Newton- Cotesove formule

Marušić, Laura

Sveučilište J.J.Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Laura Marušić

Newton – Cotesove formule

Završni rad

Osijek, 2019.

Sveučilište J.J.Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Laura Marušić

Newton – Cotesove formule

Završni rad

Mentor: izv.prof.dr.sc. Tomislav Marošević

Osijek, 2019.

Sadržaj

Sažetak

U ovom završnom radu upoznat ćemo se s numeričkom integracijom. Glavni dio ovog rada bit će baziran na metodama numeričke integracije, točnije Newton – Cotesovoj formuli te ćemo detaljnije obraditi njene posebne slučajeve, trapezno pravilo i Simpsonovo pravilo, koje dolaze od Newton – Cotesove formule. Spomenut ćemo i jednu metodu otvorene Newton – Cotesove formule.

Ključne riječi: Newton – Cotesove formule, trapezno pravilo, Simpsonovo pravilo, Simpsonovo 3/8 pravilo, midpoint pravilo, Newton – Leibniz, aproksimacija, pogreška aproksimacije, numeričko integriranje, Lagrangeov interpolacijski polinom

Abstract

In this final paper we will get knowledge about numerical analysis. The main part of this paper will be based on numerical integration methods, more precisely Newton – Cotes formula, then we will further elaborate its special instances, trapezoidal rule and Simpson's rule, that come from the Newton – Cotes formula. We will mention one method of open Newton – Cotes formula.

Keywords: Newton – Cotes formulae, trapezodial rule, Simpson's rule, Simpson's 3/8 rule, midpoint rule, Newton – Leibniz, approximation, approximation error, numerical integration, Lagrange interpolating polynomial

1 Uvod

Numerička analiza, pa tako i numerička integracija, bavi se traženjem aproksimativnih rješenja kompleksnih problema korištenjem najjednostavnijih operacija aritmetike. Jedna od tih metoda nazvana po engleskim matematičarima, Isaac Newtonu[1] i Roger Cotesu[2], je Newton – Cotesova kvadraturna formula n-tog reda, koja se odnosi na problem određenih integrala. Zbog toga se ovaj problem naziva numerička kvadratura, jer se taj pojam odnosi i na računanje odgovarajuće površine, što podsjeća na antički problem kvadrature kruga, tj. konstrukcije kvadrata koja ima jednaku površinu kao i krug.

Uglavnom ćemo razmatrati problem određenih jednostrukih integrala, iako se numerička analiza također bavi i problemima višestrukih i neodređenih integrala. Vidjet ćemo i zbog čega koristimo numeričku analizu za rješavanje integrala. Upoznat ćemo se samo s jednom metodom otvorenog tipa Newton – Cotesove formule te se u većini ovog rada baviti zatvorenim tipom formule.

U ovom završnom radu ćemo proučiti izvode metoda za numeričku integraciju koje proizlaze iz Newton – Cotesove formule, trapezno pravilo i Simpsonovo[3] pravilo te u posljednjem dijelu ovoga rada ćemo izvesti i neke metode višeg reda. Također ćemo se baviti i pogreškama aproksimacije tih metoda.

Newton – Cotes formule mogu biti korisne ako su dane vrijednosti funkcije na jednako udaljenim točkama. Također, postoje još prikladnije metode koje se koriste ako nemamo jednako udaljene točke, poput Gaussove kvadrature i Clenshaw-Curtisove kvadrature, ali njima se nećemo posvetiti u ovom radu.

[1]Isaac Newton (1642.-1717.), engleski fizičar, matematičar i astronom. Jedan od najznačajnijih znanstvenika u povijesti.

[2]Roger Cotes (1682.–1716.) bio je vrlo cijenjen mladi kolega Isaaca Newtona. Povjerena mu je priprema drugog izdanja Newtonove Principia - e. Izradio je i objavio koeficijente Newtonove formule za numeričku integraciju za $n \leq 11$.

[3]Thomas Simpson (1710–1761), engleski matematičar, najpoznatiji po svom radu na interpolaciji i numeričkim metodama integracije. Privatno je predavao matematiku u londonskim kafićima i od 1737. počeo je pisati matematičke knjige.

2 Općenito o integracijskim formulama

Postoje situacije gdje nije moguće primijeniti osnovni teorem integralnog računa, tj. Newton – Leibnizovu formulu[4] pri rješavanju određenih integrala neprekidne funkcije preko vrijednosti primitivne funkcije na rubovima segmenta, te ih moramo riješiti numeričkom analizom. Ako imamo:

- za funkciju koju integriramo ne možemo nikako dobiti njenu primitivnu funkciju
- da je podintegralna funkcija poznata samo u nekoliko (konačno) točaka.

Zbog tih problema, mi ćemo aproksimativno izračunati vrijednost integrala tako što ćemo podintegralnu funkciju interpolirati nekom, njoj sličnoj, jednostavnijom funkcijom. Tako ćemo doći do Newton – Cotesove formule. Zapravo će opća integracijska formula imati oblik

$$I = I^* + E_n, \qquad I^* = \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i),$$

pri čemu je za $n \in \mathbb{N}_0$, $n+1$ broj korištenih čvorova, I^* pripadna aproksimacija integrala, E_n pritom napravljena greška, a ω_i težinske funkcije tako da se f može dobro aproksimirati polinomom. Ovakve formule često se zovu kvadraturne formule.

