als  $h$  kleiner (dan 1) wordt gemaakt.

Het schatten van  $\varepsilon$  kan vaak worden vermeden door de volgende werkwijze, waarbij toch een indruk van de nauwkeurigheid wordt verkregen. Bij zekere stapgrootte  $h$  wordt de integraal geschat volgens een eenvoudige regel, bijvoorbeeld de trapeziumregel. Daarna wordt dezelfde rekenwijze toegepast met de gehalveerde stapgrootte. Zo ontstaan twee opeenvolgende schattingen van de integraal. Men herhaalt de halvering van de stapgrootte zo vaak, totdat

twee opeenvolgende schattingen minder dan een te voren aangenomen bedrag verschillen. De laatste schatting wordt als de juiste waarde van de integraal beschouwd.

Deze werkwijze demonstreren we aan de hand van ons voorbeeld (10.2) bij de trapeziumregel, door middel van onderstaand overzicht, waarin de gebruikte coëfficiënten zijn vermeld.

nummer berekening	gemeensch. h	x=1 factor	x=1	$\frac{9}{8}$	$\frac{10}{8}$	$\frac{11}{8}$	$\frac{12}{8}$	$\frac{13}{8}$	$\frac{14}{8}$	$\frac{15}{8}$	2	integraal (trapezium- regel)
			y=1	$\frac{8}{9}$	$\frac{8}{10}$	$\frac{8}{11}$	$\frac{8}{12}$	$\frac{8}{13}$	$\frac{8}{14}$	$\frac{8}{15}$	$\frac{1}{2}$	
1	1	$\frac{1}{2}$	1									1 0,75000
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	1				2					1 0,70833
3	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	1		2		2		2			1 0,69702
4	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1 0,69412

Gezien het verloop der benaderingen van de integraal kan men aannemen, dat na de vierde berekening de eerste twee cijfers achter de komma juist zijn.

— 0 — 0 — 0 —

Tenslotte passen we de methode van GAUSS op het voorbeeld toe met gebruik van slechts drie ordinaten.

Hierbij wordt het integratie-interval  $[1,2]$  van de variabele  $x$  getransformeerd in het interval  $[-1,1]$  van  $t$  door de relatie (zie (9.2)):

$$x = \frac{1}{2} (3 + t)$$

In verband met (9.7) ontstaat dan het volgende rekenschema, waarin  $w_j$  en  $t_j$  zijn ontleend aan tabel 2

j	$t_j$	$w_j$	$y_j = \frac{1}{3+t_j}$	$w_j y_j$
1	- 0,774597	0,555556	0,449357	0,2496428
2	0,000000	0,888889	0,333333	0,2962963
3	+ 0,774597	0,555556	0,264929	0,1471828
integraal-waarde volgens GAUSS				0,693122
				$\epsilon = - 0,000025$

Hier blijkt de methode van GAUSS met drie ordinaten nauwkeuriger te zijn dan de regel van SIMPSON, toegepast op vijf ordinaten. Het is dan ook vooral vanwege de besparing in ordinaten dat de methode van GAUSS wordt gebruikt.

Door in (9.8) de waarde van  $\theta$  gelijk aan 1 te stellen volgt er in verband met (10.2):

$$|\varepsilon| \leq \frac{2}{7} \cdot \left[ \frac{(3!)^2}{6!} \right]^2 : \frac{1^{2n}}{6!} \cdot (-1)^6 \cdot 6! = 0,00071$$

een waarde die overigens aanzienlijk hoger is dan de juiste waarde van  $|\varepsilon|$ .

XI. AFGERONDE INTERPOLATIEPUNTEN BIJ DE GAUSS-INTEGRATIE, VOORBEELD

In de vorige paragraaf werd verondersteld, dat de te integreren functie door een formule was gegeven. Hierdoor konden door berekening de functiewaarden in de interpolatie-punten  $t_j$  nauwkeurig worden bepaald.

Anders wordt het, wanneer de functie uitsluitend in tabelvorm bekend is. In dat geval zal in het algemeen eerst moeten worden geïnterpoleerd om met behulp van de waarden  $f(t_j)$  de GAUSS-integratie te kunnen uitvoeren.

Om de interpolatie te vermijden of op zijn minst te vereenvoudigen kan men de  $t_j$ 's uit tabel 2 afronden op enkele cijfers achter de komma en bij deze  $t_j$ -waarden de passende  $w_j$ 's berekenen volgens (9.3). Hierbij worden met behulp van de afgeronde waarden van  $t_j$  veeltermen van LAGRANGE (par.4) gevormd, die worden geïntegreerd over  $[-1, 1]$ .

