# FRA BERNOULLIS FORUNDERLIGE POLYNOMIER OG TAL VIA EULER–MACLAURINS SUMFORMEL TIL ROMBERGS INTEGRALAPPROXIMATION

Mogens Esrom Larsen
1. marts 2005

**Bernoullis polynomier og tal.** Bernoullipolynomierne og Bernoullitallene blev indført af Jakob Bernoulli (1654–1705) i hans berømte værk, *Ars Conjectandi* (1713), hvori man finder mange interessante ting især om sandsynlighedsregning. Det af problemerne, som fører til Bernoullipolynomierne og dermed –tallene, drejer sig om bestemmelse af potenssummer.

Det er jo let nok at finde

$$\sum_{k=1}^{n} k^0 = 1 + 1 + \cdots + 1 = n$$

og den simple formel,

$$\sum_{k=1}^{n} k^1 = 1 + 2 + 3 + \cdots + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

er også let at finde, man summerer blot tillige bagfra:

$$2\sum_{k=1}^{n} k = \sum_{k=0}^{n} k + \sum_{k=0}^{n} (n-k) = \sum_{k=0}^{n} n = n(n+1)$$

Men Bernoulli stillede sig opgaven, at bestemme summerne af $m$–te potenserne, altså

$$\sum_{k=1}^{n} k^m = F(n,m), \qquad F = ? \tag{1}$$

Vi ved allerede, at $F(n,0) = n$ og $F(n,1) = \frac{n(n+1)}{2}$, men hvad er $F(n,2)$? (Man kan jo gætte på et 3–diegradspolynomium i $n$ og finde koefficienterne ved at prøve med $n = 1, 2, 3, 4$, og så bevise formlen ved induktion efter $n$, men det vil vi afstå fra.)

Bernoulli greb opgaven an på den måde, at han søgte en løsning til opgaven, at finde en funktion, $B(n,m)$, sådan at

$$B(n+1,m) - B(n,m) = mn^{m-1} \tag{2}$$

Typeset by $\mathcal{AMS}$-TEX

Summerer vi denne ligning for en række værdier af den variable $n$, forsvinder det meste af venstre siderne (en såkaldt "teleskopsum"):

$$m\sum_{k=0}^{n} k^{m-1} = \sum_{k=0}^{n}(B(k+1,m) - B(k,m)) = B(n+1,m) - B(0,m)$$

Med andre ord, har vi en løsning til (2), finder vi umiddelbart løsningen til (1) som

$$F(n,m) = \frac{B(n+1,m+1) - B(0,m+1)}{m+1} \tag{3}$$

Dette er Bernoullis løsning, vi mangler blot at finde en løsning til (2).

Vi søger løsninger, der er defineret for alle værdier af den første variable $n$, men kun positive, hele værdier af den anden variabel, $m$. Derfor skriver vi $x$ i stedet for $n$:

$$B(x+1,m) - B(x,m) = mx^{m-1} \tag{4}$$

Har vi to løsninger til (2), $B_1$ og $B_2$, så vil funktionen $B_1 - B_2$ opfylde, at

$$(B_1(x+1,m) - B_2(x+1,m)) - (B_1(x,m) - B_2(x,m)) = mx^{m-1} - mx^{m-1} = 0$$

Den er med andre ord periodisk med periode 1. Hvis vi derfor har fundet to løsninger, der er polynomier i $x$, så er deres differens også et polynomium, der tilmed er periodisk. Det må derfor være konstant. Løsningen er altså entydig bestemt på nær en konstant.

Vi analyserer nu opgaven, dvs. at vi antager, at vi har løst opgaven og fundet et polynomium, $B(x,m)$. Vi differentierer så (4) med hensyn til $x$, og får derved

$$B'(x+1,m) - B'(x,m) = m(m-1)x^{m-2} \tag{5}$$

Det betyder, at polynomiet

$$\frac{B'(x,m)}{m}$$

løser (4) for $m-1$. En anden løsning til (4) afviger herfra med en konstant. Vi definerer nu *Bernoullipolynomierne* som de polynomier, der løser (4), og hvis konstantled er valgt sådan, at

$$B'(x,m) = mB(x,m-1) \tag{6}$$

Dette betyder, at vi kan finde polynomierne ved sukcessiv integration. Da vi for $m = 2$ har et andengradspolynomium, må vi forvente, at polynomiernes grad er $m$.

Antag nu, at vi har polynomiet $B(x, m)$ af grad $m$, som vi vil skrive på formen:

(7) $$B(x,m) = \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} B^m_{m-k} x^k$$

hvor

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

er binomialkoefficienten $m$ over $k$, og $B^m_{m-k}$ er tal, vi skal finde. Vi har indiceret dem, så $B^m_0$ er højestegradskoefficienten. Vi indsætter nu (7) i (6) og får:

$$\sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} B^m_{m-k} k x^{k-1} = m \sum_{k=0}^{m-1} \binom{m-1}{k} B^{m-1}_{m-1-k} x^k$$

Nu er jo $\binom{m}{k} k = m\binom{m-1}{k-1}$, som vi kan bruge på venstre side samtidig med at vi udelader leddet for $k = 0$, da det er 0, mens vi ændrer summationsindexet fra $k$ til $k - 1$ på højre side:

$$\sum_{k=1}^{m} m \binom{m-1}{k-1} B^m_{m-k} x^{k-1} = m \sum_{k=1}^{m} \binom{m-1}{k-1} B^{m-1}_{m-k} x^{k-1}$$

Når vi sammenligner koefficienterne i polynomierne på højre og venstre side af lighedstegnet, ser vi, at der gælder formlen:

(8) $$B^{m-1}_{m-k} = B^m_{m-k} \text{ for } k = 1, 2, \cdots, m$$

Denne fælles værdi vil vi fra nu af betegne med $B_{m-k}$ og kalde *Bernoullitallet* med index $m - k$. Med andre ord, vi definerer

(9) $$B_n = B^{n+k}_n \text{ for } k = 1, 2, 3, \cdots$$

Bernoulli polynomierne i (7) kan nu skrives med Bernoulli tallene som

(10) $$B(x,m) = \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} B_{m-k} x^k$$

For at finde Bernoulli tallene og dermed Bernoulli polynomierne, indsætter vi (10) i (4) og bruger binomialformlen på $(x + 1)^k$:

$$\begin{aligned} B(x+1,m) - B(x,m) &= \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} B_{m-k}((x+1)^k - x^k) \\ &= \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} B_{m-k} \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k}{j} x^j \\ &= \sum_{j=0}^{m-1} x^j \sum_{k=j+1}^{m} \binom{m}{k} \binom{k}{j} B_{m-k} \end{aligned}$$

Vi benytter nu omskrivningen

$$\begin{aligned}\binom{m}{k}\binom{k}{j} &= \frac{m!k!}{k!(m-k)!j!(k-j)!} = \\ &= \frac{m!(m-j)!}{j!(m-j)!(k-j)!(m-k)!} = \binom{m}{j}\binom{m-j}{k-j}\end{aligned}$$

og får derved

$$\begin{aligned}B(x+1,m)-B(x,m) &= \sum_{j=0}^{m-1} x^j \sum_{k=j+1}^{m} \binom{m}{j}\binom{m-j}{k-j} B_{m-k} \\ &= \sum_{j=0}^{m-1} \binom{m}{j} x^j \sum_{k=j+1}^{m} \binom{m-j}{k-j} B_{m-k} \\ &= \sum_{j=0}^{m-1} \binom{m}{j} x^j \sum_{k=1}^{m-j} \binom{m-j}{k} B_{m-j-k}\end{aligned}$$

Vi summerer nu den ydre sum bagfra ved substitutionen $i = m - j$ og får

$$\begin{aligned}B(x+1,m)-B(x,m) &= \sum_{i=1}^{m} \binom{m}{i} x^{m-i} \sum_{k=1}^{i} \binom{i}{k} B_{i-k} \\ &= \sum_{i=1}^{m} \binom{m}{i} x^{m-i} \sum_{j=0}^{i-1} \binom{i}{j} B_j\end{aligned}$$

idet vi til sidst har vendt retningen i den indre sum ved substitutionen $j = i - k$.

Nu ved vi jo fra (4), at dette skal være $mx^{m-1}$. Derfor er koefficienterne 0 på nær koefficienten til $x^{m-1}$. Vi får således rekursionsformlerne til beregning af Bernoullitallene:

$$\begin{aligned} & B_0 = 1 \\ & \sum_{j=0}^{i-1} \binom{i}{j} B_j = 0 \text{ for } i > 1 \end{aligned} \tag{11}$$

De første Bernoullital ser meget uskyldige ud:

$$\begin{aligned} & B_0 = 1,\ B_1 = -\frac{1}{2},\ B_2 = \frac{1}{6},\ B_4 = -\frac{1}{30},\ B_6 = \frac{1}{42} \\ & B_8 = -\frac{1}{30},\ B_{10} = \frac{5}{66},\ B_{12} = -\frac{691}{2730},\ B_{14} = \frac{7}{6} \end{aligned} \tag{12}$$

men de vokser meget hurtigt, faktisk ligner de $\frac{2(2n)!}{(2\pi)^{2n}}$. F. eks. er nogle af dem

$$\begin{aligned}
B_{20} &= -\frac{174611}{330}, \ B_{40} = -\frac{261082718496449122051}{13530}, \\
B_{60} &= -\frac{1215233140483755572040304994079820246041491}{56786730}
\end{aligned}$$

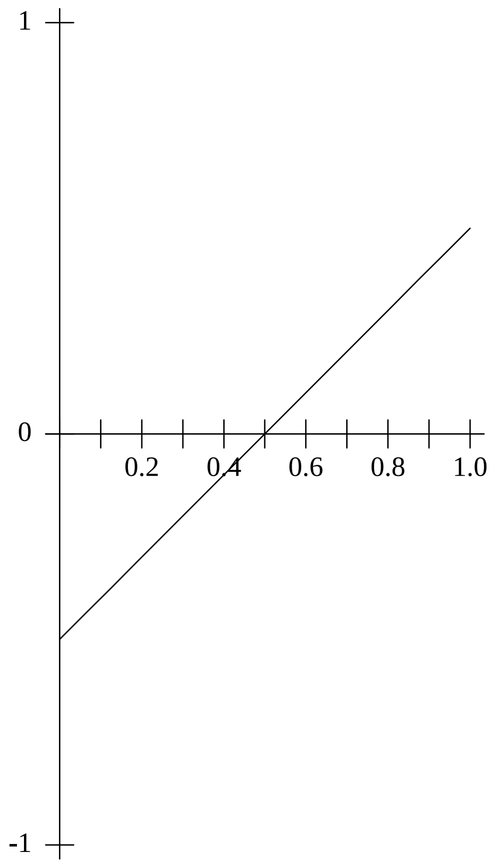
Så snart vi kender Bernoullitallene, kan vi umiddelbart skrive Bernoullipolynomierne op i henhold til (10):

$$\begin{aligned}
B_0 &= 1 \\
B_1 &= x - \frac{1}{2} \\
B_2 &= x^2 - x + \frac{1}{6} \\
B_3 &= x(x-1)\left(x - \frac{1}{2}\right) \\
B_4 &= x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30} \\
B_5 &= x(x-1)\left(x - \frac{1}{2}\right)\left(x^2 - x - \frac{1}{3}\right) \\
B_6 &= x^6 - 3x^5 + \frac{5}{2}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{42}
\end{aligned} \tag{13}$$