2.1 Newton – Cotesova formula

Neka je $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ neprekidna fukcija. Segment $[a,b]$ podijelit ćemo na n jednakih podintervala jednoliko raspoređenih čvorovima $x_i = a + i\frac{b-a}{n}$, tj. sa $n+1$ točaka, tako da je $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, $x_i - x_{i-1} = \frac{b-a}{n} = h$, $i = 1,\ldots,n$, a funkciju f ćemo interpolirati polinomom n-tog reda u Lagrangeovom obliku. U općenitom slučaju, definiramo:

- zatvorenu formulu, kada imamo $x_0 = a$, $x_n = b$ i $h = \frac{b-a}{n}$, za $n \geq 1$
- otvorenu formulu, kada imamo $x_0 = a+h$, $x_n = b-h$ i $h = \frac{b-a}{n+2}$, za $n \geq 0$,

pa prema Lagrangeovoj formuli za interpolaciju imamo

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) p_k(x), \text{ pri čemu je } p_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Približnu vrijednost I_n^* integrala I mogli bismo dobiti kao integral dobivenog polinoma u istim granicama kao i dana funkcija f.

$$I_n^* = \int_a^b P_n(x)\,dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k)p_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b p_k(x)\,dx =$$

$$= \frac{b-a}{b-a} \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b p_k(x)\,dx = (b-a) \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \underbrace{\frac{1}{b-a} \int_a^b p_k(x)\,dx}_{\omega_k} =$$

$$= (b-a) \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(x_k), \text{ pri čemu su } \omega_k = \frac{1}{b-a} \int_a^b p_k(x)\,dx$$

[4]**Newton – Leibnizova formula:** $I = \int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a)$.

Uz supstituciju $x = \Psi(t) = a + (b-a)t$ dobivamo jednostavniji prikaz težinskih funkcija

$$\omega_k = \frac{1}{b-a}\int_a^b p_k(x)\,dx = \left| \begin{array}{c} x = a + (b-a)\,t \\ dx = (b-a)\,dt \\ x \to a \Rightarrow t \to 0 \\ x \to b \Rightarrow t \to 1 \end{array} \right| = \frac{1}{b-a}\int_0^1 p_k(a+(b-a)t)(b-a)\,dt =$$

$$= \int_0^1 p_k(a+(b-a)t)\,dt = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{a+(b-a)t - a - \frac{b-a}{n}i}{a + \frac{b-a}{n}k - a - \frac{b-a}{n}i}\,dt =$$

$$= \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{\cancel{\frac{b-a}{n}}(nt-i)}{\cancel{\frac{b-a}{n}}(k-i)}\,dt = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{nt-i}{k-i}\,dt.$$

Stoga, za $n \geq 1$ dobivamo grupu formula, tj. poznatu **kvadraturnu** ili **Newton – Cotesovu formulu** n**-tog reda** za aproksimaciju integrala I:

$$\boxed{I_n^* = (b-a)\sum_{k=0}^{n} \omega_k f(x_k), \qquad \omega_k = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{nt-i}{k-i}\,dt} \tag{2.1}$$

2.1.1 Ponašanje težinskih funkcija

Koeficijenti ω_k, tj. težine ne ovise o a, b, h i f, nego samo o n te mogu biti prikazani tablično *a priori*[5]. Polinomi p_k i p_{n-k}, za $k = 0, \ldots, n-1$ imaju simetrično jednake integrale tako da su i odgovarajuće težine ω_k i ω_{n-k} jednake za $i = 0, \ldots, n-1$. Zbog toga, u tablici 1 prikazujemo samo prvu polovicu težina.

n	1	2	3	4	5	6
ω_0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{90}$	$\frac{19}{288}$	$\frac{41}{840}$
ω_1	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{9}{35}$
ω_2	-	$\frac{1}{6}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{6}{45}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{27}{840}$
ω_3	-	-	$\frac{1}{8}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{272}{840}$
ω_4	-	-	-	$\frac{7}{90}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{27}{840}$
ω_5	-	-	-	-	$\frac{19}{288}$	$\frac{9}{35}$
ω_6	-	-	-	-	-	$\frac{41}{840}$

Tablica 1: Težine zatvorenih Newton – Cotesovih formula (vidi [10])

Zatvorena Newton – Cotesova formula za $n = 1$ i $n = 2$ su ekvivalentne trapeznom pravilu odnosno Simpsonovom pravilu. Formula za $n = 3$ zove se Simpsonovo pravilo 3/8, za $n = 4$ Booleovo pravilo i za $n = 6$ Weddleovo pravilo.

[5] ono što je apsolutno neovisno o svakom iskustvu, onaj stav koji je unaprijed zauzet, načelno ili proizvoljno, tako da ne uzima u obzir razloge i okolnosti koji bi ga mogli izmijeniti

2.1.2 Pogreška

Naravno, cijela se numerička analiza bazira na aproksimacijama, te nas zanima kolika je zanemarena pogreška kod aproksimativnih vrijednosti. Tako nas i sada zanima kolika je pogreška kod primjene Newton – Cotesove formule za aproksimacije integrala, o čemu nam govori sljedeći teorem (vidi [5], poglavlje 9).

Teorem 2.1. *Za Newton – Cotesovu formulu koja odgovara danoj vrijednosti parnog broja n, vrijedi sljedeća karakterizacija pogreške E_n integrala I_n^* danog u izrazu (2.1). Ako je $f \in C^{n+2}([a,b])$, gdje je n paran broj, onda postoji $\xi \in (a,b)$, tako da vrijedi*

$$E_n(f) = \frac{M_n}{(n+2)!} h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi), \text{ gdje je } M_n = \int_0^n t\, \pi_{n+1}(t)\, dt < 0, \; \pi_{n+1}(t) = \prod_{i=0}^{n} (t-i) \quad (2.2)$$

Slično, za dane vrijednosti neparnog broja n, vrijedi sljedeća ocjena pogreške integrala I_n^*.

$$E_n(f) = \frac{K_n}{(n+1)!} h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi), \quad K_n = \int_0^n \pi_{n+1}(t)\, dt < 0, \quad \pi_{n+1}(t) = \prod_{i=0}^{n} (t-i). \quad (2.3)$$

3 Newton – Cotesove formule

Primijenimo sada Newton – Cotesovu formulu (2.1) za neke $n \in \mathbb{N}$.