Een eenvoudiger rekenschema om  $w_j$  te bepalen volgt uit onderstaande overwegingen, die leiden tot de tabellen 2A, B en C. Wanneer een veelterm van een graad lager dan  $2n$  volgens GAUSS wordt geïntegreerd, zal de uitkomst, op reken-onnauwkeurigheden na, gelijk zijn aan de exacte integraalwaarde. Omdat immers de gegeven functie wordt vervangen door een veelterm van de graad  $2n-1$  (volgens de opmerking vóór (9.3)). In het bijzonder zullen exacte uitkomsten worden verkregen bij de GAUSS-integratie van de machten  $t^k$  ( $k = 0, 1, \dots, 2n-1$ ). Daarom geldt er:

$$\sum_{j=1}^n w_j t_j^k = \int_{-1}^{+1} t^k dt = U_k \begin{cases} = 0 & (k \text{ oneven}) \\ = \frac{2}{k+1} & (k \text{ even}) \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots, 2n-1 \quad (11.1)$$

Hierin stellen  $t_j$  de (afgeronde) interpolatiepunten uit de tabellen 2, 2A, B, C voor en  $w_j$  de gewichtscoefficiënten, die kunnen worden bepaald uit een  $n$ -tal, bijvoorbeeld de eerste  $n$  van bovenstaande lineaire vergelijkingen in de onbekenden  $w_j$ .

Worden in (11.1) de  $t_j$ 's vervangen door hun tegengestelde, dan levert het stelsel dezelfde oplossingen voor  $w_j$ . Dit bevestigt de opmerking uit paragraaf 9, dat de bij twee tegengestelde waarden van  $t_j$  behorende  $w_j$ 's gelijk zijn.

Tenslotte nog enkele praktische opmerkingen:

Het komt voor, dat van een functie  $y = f(x)$  een stel waarden  $(x_j, y_j)$  worden bepaald en dat men hiermee een numerieke integratie wil uitvoeren, bijvoorbeeld om een oppervlakte te bepalen. Dan kan het aanbeveling verdienen de  $x_j$ 's equidistant te kiezen, zodat de methoden van integratie met veeltermaanpassing kunnen worden gebruikt. Kunnen door omstandigheden slechts weinig metingen worden verricht, dan is het gunstig de onderlinge plaats van de  $x_j$ 's zo te kiezen, dat de daaruit afgeleide waarden van  $t_j$  het patroon van GAUSS volgen. Hierna kan de GAUSS-integratie met de gekozen (afgeronde)  $t_j$ -waarden volgen.

We passen nu de GAUSS-integratie toe op het voorbeeld 10.1 en gebruiken hierbij drie ordinaten en respectievelijk drie en één decimalen in  $t_j$ . Het overzicht van de berekeningen wordt:

$j$	$t_j$	Indien $t_j$ afgerond op 3 decimalen		Indien $t_j$ afgerond op 1 decimaal	
		$w_j$	$y_j$	$w_j$	$y_j$
1	- 0,775	0,554977	0,449438	0,520833	0,454545
2	0,000	0,890045	0,333333	0,958333	0,333333
3	+ 0,775	0,554977	0,264901	0,520833	0,263158
Integraal volgens GAUSS			0,693123		0,693248

Ook hier zijn de resultaten opmerkelijk nauwkeurig.

## XII. MEERVOUDIGE INTEGRALEN

Tot nu toe kwamen integralen met één onafhankelijk veranderlijke  $x$  ter sprake. Het blijkt echter, dat de besproken integratiemethoden kunnen worden veralgemeend zodat men ze kan toepassen bij de berekening van meervoudige integralen.

Laten we dit illustreren bij de GAUSS-integratie van een functie van twee variabelen:

$$S = \int_{y=c}^d \int_{x=a}^b f(x,y) dx dy$$

Het integratie-gebied is een rechthoek, de waarde van  $S$  is gelijk aan de inhoud van de ruimte boven de rechthoek en beneden het vlak  $z = f(x,y)$ , zoals aangegeven in figuur 9.

Door een transformatie van  $x$  en  $y$  in de trant van (9.2) kan het vraagstuk worden teruggebracht tot de berekening van:

$$S = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(x,y) dx dy = \int_{-1}^{+1} \left[ \int_{-1}^{+1} f(x,y) dx \right] dy \quad (12.1)$$

De laatste gelijkheid is volgens de integraalrekening zinvol en geeft aan dat eerst de binnenste (enkelvoudige) integraal wordt berekend, waarbij  $y$  als onbekende constante wordt opgevat. Dit levert een uitdrukking in  $y$ , die vervolgens naar  $y$  wordt geïntegreerd.