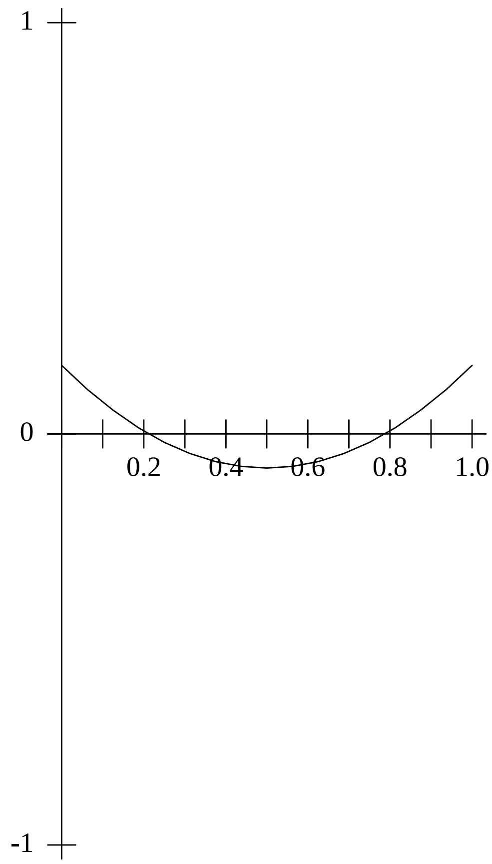
Ved deres hjælp løser vi umiddelbart Bernoullis problem, f. eks.

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n} k^2 &= \frac{(n+1)n(n-\frac{1}{2})}{3} = \frac{n(n+1)(2n-1)}{6} \\
\sum_{k=1}^{n} k^3 &= \frac{(n+1)^4 - 2(n+1)^3 + (n+1)^2 - \frac{1}{30} + \frac{1}{30}}{4} = \\
&= \frac{(n+1)^2(n^2+2n+1-2n-2+1)^2}{4} = \left(\frac{n(n+1)}{2}\right)^2
\end{aligned}$$

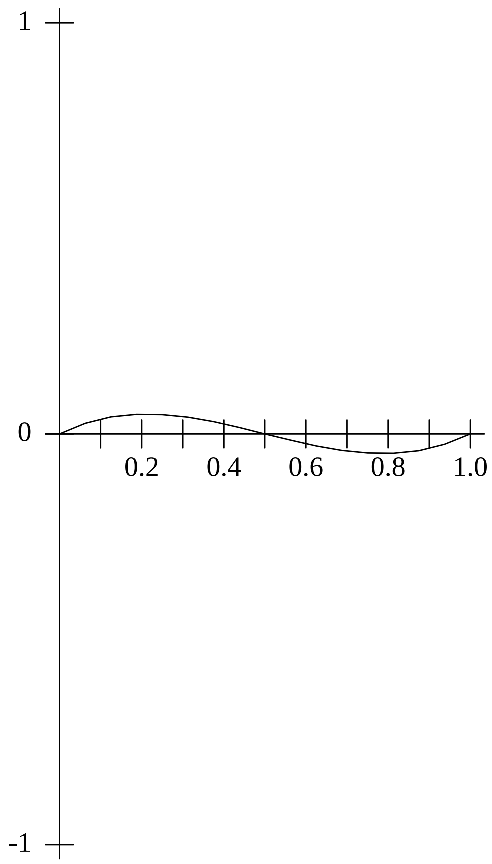
På intervallet $[0,1]$ ser de første således ud:



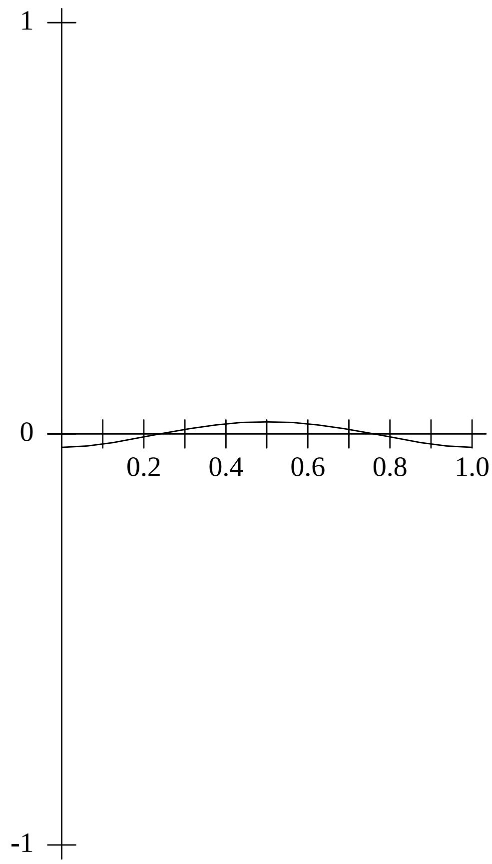

$B_1(x)$




$B_2(x)$




$B_3(x)$




$B_4(x)$

Formlen (6) har interessante anvendelser. Vi kan jo integrere den og tilmed anvende (4) til at få

(14)
$$\int_0^1 B(x,m)dx = \frac{1}{m+1}\big[B(x,m+1)\big]_0^1 =$$
$$= \frac{1}{m+1}(B(1,m+1) - B(0,m+1)) = 0^m = 0 \text{ for } m > 0$$

Denne egenskab kan umiddelbart benyttes til beregning af polynomier og tal, idet vi finder stamfunktionen af det forrige Bernoulli polynomium og så korrigerer med et konstantled, så integralet bliver 0. Dette konstantled er så Bernoullitallet.