3.1 Trapezno pravilo ($n = 1$)

Neka je $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ neprekidna fukcija, $a = x_0 < x_1 = b$ te $h = x_1 - x_0 = b - a$. Prvo ćemo izračunati težine iz općenite Newton – Cotesove formule n-tog reda (2.1), a nakon toga lako dobivamo trapezno pravilo.

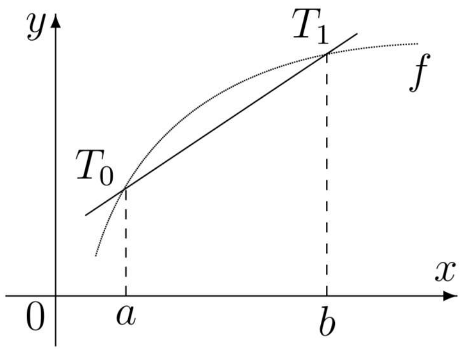
$$\omega_0 = \int_0^1 \frac{t-1}{0-1}\, dt = \frac{1}{2}$$

$$\omega_1 = \int_0^1 \frac{t}{1}\, dt = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \quad I_1^* = (b-a) \sum_{k=0}^{1} f(x_k)\, \omega_k = (b-a) \left(f(a)\frac{1}{2} + f(b)\frac{1}{2} \right) = \frac{b-a}{2}\,(f(a) + f(b))$$

$$\textbf{Trapezno pravilo:} \quad \boxed{I^* = \frac{b-a}{2}\,(f(a) + f(b))} \tag{3.1}$$

Općenito, trapezno pravilo dobije se interpolacijom funkcije f polinomom P_1 stupnja 1 koja prolazi dvjema točkama $T_0 = (a,\, f(a))$ i $T_1 = (b,\, f(b))$, tj. računat ćemo površinu ispod pravca kao što je prikazano na slici 1.



Slika 1: Trapezno pravilo

$$I^* = \int_a^b \varphi(x)\, dx = \int_a^b P_1(x)\, dx, \text{ pri čemu je } \varphi(x) = P_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\,(x - a)$$

Slijedi,

$$I^* = \int_a^b \left(f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} (x - a) \right) dx = f(a)\, x\Big|_a^b + \frac{(x-a)^2}{2} \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\Bigg|_a^b =$$

$$= f(a)(b-a) + \frac{f(b) - f(a)}{2(b-a)} \left((b-a)^2 - (a-a)^2\right) = (b-a)\left(f(a) + \frac{f(b)}{2} - \frac{f(a)}{2} \right) =$$

$$= (b-a)\left(\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right) = \frac{b-a}{2} \left(f(a) + f(b)\right)$$

Zapravo se dođe do klasične formule za površinu trapeza, kao što vidimo na slici 1, s osnovicama $f(a)$ i $f(b)$ te visinom $b - a$, odakle nam i naziv za trapezno pravilo.

3.1.1 Pogreška kod trapeznog pravila

Vrijedi sljedeći teorem.

Teorem 3.1. *Neka je $f \in C^2([a, b])$. Tada postoji $c \in \langle a, b\rangle$ tako da je*

$$I = \int_a^b f(x)\, dx = \underbrace{\frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))}_{I^*} - \frac{(b-a)^3}{12} f''(c) \tag{3.2}$$

Dokaz. Prema teoremu o ocjeni pogreške[6], postoji $\xi(x) \in \langle a, b\rangle$ tako da je

$$E := I - I^* = \int_a^b (f(x) - P_1(x))\, dx = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} (x-a)(x-b)\, dx.$$

Kako je $(x - a)(x - b) \leq 0$ za sve $x \in [a, b]$, koristeći poopćeni teorem o srednjoj vrijednosti integralnog računa[7], zaključujemo da postoji $c \in \langle a, b\rangle$ takav da je

$$E = \frac{f''(c)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)\, dx = \left| \begin{array}{c} x = a + (b-a)\, t \\ dx = (b-a)\, dt \\ x \to a \Rightarrow t \to 0 \\ x \to b \Rightarrow t \to 1 \end{array} \right| =$$

$$= \frac{f''(c)}{2} \int_0^1 (b-a)\, t(a + (b-a)\, t - b)(b-a)\, dt = \frac{(b-a)^3}{2} f''(c) \int_0^1 (t^2 - t)\, dt =$$

$$= \frac{(b-a)^3}{2} f''(c) \left(\frac{t^3}{3} - \frac{t^2}{2} \right)\Bigg|_0^1 = \frac{(b-a)^3}{2} f''(c) \left(\frac{-1}{6} \right) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(c)$$

$\square$

[6] Za svaki $\bar{x} \in [a, b]$ postoji $\xi \in \langle a, b\rangle$, tako da je $f(\bar{x}) - P_n(\bar{x}) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(\bar{x} - x_0) \cdots (\bar{x} - x_n)$.