Wordt op (12.1) bijvoorbeeld de GAUSS-integratie toegepast met twee tussenpunten, dan verkrijgt men voor de binnenste integraal:

$$\int_{-1}^{+1} f(x,y) dx \approx w_1 \cdot f(t_1,y) + w_2 \cdot f(t_2,y)$$

Door deze uitdrukking naar  $y$  te integreren volgens GAUSS komt er:

$$S \approx w_1 \cdot [w_1 \cdot f(t_1,t_1) + w_2 \cdot f(t_1,t_2)] + w_2 \cdot [w_1 \cdot f(t_2,t_1) + w_2 \cdot f(t_2,t_2)]$$

In korte notatie wordt dit, uitgewerkt (zie figuur 10):

$$S \approx w_1 w_1 f_{11} + w_1 w_2 f_{12} + w_2 w_1 f_{21} + w_2 w_2 f_{22}$$

Bedraagt het aantal tussenpunten  $n$ , dan ontstaat analoog na overgang op de oorspronkelijke variabelen

$$S \approx \frac{b-a}{2} \cdot \frac{d-c}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \cdot z_{ij}$$

waarin:

$$z_{ij} = f\left(\frac{b+a}{2} + t_i \cdot \frac{b-a}{2}, \frac{d+c}{2} + t_j \cdot \frac{d-c}{2}\right)$$

Wat voor de GAUSS-integratie werd afgeleid geldt ook voor integratie met equidistante tussenpunten, men geve de symbolen  $t_i, t_j, w_i$  en  $w_j$  slechts de passende betekenis.



### XIII. SAMENVATTING

In deze nota werden enkele methoden voor numerieke integratie afgeleid en toegelicht. De eenvoudigste hiervan konden worden ontleend aan de definitie van de bepaalde integraal. Bij het ontwerpen van nauwkeuriger (en daardoor ingewikkelder) rekenschema's voor numerieke integratie kwamen begrippen ter sprake zoals 'm-de verschillen', 'veeltermen van LAGRANGE' en 'aanpassing van een k-de graadcurve'.

Ook werd bij de verschillende methoden aandacht besteed aan de nauwkeurigheid, dat wil zeggen de mate waarin de numerieke integraal afwijkt van de exacte waarde.

De integratiemethode van GAUSS werd behandeld vanwege haar grote nauwkeurigheid. De in de geraadpleegde literatuur bestaande verzameling tabellen met constanten voor GAUSS-integratie is uitgebreid met de tabellen 2A en 2C en opgenomen in bijlage II.

Tenslotte is in het laatste hoofdstuk aangestipt hoe het probleem van de numerieke meervoudige integratie kan worden opgelost met behulp van de reeds beschreven methoden van enkelvoudige integratie.

Een aantal integratieregels werd niet behandeld, zoals bijvoorbeeld de 'open' regels bij equidistante tussenpunten, waarbij de ordinaten van begin- en eindpunt van het integratie-interval niet worden gebruikt.

In analogie met het voorgaande kunnen regels voor numerieke (meervoudige) differentiatie worden afgeleid, die uiteraard alleen van belang kunnen zijn, wanneer de betreffende functie niet in een (hanteerbare) formule-vorm is gegeven. Men kan hiertoe bijvoorbeeld rondom het punt, waarin de afgeleide moet worden bepaald een interval aanbrengen met equidistante deelpunten. Vervolgens kan de afgeleide benaderingsgewijs worden bepaald door (6.2) naar  $x$  te differentiëren. Voor  $k = 1, 2, \dots$  ontstaat dan een stel differentiatie-formules in de trant van tabel 1.

LITERATUUR

- BENNET, A.A. e.a., 1963 - Numerical Integration of Differential Equations.  
New-York (I.C.W. 11/200)
- BRONSTEIN, I.N. en K.A. SEMENDJAJEW, 1961 - Taschenbuch der Mathematik.  
Leipzig (I.C.W. 11/166)
- COURANT, R., 1955 - Vorlesungen über Differential- und Integralrechnung,  
Band I en Band II, Heidelberg (I.C.W. 11/14)
- LANCZOS, C., 1956 - Applied Analysis. New Jersey (I.C.W. 11/112)
- MILNE, W.E., 1953 - Numerical Calculus, New Jersey (T.H., Delft)
- STANTON, R.G., 1961 - Numerical Methods for Science and Engineering.  
New Jersey (I.C.W. 11/156)