At ligningen

(15) $$f(x+1) - f(x) = (m+1)x^m$$

kun løses af Bernoullipolynomiet $B(x, m+1)$ på nær en konstant, har en interessant anvendelse. Vi kan jo gøre prøve med funktionen

(16) $$f(x) = (-1)^{m+1}B(1-x, m+1)$$

Vi finder umiddelbart

$$f(x+1)-f(x) = (-1)^{m+1}\left(B(-x,m+1)-B(1-x,m+1)\right) = \\ = -(-1)^{m+1}(m+1)(-x)^m = (m+1)x^m$$

Med andre ord, $f(x)$ afviger fra $B(x,m+1)$ med en konstant. Frem for at finde denne, differentierer vi blot de to funktioner og får derved formlen

$$B(1-x,m) = (-1)^m B(x,m) \tag{17}$$

Bernoullipolynomiets værdi i 0 er netop Bernoullitallet, og bortset fra B(x,1), følger det af (14), at værdien i 1 også er Bernoullitallet. Af (17) følger, at for $m$ ulige er $B(1,m) = -B(0,m)$, så for $m > 1$ ulige er $B_m = B(0,m) = 0$. Af (17) følger også for $m$ ulige, at $B(\frac{1}{2},m) = -B(\frac{1}{2},m) = 0$.

Af (17) følger, at for *m lige,* er Bernoullipolynomiet $B(x,m)$ symmetrisk om linien $x = \frac{1}{2}$, mens det for *m ulige* er symmetrisk om punktet $(\frac{1}{2},0)$.

Fra $m = 3$ har de ulige Bernoullipolynomier de tre nulpunkter, 0, $\frac{1}{2}$ og 1. Men der kan ikke være flere i intervallet [0,1]. Thi har det $m$'te af dem endnu et nulpunkt, $x$, giver symmetrien, at det har to, nemlig yderligere $1-x$. Altså har det 5. Men så har det 4 ekstremer i intervallet, så ifølge (6) har det $(m-1)$'te (lige) Bernoullipolynomium ialt 4 nulpunkter i ]0,1[. Igen ifølge (6) har det ulige $(m-2)$'te Bernoullipolynomium 3 nulpunkter i intervallet ]0,1[, og hertil de to endepunkter, 0 og 1. Altså ialt 5. Men det gælder jo for alle $m \geq 5$, så vi ender med at få 5 nulpunkter for et polynomium af grad 3. Derfor kan ingen af de ulige have mere end 3 nulpunkter, og heraf fås igen, at de lige må nøjes med 2.

Heraf følger nu for $m$ lige, at integralet vokser (aftager) indtil $x = \frac{1}{2}$, hvorefter det aftager (vokser) til 0 for $x = 1$. Det skifter med andre ord ikke fortegn i intervallet. Derfor gælder uligheden for $0 < x < 1$:

$$|B(x,2m)| < |B_{2m}| \tag{18}$$

Ligningen

$$f(x+\tfrac{1}{2}) - f(x) = (m+1)x^m \tag{19}$$

har åbenbart løsningerne $B(x,m+1) + B(x+\frac{1}{2},m+1)$ og $2^{-m}B(2x,m+1)$, som begge er polynomier i $x$. Deres differens bliver derfor igen et polynomium, som tillige er periodisk og altså konstant. Ved differentiation af de to funktioner, fås samme funktion og derfor formlen

$$B(2x,m) = 2^{m-1}\left(B(x,m) + B(x+\tfrac{1}{2})\right) \tag{20}$$

Heraf fås for $x = 0$ værdien

$$B(\tfrac{1}{2},m) = -\left(1-2^{1-m}\right)B_m \tag{21}$$

For $m$ lige er den numeriske værdi i $\frac{1}{2}$ altså lige netop mindre end den numeriske værdi i 0 og 1.

**Euler–Maclaurins formel.** Formlerne (6) og (14) fik Leonhard Euler (1707–1784) i 1732 og Colin Maclaurin (1698–1746) i 1742 til at bruge Bernoullipolynomierne til at finde en rækkeudvikling af et vilkårligt integral af en mange gange differentiabel funktion, $f(x)$, udtrykt ved funktionens højere afledede,

$$\int_a^b f(x)dx = ? \tag{22}$$

Vi starter med at udføre partiel integration af produktet af den vilkårlige funktion med $B(x,0) = 1$. For nemheds skyld betragter vi intervallet $[0,1]$.

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(x)dx &= \int_0^1 B(x,0)f(x)dx = \\ &= \big[B(x,1)f(x)\big]_0^1 - \int_0^1 B(x,1)f'(x)dx = \\ &= \frac{f(1)+f(0)}{2} - \int_0^1 B(x,1)f'(x)dx\end{aligned} \tag{23}$$

Derefter udføres partiel integration på det sidste integral

$$\begin{aligned}\int_0^1 B(x,1)f'(x)dx &= \frac{1}{2}\left[B(x,2)f'(x)\right]_0^1 - \frac{1}{2}\int_0^1 B(x,2)f''(x)dx = \\ &= \frac{B_2}{2}(f'(1)-f'(0)) - \frac{1}{2}\int_0^1 B(x,2)f''(x)dx\end{aligned}$$

Det er åbenbart en teknik, som vi kan blive ved med at udføre, så længe $f$ kan differentieres

$$\begin{aligned}&\int_0^1 B(x,m)f^{(m)}(x)dx = \\ &= \frac{1}{m+1}\left[B(x,m+1)f^{(m)}(x)\right]_0^1 - \frac{1}{m+1}\int_0^1 B(x,m+1)f^{(m+1)}(x)dx = \\ &= \frac{B_{m+1}}{m+1}(f^{(m)}(1)-f^{(m)}(0)) - \frac{1}{m+1}\int_0^1 B(x,m+1)f^{(m+1)}(x)dx\end{aligned}$$