[7] Ako je f neprekidna na segmentu $[a, b]$, a g integrabilna funckija stalnog predznaka na tom segmentu, onda postoji $c \in [a, b]$ takav da vrijedi

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

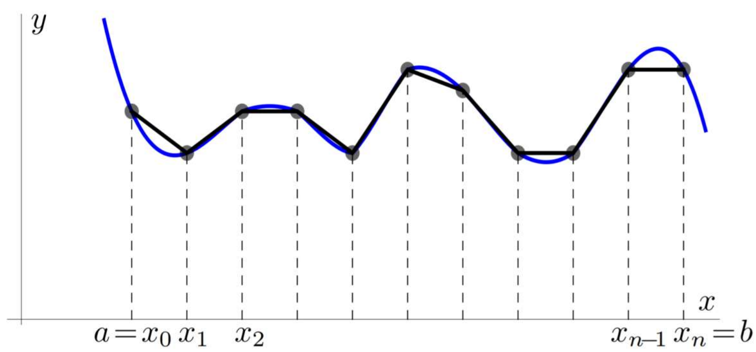
U dokazu prethodnog teorema 3.1 dobije se pogreška kod primjene trapeznog pravila koja iznosi $E = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(c)$. Ako je segment integracije $[a, b]$ velik, i pogreška E će biti velika.

3.1.2 Produljeno trapezno pravilo

U cilju postizanja bolje aproksimacije I^* integrala I, interval $[a, b]$ podijelit ćemo na n pointervala i onda na svakom od njih primijeniti trapezno pravilo (3.1). Pretpostavimo da imamo $n + 1$ ekvidistantno raspoređenih točaka $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ tako da je $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \cdots = x_n - x_{n-1} =: h$ te $x_0 = a$ i $x_n = b$. Označimo

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, \ldots, n$$
$$y_i = f(x_i), \quad i = 0, \ldots, n$$
$$n{\cdot}h = b - a \quad \Rightarrow \quad h = \frac{b-a}{n}$$

Promotrimo sliku 2.



Slika 2: Generalizirano trapezno pravilo

Iz nje je očigledno da točke $x_0, \ldots, x_n$ dijele segment $[a,\, b]$ na n jednakih podsegmenata duljine h. Sada ćemo imati intervale $[x_{i-1},\, x_i]$, $i = 1, \ldots, n$ na koje ćemo primijeniti trapezno pravilo (3.1), tj. računat ćemo integral polinoma 1. stupnja kroz dvije točke, $(x_{i-1},\, y_{i-1})$ i $(x_i,\, y_i)$, $i = 1, \ldots, n$.

Imamo:

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \left(y_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} (x - x_{i-1}) \right) dx = \frac{h}{2}(y_{i-1} + y_i), \quad i = 1, \ldots, n$$

Primjedba 3.1. Vidimo da u ovom slučaju računamo površine malih trapezića s osnovicama y_{i-1} i y_i, i=1,...,n te visinom h.

Sumiranjem svih površina malih trapezića dobijemo generalizirano (produljeno) trapezno pravilo.

$$I^* = \sum_{i=1}^{n} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\, dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \cdots + \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{I^* = \frac{h}{2}(y_0 + 2(y_1 + y_2 + \cdots + y_{n-1}) + y_n)} \tag{3.3}$$

Pitamo se kolika je pogreška kod produljenog trapeznog pravila. Primjenom teorema 3.1 dobijemo:

$$\begin{aligned} E = I - I^* &= \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = -\sum_{i=1}^n \frac{h^3}{12} f''(c_i) = \\ &= \frac{-h^3}{12} \sum_{i=1}^n f''(c_i) = \frac{-h^2}{12} \underbrace{\frac{b-a}{n}}_{h} \sum_{i=1}^n f''(c_i) \end{aligned}$$

Zbog neprekidnosti funkcije f'' na intervalu $\langle a, b\rangle$ $\exists\, c \in \langle a, b\rangle$ takav da je

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n f''(c_i) = f''(c).$$

Pa imamo

$$E = \frac{-h^2}{12}(b-a) f''(c)$$

Ocijenimo sada apsolutnu pogrešku integrala I^*.

$$\Delta I^* = |E| = |I - I^*| = \frac{h^2}{12}(b-a)|f''(c)| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)M_2, \quad M_2 = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

Iz ove ocjene ćemo moći odrediti broj podintervala n na koji je potrebno podijeliti $[a, b]$ kako bismo mogli primijeniti generalizirano trapezno pravilo i postići točnost $\varepsilon > 0$, tj. da je $|E| = |I - I^*| < \varepsilon$. Iz te nejednadžbe dobijemo da je

$$\boxed{n > (b-a)\sqrt{\frac{(b-a)M_2}{12\,\varepsilon}}}$$

Primjer 3.1. *Trapeznim pravilom izračunajte integral* $\int_1^3 x^2 \ln x\, dx, \quad \varepsilon = 0.1.$

Integral ćemo računati na 2 načina:

- jednostavnim trapeznim pravilom (3.1):

  Prvo ćemo izračunati $f(a)$ i $f(b)$

  $$f(a) = f(1) = 1^2 \ln 1 = 0, \quad f(b) = f(3) = 3^2 \ln 3 = 9.88751$$

  i uvrstimo to u trapeznu formulu

  $$I^* = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) = \frac{3-1}{2} \cdot 9.88751 = 9.88751.$$

- generaliziranim trapeznim pravilom (3.3):

  Prvo moramo odrediti potreban broj koraka kako bi se odredila aproksimacija od I uz točnost $\varepsilon = 0.1$. Stoga, izračunajmo dugu derivaciju funckije f i M_2 koje ćemo ubaciti u generaliziranu trapeznu formulu.