Bijlage 1

Tabel 1

Coëfficiënten voor numerieke integratie over het interval  $[x_0, x_k]$  bij gebruik van equidistante (tussen)punten  $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k$  met onderlinge afstanden ter grootte  $h$ .

k	gemeensch. factor	j=0	1	2	3	4	5	6	7	8	$\epsilon$	
											c	p
1	1/2	1	1								1/12	2
2	1/3	1	4	1							1/90	4
3	3/8	1	3	3	1						3/80	4
4	2/45	7	32	12	32	7					8/945	6
5	5/288	19	75	50	50	75	19				275/12096	6
6	1/140	41	216	27	272	27	216	41			9/1400	8
7	7/17280	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751		8183/518400	8
8	4/14175	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989	2368/467775	10

Toelichting

De integratie over het interval  $[x_0, x_3]$  kan geschieden met de regel  $k = 3$  uit de tabel, dus:

$$S \approx \frac{3}{8} h \cdot [1 \cdot y_0 + 3 \cdot y_1 + 3 \cdot y_2 + 1 \cdot y_3]$$

waarbij (laatste kolom van tabel 1):

$$\epsilon \approx \frac{3}{80} h \cdot \Delta^4 y_0 \quad \text{maar ook } \epsilon \approx \frac{3}{80} h \cdot h^4 y^{(4)}(\theta) \dots \dots \dots x_0 < \theta < x_3$$

$$[c \cdot h \cdot \Delta^p y_0]$$

$$[c \cdot h \cdot h^p y^{(p)}(\theta)]$$

Bijlage 2

Tabel 2

Coëfficiënten voor GAUSS-integratie,  $t_j$  in tien decimalen

n	$\pm t_j$	$w_j$
2	0,5773502692	1
3	0	0,8888888889
	0,7745966692	0,5555555556
4	0,3399810435	0,6521451549
	0,8611363116	0,3478548451
5	0	0,5688888889
	0,5384693101	0,4786286705
	0,9061798459	0,2369268851
6	0,2386191861	0,4679139346
	0,6612093865	0,3607615730
	0,9324695142	0,1713244924
7	0	0,4179591837
	0,4058451514	0,3818300505
	0,7415311856	0,2797053915
	0,9491079123	0,1294849662
8	0,1834346425	0,3626837834
	0,5255324099	0,3137066459
	0,7966664774	0,2238103445
	0,9602898565	0,1012285363
9	0	0,3302393550
	0,3242534234	0,3123470770
	0,6133714327	0,2606106964
	0,8360311073	0,1806481607
	0,9681602395	0,0812743884
10	0,1488743390	0,2955242247
	0,4333953941	0,2692667193
	0,6794095683	0,2190863625
	0,8650633667	0,1494513492
	0,9739065285	0,0666713443

Tabel 2A

Coëfficiënten voor GAUSS-integratie,  $t_j$  in drie decimalen

n	$\pm t_j$	$w_j$
2	0,577	1
3	0	0,8900450919
	0,775	0,5549774540
4	0,340	0,6520280871
	0,861	0,3479719129
5	0	0,5681538994
	0,538	0,4785959886
	0,906	0,2373270617
6	0,239	0,4683136289
	0,661	0,3596286148
	0,932	0,1720577563
7	0	0,4174825630
	0,406	0,3827092501
	0,741	0,2790876062
	0,949	0,1294618622
8	0,183	0,3623866336
	0,526	0,3149075568
	0,797	0,2211510484
	0,960	0,1015547611
9	0	0,3303437555
	0,324	0,3117332740
	0,613	0,2611335236
	0,836	0,1804958263
	0,968	0,0814654983
10	0,149	0,2954895955
	0,433	0,2687367313
	0,679	0,2194133431
	0,865	0,1497942733
	0,974	0,0665660569

Tabel 2B

Coëfficiënten voor GAUSS-integratie,  $t_j$  in twee decimalen

n	$\pm t_j$	$w_j$
2	0,58	1
3	0	0,8755832912
	0,77	0,5622083544
4	0,34	0,6510683761
	0,86	0,3489316239
5	0	0,5652007082
	0,54	0,4860117674
	0,91	0,2313878782
6	0,24	0,4694282398
	0,66	0,3554559718
	0,93	0,1751157884
7	0	0,4087667652
	0,40	0,3816431469
	0,74	0,2855469914
	0,95	0,1284264790
8	0,18	0,3612315197
	0,53	0,3221781303
	0,80	0,2153411620
	0,96	0,1012491880
9	0	0,3274777490
	0,32	0,3073797883
	0,61	0,2682840654
	0,84	0,1834544443
	0,97	0,0771428275
10	0,15	0,2961081705
	0,43	0,2629739592
	0,68	0,2327488973
	0,87	0,1382731649
	0,97	0,0698958081