Vi foretrækker at slutte med et ulige $m = 2n-1$, så det tilsvarende integral er

$$\int_0^1 B(x,2n-1)f^{(2n-1)}(x)dx$$

Til dette Bernoullipolynomium vælger vi stamfunktionen

$$\frac{B(x,2n)-B_{2n}}{2n} \tag{24}$$

som er 0 i endepunkterne, så differensen forsvinder. Herved fås omskrivningen

$$\int_0^1 B(x,2n-1)f^{(2n-1)}(x)dx = 0 - \frac{1}{2n}\int_0^1 \left(B(x,2n) - B_{2n}\right) f^{(2n)}(x)dx$$

Da (24) har konstant fortegn i intervallet, kan vi ved en vurdering af $f^{(2n)}(x)$ mellem konstante grænser,

$$\alpha \le f^{(2n)}(x) \le \beta$$

få integralet vurderet ved

$$\int_0^1 |B(x,2n) - B_{2n}|\,\alpha dx \le \int_0^1 |B(x,2n) - B_{2n}|\, f^{(2n)}(x)dx \le \int_0^1 |B(x,2n) - B_{2n}|\,\beta dx$$

Det kan derfor udtrykkes som en slags middelværdi. Der findes et tal $\xi \in ]0,1[$, så

$$\int_0^1 \left(B(x,2n) - B_{2n}\right) f^{(2n)}(x)dx = f^{(2n)}(\xi)\int_0^1 \left(B(x,2n) - B_{2n}\right) dx = -B_{2n}f^{(2n)}(\xi)$$

idet vi benytter (14). Når vi substituerer den ene omregning i den forrige hele vejen tilbage til (23) får vi *Euler–MacLaurins formel,*

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{f(0)+f(1)}{2} + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{B_{2j}}{(2j)!}\left(f^{(2j-1)}(0) - f^{(2j-1)}(1)\right) - \frac{B_{2n}}{(2n)!}f^{(2n)}(\xi)$$

Formlen kan naturligvis transformeres til et vilkårligt interval, f. eks. intervallet $[x_1, x_2]$, idet vi nu finder $\xi \in ]x_1, x_2[$:

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_2} f(t)dt =& \frac{x_2 - x_1}{2}(f(x_1) + f(x_2)) + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{B_{2j}}{(2j)!}(x_2 - x_1)^{2j}\left(f^{(2j-1)}(x_1) - f^{(2j-1)}(x_2)\right)\\ &- \frac{(x_2 - x_1)^{2n+1}}{(2n)!}B_{2n}f^{(2n)}(\xi)\end{aligned}$$

**Romberg integration.** Hvis vi nu skal beregne et integral over et interval, $[a, b]$, så deler vi det i N lige store delintervaller, der altså hver får længden $h = \frac{b-a}{N}$. Delepunkterne betegner vi $a_0 = a, a_1 = a + h, \cdots, a_i = a + ih, a_N = a + Nh = b$. Vi vil foretrække at vælge $N$ stor nok til, at $h \le \frac{1}{2}$. Når vi så anvender Euler–Maclaurins formel på hvert delinterval, og lægger dem alle sammen sammen, så går alle de afledede i delepunkterne ud mod hinanden. Derved fås *Euler–Maclaurins sumformel:*

$$\begin{aligned}\int_a^b f(t)dt =& h\left(\frac{1}{2}(f(a) + \sum_{\nu=1}^{N-1} f(a_\nu)) + \frac{1}{2}f(b)\right) +\\ &+ \sum_{j=1}^{n-1}\frac{B_{2j}}{(2j)!}h^{2j}\left(f^{(2j-1)}(a) - f^{(2j-1)}(b)\right) -\\ &- \sum_{\nu=1}^{N}\frac{B_{2n}}{(2n)!}h^{2n+1}f^{(2n)}(\xi_\nu)\end{aligned} \tag{25}$$

hvor $\xi_\nu \in ]a_{\nu-1}, a_\nu[$. Da $h = \frac{b-a}{N}$ og $f^{(2n)}$ er kontinuert, kan vi skrive

$$\sum_{\nu=1}^{N} hf^{(2n)}(\xi_\nu) = (b-a)\sum_{\nu=1}^{N} \frac{f^{(2n)}(\xi_\nu)}{N} = (b-a)f^{(2n)}(\xi) \tag{26}$$

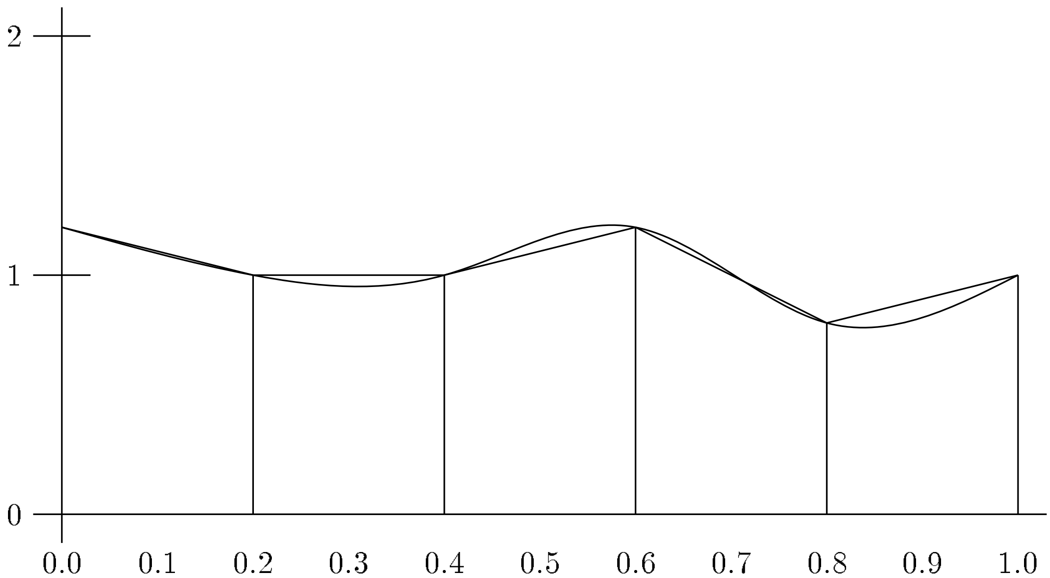
idet gennemsnitsværdien må antages i et punkt, $\xi \in ]a, b[$. Indsættes (26) i (25), fås