$$f''(x) = 2\ln x + 3, \quad M_2 = \max_{x\in[a,\,b]} |f''(x)| = \max_{x\in[1,\,3]} |2\ln x + 3| = 5.19722$$

$$n > (b-a)\sqrt{\frac{M_2}{\varepsilon}\cdot\frac{b-a}{12}} = (3-1)\sqrt{\frac{5.19722}{0.1}\cdot\frac{3-1}{12}} = 5.88$$

  Slijedi da je $n = 6$. Sada računamo:

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{3-1}{6} = \frac{1}{3}$$

$$x_i = a + ih = 1 + i\cdot\frac{1}{3}, \quad i = 0, 1, \ldots, 6$$

x_i	y_i
1	0
$\frac{4}{3}$	0.51143
$\frac{5}{3}$	1.41896
$\frac{6}{3}$	2.77258
$\frac{7}{3}$	4.613066
$\frac{8}{3}$	6.97478
$\frac{9}{3}$	9.88751

  Sada imamo sve podatke i trebamo ih uvrstiti u formulu:

$$I^* = \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + \cdots + 2y_{n-1} + y_n) = \frac{1}{6}(y_0 + 2(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5) + y_6) = 7.07872$$

Egzaktno rješenje ovog integrala je 6.9986 pa vidimo da je aproksimacija generalizirane trapezne formule puno bolja od one koju dobijemo rješavajući integral općenitom trapeznom formulom.

3.2 Simpsonovo pravilo ($n = 2$)

Neka je $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ neprekidna fukcija, $a = x_0 < x_1 < x_2 = b$ te $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \frac{b-a}{2}$. Primijetimo da je u ovom slučaju: $x_1 = \frac{a+b}{2}$, tako da nam sve točke budu međusobno jednako udaljene. Najprije ćemo izračunati težine iz općenite Newton – Cotesove formule n-tog reda (2.1) te se lako dođe do tzv. Simpsonovog pravila.

$$\omega_0 = \int_0^1 \frac{2t-1}{-1} \cdot \frac{2t-2}{-2}\, dt = \int_0^1 (2t^3 - 3t + 1)\, dt = \frac{2}{3} - \frac{3}{2} + 1 = \frac{1}{6}$$

$$\omega_1 = \int_0^1 \frac{2t}{1} \cdot \frac{2t-2}{-1}\, dt = \int_0^1 (-4t^2 + 4t)\, dt = 2 - \frac{4}{3} = \frac{2}{3}$$

$$\omega_2 = \int_0^1 t \cdot \frac{2t-1}{1}\, dt = \int_0^1 (2t^2 - t)\, dt = \frac{2}{3} - \frac{1}{2} = \frac{1}{6}$$

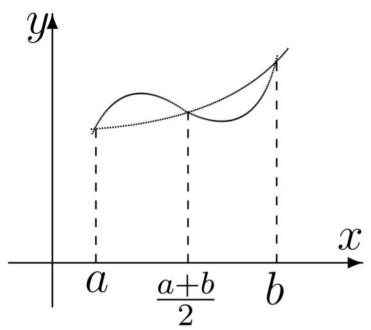
$$I_2^* = (b-a)(\omega_0 f(x_0) + \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2)) = (b-a)\left(\omega_0 f(a) + \omega_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \omega_2 f(b)\right)$$

$$\Rightarrow \quad \textbf{Simpsonovo pravilo:} \quad \boxed{I^* = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)} \tag{3.4}$$

Pogrešku aproksimacije kod primjene Simpsonova pravila ćemo samo napomenuti, ali ju je lako odrediti jednostavnim računom integrala.

$$E = I - I^* = \int_a^b (f(x) - P_2(x))\, dx = \cdots = -\frac{1}{90}\underbrace{\left(\frac{b-a}{2}\right)^5}_{h^5} f^{(4)}(c), \quad \text{za neki } c \in \langle a,\, b\rangle.$$

Kao i kod trapeznog pravila, Simpsonovo pravilo se može općenito izvesti iz interpolacije polinomom 2. stupnja koji prolazi točkama: $T_0 = (a,\, f(a))$, $T_1 = \left(\frac{a+b}{2},\, f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)$ i $T_2 = (b,\, f(b))$. Pogledajmo sljedeću sliku.



Slika 3: Općenito Simpsonovo pravilo

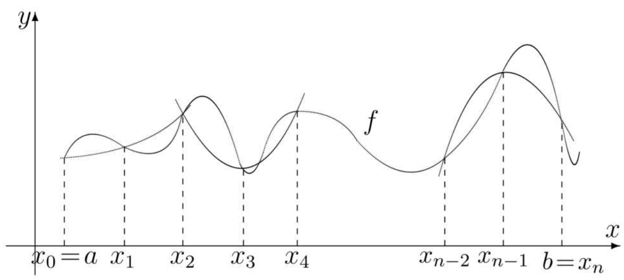
3.2.1 Produljeno Simpsonovo pravilo

Podijelimo segment $[a, b]$ na $n = 2m$ ekvidistantnih podintervala duljine $h = \frac{b-a}{n} = \frac{x_{i+2}-x_i}{2}$, $i = 0, \dots, n-2$, čvorovima $x_i = a + hi$, $i = 0, \dots, 2m$. Promotrimo sliku 4 i zaključimo da segment $[a, b]$ rastavljamo na podsegmente $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{2m-2}, x_{2m}]$ te uz oznaku $y_i = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$ primijenimo Simpsonovo pravilo (3.4) na te podsegmente pa se sada lako dođe do generaliziranog Simpsonovog pravila.