Tabel 2C

Coëfficiënten voor GAUSS-integratie,  $t_j$  in één decimaal

n	$t_j$	$w_j$
2	0,6	1
3	0	0,9583333333
	0,8	0,5208333333
4	0,3	0,6620370370
	0,9	0,3379629630
5	0	0,4855967078
	0,5	0,5000000000
	0,9	0,2572016461
6	0,2	0,4720538721
	0,7	0,3537037037
	0,9	0,1742424242
7	0	0,3468607902
	0,4	0,4416416916
	0,7	0,1535029596
	0,9	0,2314249536
8	0,2	0,3732048375
	0,5	0,2679225536
	0,8	0,2984669651
	1,0	0,0604056437
9	0	0,1585341956
	0,3	0,4376836828
	0,6	0,1313711355
	0,8	0,2917496965
	1,0	0,0599283873
10	0,1	0,2343786186
	0,4	0,3291605514
	0,7	0,2531687479
	0,9	0,1527416297
	1,0	0,0305504524

Bijlage 3

Het toepassen van een eindcorrectie in tabel 1

Wanneer men kan beschikken over de hogere afgeleiden van de te integreren functie, of een goede schatting van de afgeleiden, is het mogelijk door een eenvoudige correctie de nauwkeurigheid van de integratie-regels uit tabel 1 aanzienlijk te verhogen.

Dit wordt voor het geval  $k = 1$  nader uitgewerkt. Hiertoe wordt eerst  $\varepsilon$  berekend. Het integratie-interval zij  $[0, h]$ , laat de ordinaten van de eindpunten  $y_0$  en  $y_1$  zijn. Neem aan, dat de volgende ontwikkeling van een functie in een Taylorreeks geldig is:

$$f(x+th) = f(x) + th \cdot f'(x) + \frac{t^2 h^2}{2!} f''(x) + \frac{t^3 h^3}{3!} f'''(x) + \dots \quad (1)$$

waarbij het verschil tussen linker- en rechterlid van (1) willekeurig klein kan worden gemaakt door aan de rechterzijde een voldoende aantal termen in rekening te brengen. Wil men het linkerlid naar  $x$  differentiëren of integreren, dan is het geoorloofd, daartoe het rechterlid term voor term te bewerken:

Nu moet worden berekend:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}h (y_0 + y_1) - \int_0^h f(x) dx \approx \hat{S} - S \quad (2)$$

Dit kan gebeuren door alle termen van  $\varepsilon$  te ontwikkelen in een machtreeks in het punt  $x = 0$ . Door in (1) respectievelijk  $h = 0$  en  $h = 1$  in te vullen volgt er bij  $x = 0$ :

$$\begin{aligned} y_0 &= y_0 \\ y_1 &= y_0 + h y_0' + \frac{h^2}{2!} y_0'' + \frac{h^3}{3!} y_0''' + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Door integratie van (1) komt er:

$$S = h \cdot \int_{t=0}^1 f(0 + th) dt = \int_{u=0}^h f(u) du$$



$$S = h y_0 + \frac{h^2}{2!} y_0' + \frac{h^3}{3!} y_0'' + \dots \quad (4)$$

Nu worden (3) en (4) in (2) ingevuld, waardoor een reeksontwikkeling voor  $\epsilon$  ter plaatse  $x = 0$  ontstaat. Breekt men de reeks af bij de eerste term, die niet identiek gelijk is aan nul, dan blijkt:

$$\epsilon = \left(\frac{1}{4} h^3 - \frac{1}{6} h^3\right) \cdot f'''(\theta) = \frac{1}{12} h^3 f'''(\theta) \quad 0 \leq \theta \leq h$$

welk resultaat reeds bekend was.

Men kan vervolgens trachten nog meer begintermen van  $\epsilon$  te laten wegvallen door een wijziging  $f$  in  $\hat{S}$  aan te brengen. Uit de huidige waarde van  $\epsilon$  blijkt, mede in verband met de wijze waarop  $\epsilon$  is berekend, dat bij  $\hat{S}$  een bedrag

$$f = -\frac{1}{12} h^3 y_0''$$

moet worden bijgeteld. Echter blijkt door differentiatie van (1) naar  $x$  en vervolgens invullen hierin van  $x = 0$  en  $t = 1$ , dat:

$$\delta \approx \frac{1}{12} h^2 (y_0' - y_1') = -\frac{1}{12} h^3 y_0'' = \frac{1}{12} \frac{h^4}{2!} y_0'' + \dots$$