$$\begin{aligned}\int_a^b f(t)dt =& h\left(\frac{1}{2}(f(a) + \sum_{\nu=1}^{N-1} f(a_\nu)) + \frac{1}{2}f(b)\right) + \\ &+ \sum_{j=1}^{n-1} \frac{B_{2j}}{(2j)!} h^{2j}\left(f^{(2j-1)}(a) - f^{(2j-1)}(b)\right) - \\ &- (b-a)\frac{B_{2n}}{(2n)!} h^{2n} f^{(2n)}(\xi)\end{aligned} \tag{27}$$

Formlens første led,

$$K_1 = h\left(\frac{1}{2}(f(a) + \sum_{\nu=1}^{N-1} f(a_\nu) + \frac{1}{2}f(b)\right) \tag{28}$$

kaldes *kordetrapezformlen,* fordi det er den integralapproximation, man får ud af at approximere arealet under funktionens graf med trapezer med højde $h$ og siderne lig med funktonsværdierne i endepunkterne. Resten af formlen kan så siges at være udtryk for fejlen ved denne kordetrapezformel.




Approximation med kordetrapezer

Det bemærkelsesværdige ved denne integrationsformel er, at koefficienterne til $h^{2j}$ kun afhænger af intervallets endepunkter, ikke af $h$ eller $N$.

Det betyder, at vi har en integrationsformel af formen

$$\int_a^b f(t)dt = K_1 + \sum_{j=1}^{n-1} c_j h^{2j} - (b-a)\frac{B_{2n}}{(2n)!} h^{2n} f^{(2n)}(\xi_1)$$

Hvis vi nu fordobler antallet af delintervaller og dermed halverer skridtlængden, $h$, så får vi en formel af udseendet:

$$\int_a^b f(t)dt = K_2 + \sum_{j=1}^{n-1} c_j \left(\frac{h}{2}\right)^{2j} - (b-a)\frac{B_{2n}}{(2n)!} \left(\frac{h}{2}\right)^{2n} f^{(2n)}(\xi_2)$$

Beregning af $K_2$ kræver blot beregning af funktionsværdierne i alle intervallernes midtpunkter, de andre har vi i forvejen.

Af disse to formler kan vi eliminere leddene, der indeholder koefficienten $c_1$. Vi tager 4 af den anden og trækker den første fra. Efter deling med 3 fås:

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(t)dt &= \frac{4K_2 - K_1}{3} + \sum_{j=2}^{n-1} c_j h^{2j} \frac{2^{2(1-j)} - 1}{3} + \\
&+ (b-a)\frac{B_{2n}}{(2n)!}\frac{h^{2n}}{3}(f^{(2n)}(\xi_1) - 2^{2(1-n)} f^{(2n)}(\xi_2)) = \\
&= K_1^1 + \sum_{j=2}^{n-1} c_j' h^{2j} + (b-a)\frac{B_{2n}}{(2n)!}\frac{h^{2n}}{3} f^{(2n)}(\xi)
\end{aligned} \tag{29}$$

idet vi definerer

$$\begin{aligned}
K_1^1 &= \frac{4K_2 - K_1}{3} \\
c_j' &= c_j \frac{2^{2(1-j)} - 1}{3}
\end{aligned} \tag{30}$$

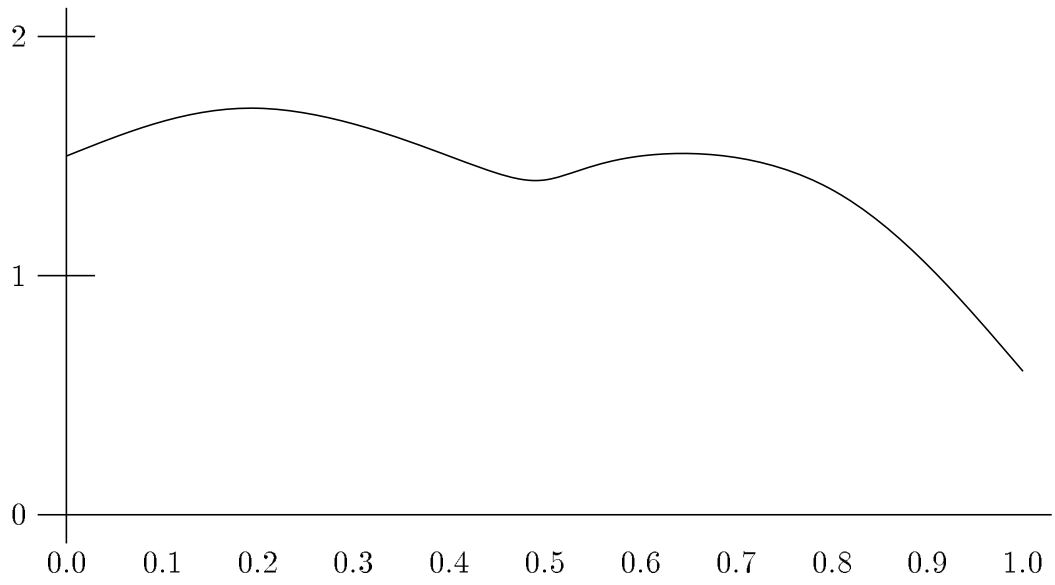
og regner med, at der findes en værdi, $\xi$, så