$$
\begin{aligned}
I^* = \underbrace{\frac{x_2 - x_0}{6}}_{\frac{h}{3}}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \underbrace{\frac{x_4 - x_2}{6}}_{\frac{h}{3}}(f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) + \dots + \\
+ \underbrace{\frac{x_{2m} - x_{2m-2}}{6}}_{\frac{h}{3}}(f(x_{2m-2}) + 4f(x_{2m-1}) + f(x_{2m})) =
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{h}{3}\left[(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \dots + (f(x_{2m-2}) + 4f(x_{2m-1}) + f(x_{2m}))\right] = \\
&= \frac{h}{3}\left[y_0 + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2m-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2m-1}) + y_{2m}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \quad \boxed{I^* = \frac{h}{3}\left[y_0 + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2m-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2m-1}) + y_{2m}\right]} \tag{3.5}
$$



Slika 4: Generalizirano Simpsonovo pravilo

Ocjena pogreške apsolutne pogreške integrala I^*:

$$
\Delta I^* = |I - I^*| \leq \underbrace{\frac{b-a}{180} h^4 M_4 < \varepsilon}_{(*)}
$$

Iz nejednadžbe $(*)$ možemo dobiti broj podsegmenata n, za danu točnost $\varepsilon > 0$, kako bismo mogli primijeniti generalizirano Simpsonovo pravilo.

$$
\Rightarrow \quad \boxed{n > (b-a)\sqrt[4]{\frac{(b-a)M_4}{180\,\varepsilon}}}
$$

Primjer 3.2. *Simpsonovom formulom izračunajte integral iz Primjera 3.1, uz točnost* $\varepsilon = 0.1$.

- jednostavnim Simpsonovim pravilom (3.4):

  Prvo računamo $f(a), f(b)$ i $f(\frac{a+b}{2})$

  $$f(a) = f(1) = 0, \quad f(b) = f(3) = 9.88751, \quad f\left(\frac{a+b}{2}\right) = f(2) = 2^2 \cdot \ln 2 = 2.772589$$

  Uvrstimo te podatke u (3.4)

  $$I^* = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) = \frac{3-1}{6}(4 \cdot 2.772589 + 9.88751) = 6.992622$$

- generaliziranim Simpsonovim pravilom (3.5):

  Najprije ćemo izračunati četvrtu derivaciju funkcije f

  $f^{(4)}(x) = -\frac{2}{x^2}$ i $M_4 = \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right| = \max_{x\in[1,3]} \left|-\frac{2}{x^2}\right| = 2.$

  Sada možemo računati potreban broj koraka da bi se mogla primijeniti generalizirana Simpsonova formula uz postignutu točnost $\varepsilon = 0.1$

  $$n > (b-a)\sqrt[4]{\frac{M_4}{\varepsilon} \cdot \frac{b-a}{180}} = (3-1)\sqrt[4]{\frac{2}{0.1} \cdot \frac{3-1}{180}} = 1.37317 \quad \Rightarrow \quad n = 2.$$

  U ovom slučaju je $n = 2$, pa se dobiva jednaki rezultat kao kod jednostavnog Simpsonovog pravila. Izračunajmo sada $h = \frac{b-a}{n} = \frac{3-1}{2} = 1 \quad x_i = a + ih = 1 + i \cdot 1, \; i = 0, 1, 2.$

x_i	y_i
1	0
2	2.77258
3	9.88751

  Na kraju sve uvrstimo u (3.5)

  $$I^* = \frac{h}{3}[(y_0 + y_{2m}) + 4(y_1 + \cdots + y_{2m-1}) + 2(y_2 + \cdots + y_{2m-2})] = \frac{1}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) = 6.99261.$$

  Općenito, osim što nam generalizirana Simpsonova formula daje bolju aproksimaciju integrala, ona ima i manji broj koraka od generalizirane trapezne formule.

3.3 Simpsonovo 3/8 pravilo ($n = 3$)

Još jedna metoda numeričke integracije koju je izveo Thomas Simpson je zapravo Newton – Cotesova formula četvrtoga reda, tj. interpolacija polinomom četvrtog stupnja kroz dane četiri točke.

Neka je $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ neprekidna fukcija, $a = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 = b$ te $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \frac{b-a}{3}$. Primijetimo da je u ovom slučaju: $x_i = a + \frac{b-a}{3} i$, jer su nam tako sve točke međusobno jednako udaljene. Najprije ćemo izračunati težine iz općenite Newton – Cotesove formule n-tog reda (2.1) te se lako dođe do tzv. Simpsovovog 3/8 pravila.

$$\omega_k = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{3} \frac{3t-i}{k-i}\, dt, \quad k = 0, 1, 2, 3$$