Daarom nemen we in plaats van  $\hat{S}$ , de nieuwe schatter van  $S$ , namelijk

$$\hat{S}' = \frac{1}{2} h (y_0 + y_1) + \frac{1}{12} h^2 (y_0' - y_1') \quad (5)$$

waarbij behoort de fout:

$$\epsilon^1 = -\frac{1}{720} h^5 f^{(4)}(\theta) \quad 0 \leq \theta \leq h$$

welke bij een niet al te grote waarde van  $h$  in absolute waarde kleiner zal zijn dan  $\epsilon$ . Past men de trapeziumregel op een aantal deelintervallen van het integratie-interval toe, dan moeten de uitdrukkingen (5) worden gesommeerd en er ontstaat:

$$S \approx \frac{1}{2} h (y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \dots + y_n) + \frac{1}{12} h^2 (y_0' - y_n') \quad (6)$$

de algemene trapeziumregel met eindcorrectie, waarbij:

$$|\varepsilon| \leq \frac{1}{720} h^5_n M_4 \quad \text{als} \quad M_4 = \max. |f^{(4)}(x)| \text{ in } [0, nh]$$

Aan de hand van de waarde  $\varepsilon'$  zou  $\hat{S}'$  met een bedrag  $c'$  kunnen worden gecorrigeerd. Hierdoor zouden gewijzigde uitdrukkingen (5) ontstaan, die bij sommatie leiden tot een gecorrigeerde vorm van (6). Zo doorgaande vindt men de formule van Euler-Maclaurin (STANTON, pag. 129).

Wat in het bovenstaande is uitgewerkt voor de trapeziumregel, geldt geheel analoog voor de overige integratiemethoden uit tabel 1. Het blijkt dat de correctieterm  $\delta$  gelijk is aan:

$$\delta = \frac{c}{k} \cdot h^p (y_0^{(p-1)} - y_k^{(p-1)})$$

waarin  $c$ ,  $k$  en  $p$  worden gedefinieerd als in tabel 1.

In het numerieke voorbeeld van paragraaf X zijn enkele eindcorrecties berekend.