$$f^{(2n)}(\xi) = (f^{(2n)}(\xi_1) - 2^{2(1-n)} f^{(2n)}(\xi_2))$$

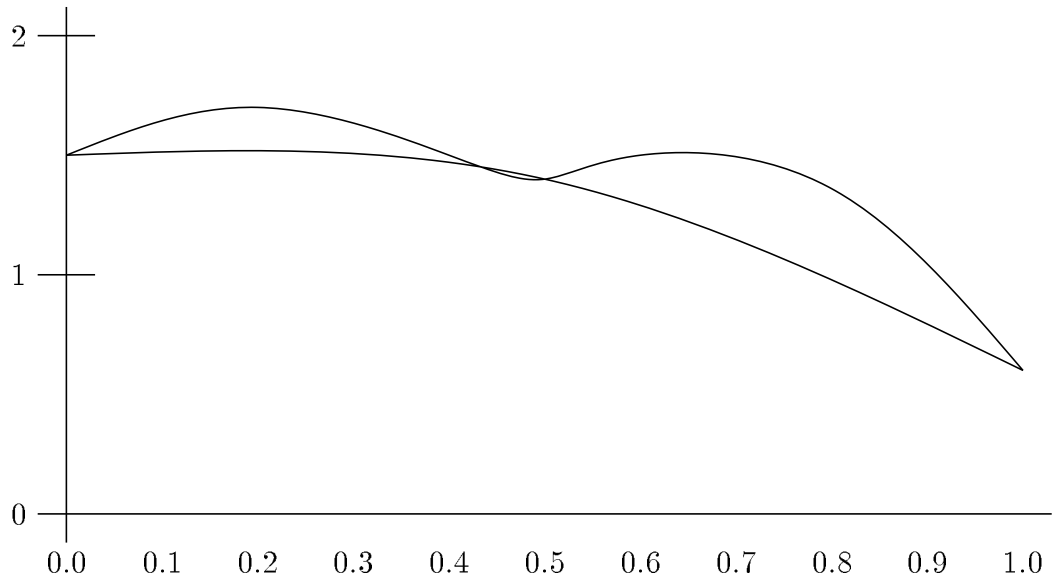
Dermed er fejlen på $K_2$, der var af størrelsesorden $\frac{h^2}{4}$, ændret til en fejl på $K_1^1$, der er af størrelsesorden $h^4$. Når blot $h < \frac{1}{2}$, er det i sig selv en forbedring.

Den ny integralapproximation, (30), svarer til, at vi over et interval, $]a_{\nu-1}, a_\nu[$, med midtpunkt $c_\nu$, bruger approximationen

$$\frac{h}{6}\left(f(a_{\nu-1}) + 4f(c_\nu) + f(a_\nu)\right) \tag{31}$$




Funktion




Trediegradsapproximation

Denne approximation er genkendelig som *Keplers tønderegel* efter Johannes Kepler (1571–1630), som i 1615 i sin berømte bog, *Stereometria doliorum vinorum,* brugte den til måling af indholdet af et halvfyldt vinfad, eller som *Simpsons formel* efter Thomas Simpson (1710–1761), der nævner den i en lærebog. Tanken er simpelthen den, at for givne tre punkter, e.g., $-1, 0, 1$, har vi de givne funktionsværdier, $y_{-1}, y_0, y_1$, samt i midtpunktet værdien af funktionens afledede, $y'_0$. Nu tænker vi os, at vi har lagt et polynomium af tredie grad gennem punkterne, så det har afledet i 0 lig med funktionens:

$$p(x) = \alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta$$
$$p'(x) = 3\alpha x^2 + 2\beta x + \gamma$$

Når vi integrerer polynomiet fra $-1$ til 1, får vi jo

$$\int_{-1}^{1} p(x)dx = \left[\alpha\frac{x^4}{4} + \beta\frac{x^3}{3} + \gamma\frac{x^2}{2} + \delta x\right]_{-1}^{1} = \frac{2}{3}\beta + 2\delta \tag{31}$$

Vi behøver altså kun at finde $\beta$ og $\delta$. Da $p(0) = y_0$, har vi åbenbart $\delta = y_0$. Sætter vi $x = \pm 1$, får vi ligningerne

$$\begin{aligned} \alpha + \beta + \gamma + \delta &= y_1 \\ -\alpha + \beta - \gamma + \delta &= y_{-1} \end{aligned}$$

Lægger vi sammen og indfører $\delta = y_0$, får vi $2\beta = y_1 + y_{-1} - 2y_0$. Indsættes disse værdier i (31), får vi integralapproximationen for et interval af længde 2:

$$\int_{-1}^{1} p(x)dx = \frac{y_1 + y_{-1} - 2y_0}{3} + 2y_0 = \frac{y_1 + y_{-1} + 4y_0}{3} \tag{32}$$

Korrigeres til skridtlængden $h$, fås (30).