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq 0}}^{3} \frac{3t-i}{0-i}\, dt = \int_0^1 \frac{3t-1}{-1} \cdot \frac{3t-2}{-2} \cdot \frac{3t-3}{-3}\, dt = \int_0^1 \left(-\frac{9}{2}t^3 + 9t^2 - \frac{11}{2}t + 1 \right) dt = \\
&= \frac{1}{2} \left(-\frac{9t^4}{4} + 6t^3 - \frac{11t^2}{2} + 2t \right) \Bigg|_0^1 = \cdots = \frac{1}{8} \\
\omega_1 &= \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq 1}}^{3} \frac{3t-i}{1-i}\, dt = \int_0^1 \frac{3t}{1} \cdot \frac{3t-2}{1-2} \cdot \frac{3t-3}{1-3}\, dt = \int_0^1 \left(\frac{27t^3}{2} - \frac{45t^2}{2} + 9t \right) dt = \\
&= \frac{9}{2} \left(\frac{3t^4}{4} - \frac{5t^3}{3} + t^2 \right) \Bigg|_0^1 = \cdots = \frac{3}{8} \\
\omega_2 &= \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq 2}}^{3} \frac{3t-i}{2-i}\, dt = \int_0^1 \frac{3t}{2} \cdot \frac{3t-1}{2-1} \cdot \frac{3t-3}{2-3}\, dt = \int_0^1 \left(-\frac{27t^3}{2} + 18t^2 - \frac{9t}{2} \right) dt = \\
&= -\frac{9}{2}(9t^2 - 8t + 1)\Big|_0^1 = \cdots = \frac{3}{8} \\
\omega_3 &= \int_0^1 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq 3}}^{3} \frac{3t-i}{3-i}\, dt = \int_0^1 \frac{3t}{3} \cdot \frac{3t-1}{3-1} \cdot \frac{3t-2}{3-2}\, dt = \int_0^1 \left(\frac{9t^3}{2} - \frac{9t^2}{2} + t \right) dt = \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{9t^4}{4} - 3t^3 + t^2 \right) \Bigg|_0^1 = \cdots = \frac{1}{8}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad I_3^* = (b-a) \sum_{k=0}^{3} \omega_k f(x_k) = (b-a)(\omega_0 f(x_0) + \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \omega_3 f(x_3))$$

Jer je $\frac{b-a}{3} = h \Rightarrow b - a = 3 \cdot h$, i označimo $f(x_i) = f_i,\ i = 0, 1, 2, 3$. Slijedi **Simpsonovo 3/8 pravilo**:

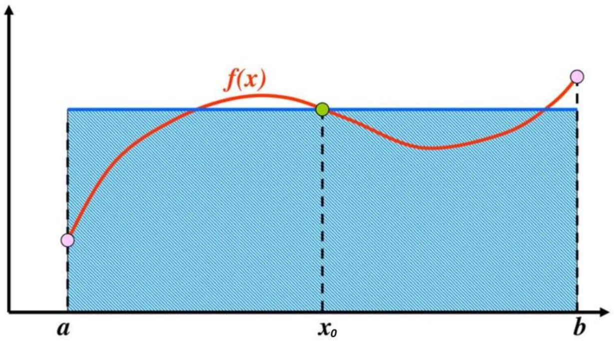
$$I_3^* = 3h(\frac{1}{8}f(x_0) + \frac{3}{8}f(x_1) + \frac{3}{8}f(x_2) + \frac{1}{8}f(x_3)) = \frac{3}{8}h\,(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

3.4 Midpoint pravilo

Do sada smo se upoznali s tri vrste Newton – Cotesovih kvadraturnih formula zatvorenog tipa. Ako prilikom interpolacije ne koristimo jednu ili nijednu rubnu točku, dobijemo otvorene Newton – Cotesove formule.

Stavimo $x_0 := a$, $x_1 := b$, $h = \frac{b-a}{2}$. Formula se dobiva zamjenom funkcije f nad segmentom $[a, b]$ s konstantnom funkcijom koja postiže jednaku vrijednost u središnjoj točki segmenta $[a, b]$ kao i u funkciji f.

$$\Rightarrow \quad \textbf{Midpoint pravilo:} \quad I_0^* = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{3.6}$$



Slika 5: Midpoint pravilo

Iz slike 5 vidimo da se radi o površini pravokutnika sa stranicama $b-a$ i $f(x_0)$, pri čemu je $x_0 = \frac{a+b}{2}$ aritmetička sredina krajnjih točaka a i b segmenta $[a, b]$. Odatle dolazi još jedan naziv za ovo pravilo, a to je pravokutno pravilo.

Greška ove integracijske formule jednaka je integralu greške interpolacijskog polinoma stupnja nula, tj. konstante, koji interpolira f u srednjoj točki segmenta $[a, b]$ i iznosi:

$$E = f''(\xi)\frac{(b-a)^3}{24}, \quad \xi \in [a, b].$$

Koristimo li produljenu midpoint formulu na n ekvidistantnih podsegmenata duljine h, dobijemo generalizirano midpoint pravilo. Ono se dobije primjenom midpoint pravila na svakom podsegmentu $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, n-1$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = hf(x_{i+\frac{1}{2}}) \quad \Rightarrow \quad I_0^* = \int_a^b f(x)\,dx = h\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

Pogreška generaliziranog midpoint pravila je dana s

$$E = \frac{(b-a)h^2}{24} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

3.5 Zatvorene i otvorene Newton – Cotesove formule

Prikazat ćemo tablicama listu otvorenih i zatvorenih Newton – Cotesovih formula n-tog reda za $i = 0, \ldots, n$. Neka je $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ neprekidna fukcija.