Integratie  
over  $[a,b]$ ,  
par. II

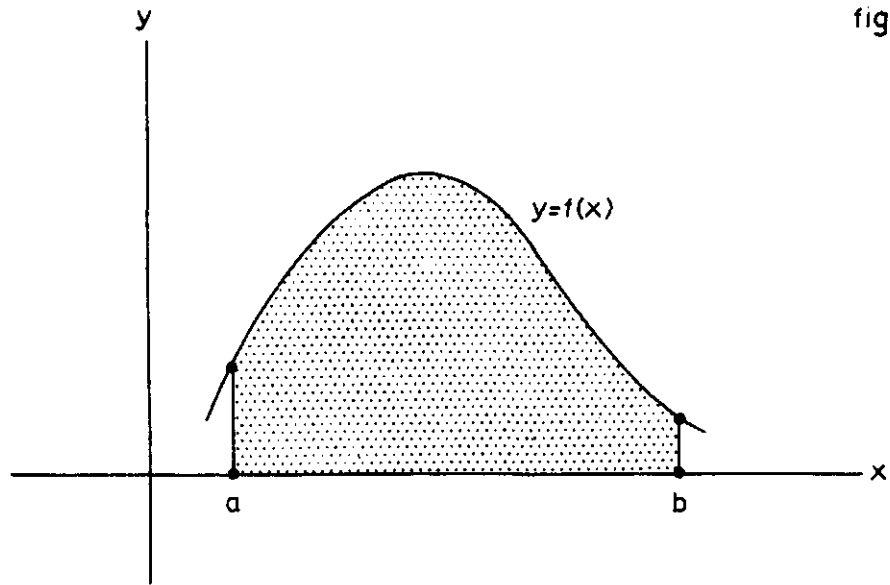


fig. 1

Definitie  
bepaalde integraal,  
par. III 1

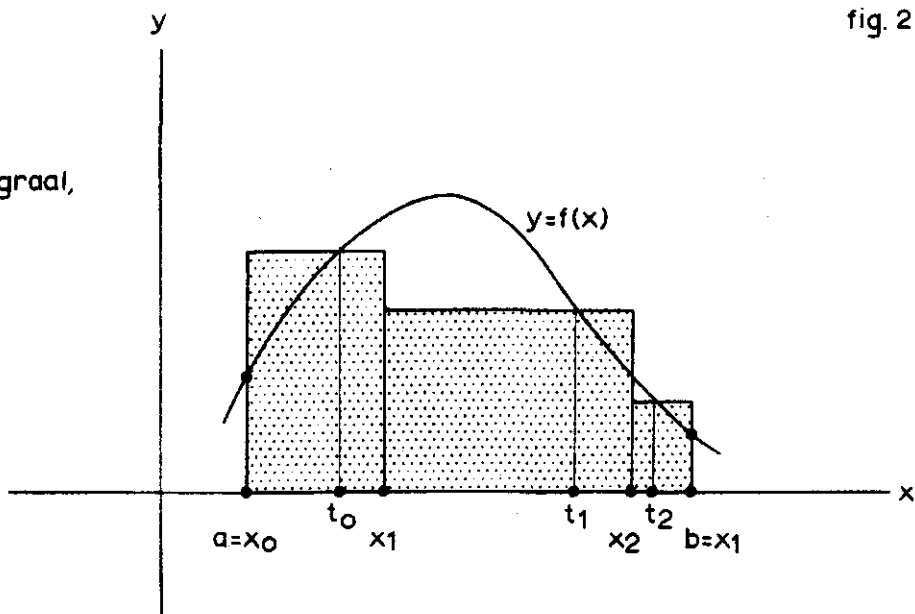


fig. 2

Middelwaardestelling  
uit de integraalrekening,  
par. III 2

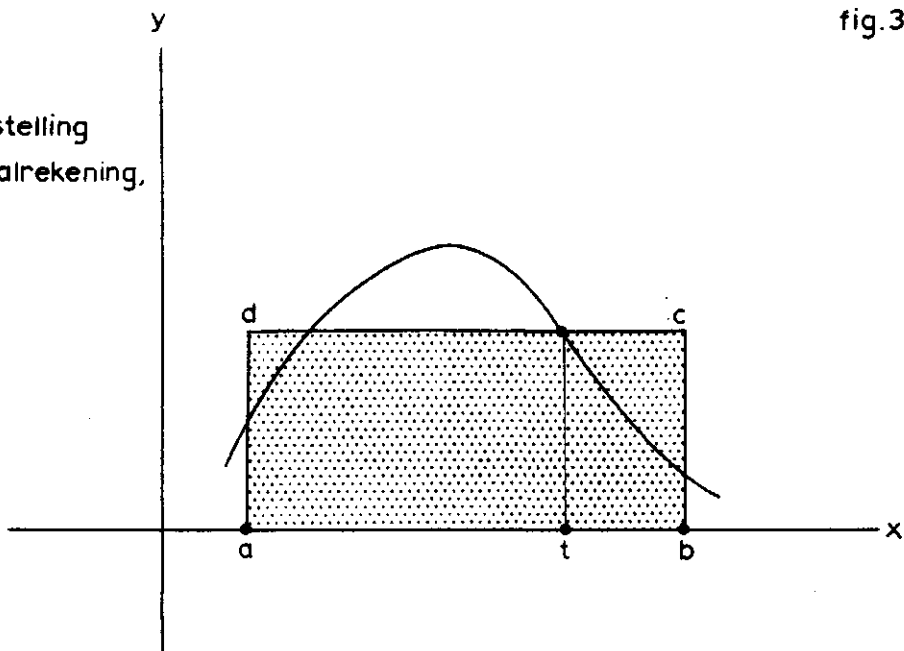