Vi kan gøre det samme igen, halvere skridtlængden og beregne $K_3$. Ud fra $K_2$ og $K_3$ kan vi så forbedre approksimationen til Keplers tønderegel, $K_2^1 = \frac{1}{3}(4K_3 - K_2)$, hvis fejl er af størrelsesorden $\frac{h^4}{16}$. Også her gælder det, at koefficienterne til hhv. $h^4$ og $\frac{h^4}{16}$ er den samme. Så vi kan eliminere disse led og få en fejl af størrelsesorden $h^6$ i stedet for, ved at approksimere med

$$K_1^2 = \frac{16K_2^1 - K_1^1}{15}$$

Har vi ved sukcessiv halvering af skridtlængden dannet approximationerne $K_1, K_2, \cdots, K_n$, kan vi danne et mønster af approximationer efter opskriften:

$$K_j^i = \frac{2^{2i}K_{j+1}^{i-1} - K_j^{i-1}}{2^{2i} - 1} \quad i = 1, \cdots, n-1, \quad , j = 1, \cdots, n-i \tag{33}$$

Vi kan overskueligt skrive dem i et trekantet mønster, hvor meningen er, at man først beregner approximationerne i søjlen til venstre, derefter ved hjælp af (33) udregner de øvrige, altid ved hjælp af værdien til venstre og den ovenover:

$$\begin{array}{ccccccccc}
K_1 & & & & & & & & \\
& \searrow & & & & & & & \\
K_2 & \rightarrow & K_1^1 & & & & & & \\
& \searrow & & \searrow & & & & & \\
K_3 & \rightarrow & K_2^1 & \rightarrow & K_1^2 & & & & \\
. & & . & & & . & & & \\
. & & . & & & & . & & \\
. & \searrow & . & \searrow & & & & \searrow & \\
K_n & \rightarrow & K_{n-1}^1 & \rightarrow & K_{n-2}^2 & . & . & \rightarrow & K_1^{n-1}
\end{array} \tag{34}$$

Når vi har elimineret alle leddene i summen, når vi til approximationen $K_1^{n-1}$, hvis fejl bliver

$$\frac{|B_{2n}|}{(2n)!} \cdot \frac{h^{2n}}{3 \cdot 15 \cdots (2^{2(n-1)} - 1)} \cdot (b-a)|f^{(2n)}(\xi)| \tag{35}$$

For små værdier af $n$ kan vi jo regne koefficienten ud, og for store værdier kan vi for det første vurdere nævneren i den anden brøk ned til

$$3 \cdot 15 \cdots (2^{2(n-1)} - 1) > 2 \cdot 2^3 \cdots 2^{2n-3} = 2^{(n-1)^2} \tag{36}$$

for det andet benytte den ovenfor nævnte approximation,

$$\frac{B_{2n}}{(2n)!} \simeq \frac{2}{(2\pi)^{2n}} \simeq \frac{2}{40^n} \tag{37}$$

Indsættes (36) og (37) i (35), fås fejlvurderingen:
(38)

$$\frac{2h^{2n}}{40^n 2^{(n-1)^2}} \cdot (b-a)|f^{(2n)}(\xi)| = \frac{h^{2n}}{10^n 4^n 2^{n(n-2)}} \cdot (b-a)|f^{(2n)}(\xi)| = \frac{h^{2n}}{10^n 2^{n^2}} \cdot (b-a)|f^{(2n)}(\xi)|$$

Hvis vi nu for eksempel vil beregne $\pi$ med 10 decimaler, altså med en fejl, der højst er $10^{-12}$, kan vi jo approximere integralet

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx = 4 \cdot \int_0^{\frac{\pi}{4}} \frac{1+tg^2 v}{1+tg^2 v} dv = \pi \tag{39}$$

Vælger vi nu skridtlængden $h = \frac{1}{4}$, ser vi, at for $n = 4$ bliver fejlen (35) af størrelse

$$\begin{aligned} \frac{|B_8|}{8!} \frac{\left(\frac{1}{4}\right)^8}{3 \cdot 15 \cdot 63} \cdot (1-0)|f^{(8)}(\xi)| &= \frac{1}{30 \cdot 40320 \cdot 65536 \cdot 2835} \cdot |f^{(8)}(\xi)| = \\ &= \frac{|f^{(8)}(\xi)|}{224737099776000} \simeq 10^{-14} \cdot |f^{(8)}(\xi)| \end{aligned}$$

Med brug af (38) er det derimod hovedregning. Fejlen vurderes ved

$$\frac{\left(\frac{1}{4}\right)^8}{10^4 2^{16}} \cdot |f^{(2n)}(\xi)| = \frac{|f^{(2n)}(\xi)|}{10^4 2^{32}} \simeq 10^{-13} \cdot |f^{(2n)}(\xi)|$$

idet vi blot har benyttet, at $2^{10} = 1024 \simeq 10^3$.

Udføres beregningerne i skemaet ovenfor, fås

$$\begin{array}{ccccccc}
3.131176470588 & & & & & & \\
 & \searrow & & & & & \\
3.138988494491 & \rightarrow & 3.141592502459 & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & & \\
3.140941612041 & \rightarrow & 3.141592651225 & \rightarrow & 3.141592661143 & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\
3.141429893175 & \rightarrow & 3.141592653553 & \rightarrow & 3.141592653708 & \rightarrow & 3.141592653590
\end{array}$$

Til sammenligning er tabelværdien $\pi = 3.14159265358979$.

Denne metode til at forbedre integralapproximationen er fra 1955 og kaldes *Romberg integration* efter Werner Romberg (1909–).

Teknikken til elimination af fejl af lav orden er, som det også fremgår af eksemplet, langt mere økonomisk end den banale, at forbedre værdien ved sukcessive halveringer. Romberg integration har ikke alene stor praktisk betydning ved integralberegninger, men ideen er videreudviklet af Josef Stoer (1934–) og Roland Bulirsch (1932–) i 1971 til den hidtil bedste metode til numerisk løsning af differentialligninger.