- **Zatvoreni tip:** Neka je $x_i = a + i\frac{b-a}{n} = a + ih$ i označimo $f(x_i) = f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Uzima se za odgovarajuće $\xi \in [a, b]$.

n	h	**Ime metode**	**Formula**	**Pogreška aproksimacije**
1	$b-a$	Trapezno pravilo	$\frac{h}{2}(f_0 + f_1)$	$-\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi)$
2	$\frac{b-a}{2}$	Simpsonovo pravilo	$\frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	$-\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$
3	$\frac{b-a}{3}$	Simpsonovo 3/8 pravilo	$\frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$	$-\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{b-a}{4}$	Booleovo pravilo	$\frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$	$-\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi)$

Tablica 2: Zatvorene Newton – Cotesove formule (vidi [9])

- **Otvoreni tip:** Neka je $x_i = a + i\frac{b-a}{n} = a + ih$ i označimo $f(x_i) = f_i$, $i = 0, \ldots, n$, te za ξ se uzima odgovarajuće elemente iz $[a, b]$.

n	h	**Ime metode**	**Formula**	**Pogreška aproksimacije**
0	$\frac{b-a}{2}$	midpoint pravilo	$2hf(\frac{a+b}{2})$	$\frac{h^3}{3} f^{(2)}(\xi)$
1	$\frac{b-a}{3}$		$\frac{3h}{2}(f_0 + f_1)$	$\frac{3h^3}{4} f^{(2)}(\xi)$
2	$\frac{b-a}{4}$	Milneovo pravilo	$\frac{4h}{3}(2f_0 - f_1 + 2f_2)$	$\frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi)$
3	$\frac{b-a}{5}$		$\frac{5h}{24}(11f_0 + f_1 + f_2 + 11f_3)$	$\frac{95h^5}{144} f^{(4)}(\xi)$

Tablica 3: Otvorene Newton – Cotesove formule (vidi [9])

3.6 Formule za polinome višeg stupnja

Newton – Cotesova formula može se konstruirati uporabom bilo kojeg stupnja n aproksimacije.

Neka je f neprekidna funkcija, P_n polinom n-tog stupnja i neka su dane točke $x_0, \ldots, x_n$ tako da je $f(x_i) = y_i$ za $i = 0, \ldots, n$. Rezultati aproksimacija integrala polinoma višeg stupnja mogu se dobiti u obliku

$$\int_{x_0}^{x_n} P_n(x)\,dx = Ch(c_0y_0 + c_1y_1 + \cdots + c_ny_n)$$

pri čemu su C i c_i, $i = 0, \ldots, n$ konstante za nekoliko prvih n vrijednosti dane sljedećom tablicom

n	C	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
1	$\frac{1}{2}$	1	1	0	0	0	0	0	0	0
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1	0	0	0	0	0	0
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1	0	0	0	0	0
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7	0	0	0	0
6	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272	27	216	41	0	0
8	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989

Tablica 4: Konstante Newton – Cotesovih formula (vidi [6], poglavlje 14)

Međutim, za veliki n Newton-Cotesova formula može ponekad patiti od katastrofalnog "Rungeovog fenomena"[8] pa se formule višeg stupnja rijetko koriste. Djelomično zbog toga što su dostupne jednostavnije i podjednako točne formule, a i zbog pomalo iznenađujuće činjenice, da polinomi višeg stupnja ne moraju uvijek imati bolju točnost, tj. imati manju pogrešku. Metode poput Gaussove kvadrature i Clenshaw – Curtisove kvadrature s nejednako raspoređenim točkama su stabilne i preciznije. Ako se ove metode ne mogu upotrijebiti, jer je integral dan samo na ekvidistantnim udaljenostima, tada se Rungeov fenomen može izbjeći korištenjem generaliziranih Newton – Cotesovih pravila.

[8]Problem oscilacija na rubovima intervala koji se javlja kada se koristi interpolacija polinomom višeg stupnja te dolazi do eksponencijalnog rasta pogreške.

Literatura

[1] G. Dahlquist, A. Bjorck, *Numerical Methods in Scientific Computing, Volume I*, Siam, USA, 2008. (Dostupno na: `http://fmipa.umri.ac.id/wp-content/uploads/2016/03/Dahlquist_G._Bjoerck_A._Vol.1._Numerical_methodBookZZ.org_.pdf`)

[2] P. Holoborodko, *Stable Newton - Cotes Formulas*, (Dostupno na: `http://www.holoborodko.com/pavel/numerical-methods/numerical-integration/stable-newton-cotes-formulas`

[3] T. M. Huang, *Numerical Differentiation and Integration*, Department of Mathematics, National Taiwan Normal University, Taiwan, 2008. (Dostupno na: `http://math.ntnu.edu.tw/~min/Numerical_Analysis/2008/Differentiatio_Integration.pdf`)

[4] M. Klaričić Bakula, *Uvod u numeričku matematiku*, Prirodoslovno – matematički fakultet Sveučilišta u Splitu, 2009. (Dostupno na: `http://mapmf.pmfst.unist.hr/~milica/Numericka_matematika/Folije_za_predavanja/UNM_Numinteg.pdf`)

[5] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Numerical Mathematics (Texts in Applied Mathematics 37), 2nd Edition*, Springer-Verlag, New York, 2000.

[6] F. Scheid, *Schaum's outline of theory and problems of numerical analysis, 2nd edition - Chapter 14*, McGraw-Hill, New York, 1989.

[7] R. Scitovski, *Numerička matematika, Izmijenjeno i dopunjeno izdanje*, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku – Odjel za matematiku, Osijek, 2015.

[8] N. Ujević, *Uvod u numeričku matematiku*, Fakultet prirodoslovno – matematičkih znanosti i odgojnih područja, Sveučilište u Splitu, 2004. (Dostupno na: `http://mapmf.pmfst.unist.hr/matematika/Nastavni%20materijali/nummat.pdf`)

[9] *Wikipedia – Newton – Cotes formulas*, (Dostupno na: `https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%E2%80%93Cotes_formulas`)

[10] *Wolfram Mathworld – Newton – Cotes formulas*, (Dostupno na: `http://mathworld.wolfram.com/Newton-CotesFormulas.html`)

[11] *Wolfram Mathworld – Simpson's 3/8 rule*, (Dostupno na: `http://mathworld.wolfram.com/Simpsons38Rule.html`)