fig. 3

Eerste  
rechthoekregel  
par. V

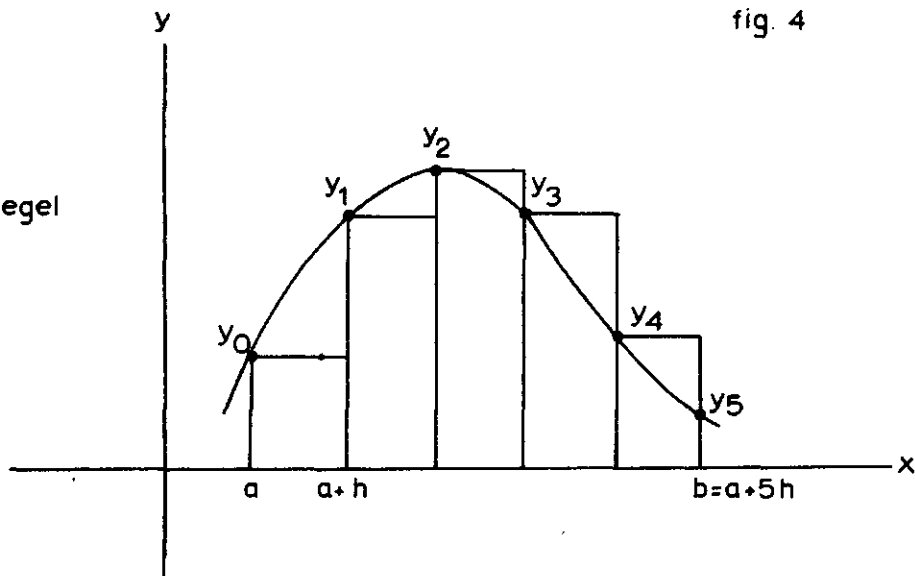


fig. 4

Tweede  
rechthoekregel  
par. V

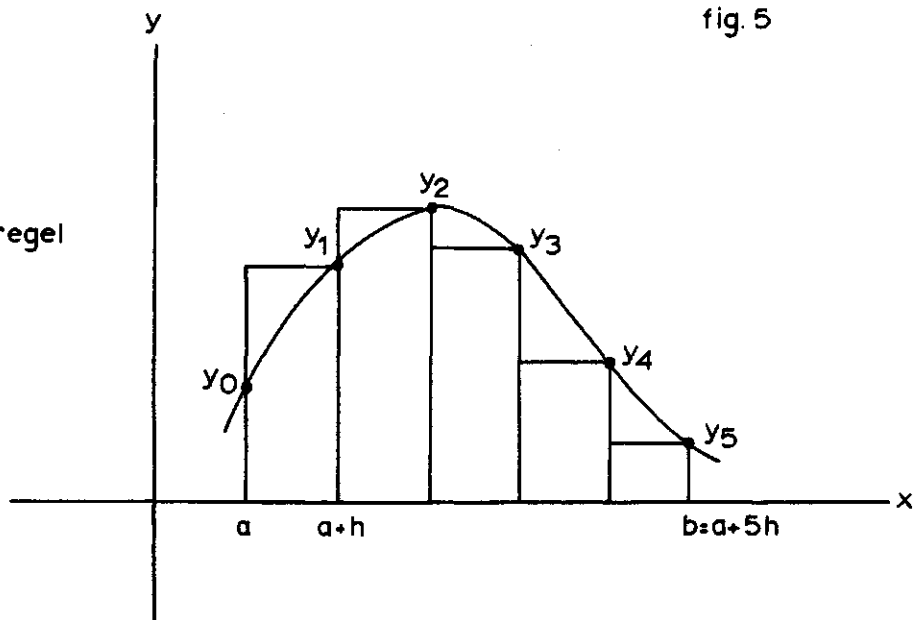


fig. 5

Trapeziumregel  
par. V

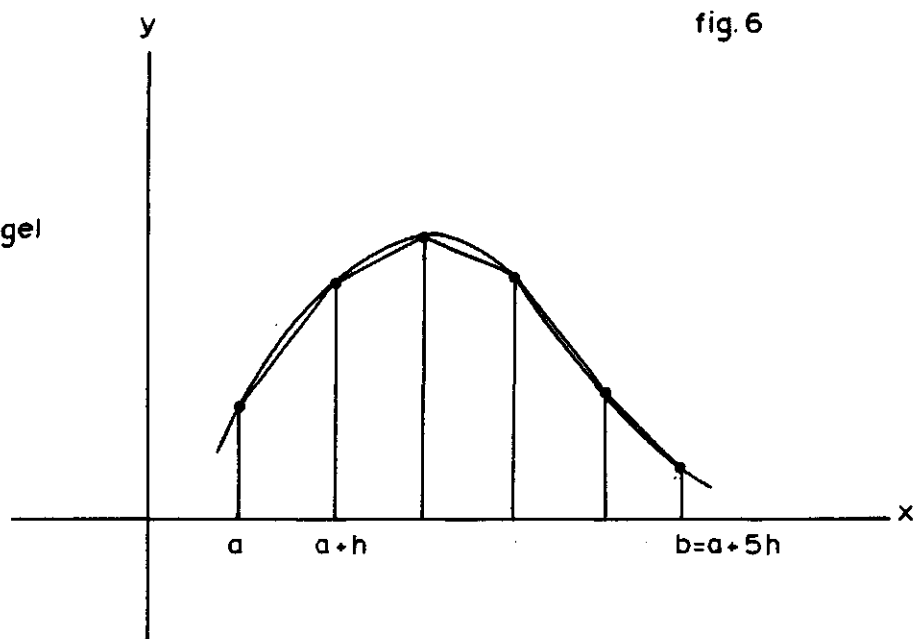


fig. 6