Numerička matematika
11. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Numerička integracija (nastavak):
  - Produljena trapezna formula za trigonometrijske polinome.
  - Ekstrapolacija i Rombergov algoritam.
  - Primjeri za Rombergov algoritam.
  - Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti.
    - Gauss–Christoffel formule.
    - Gauss–Radau formule.
    - Gauss–Lobatto formule.
  - Primjer za težinske Newton–Cotesove i Gaussove formule.

Informacije — kolokvij, rok za zadaće

Neslužbeni termin drugog kolokvija je:

- utorak, 8. 6., u 12 sati.

Neslužbeni termin popravnog kolokvija je:

- ponedjeljak, 21. 6., u 12 sati.

Rok za predaju zadaća je

- dan drugog kolokvija, do ponoći (24 sata).

Informacije — zadaće

"Žive" su i domaće zadaće iz NM.

- Realizacija ide "automatski" — preko web aplikacije.

Pogledajte na službeni web kolegija, pod "zadaće".

- Tamo su početne upute.

Skraćeni link je

`http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php`

Direktni link na aplikaciju za zadaće je

`http://degiorgi.math.hr/nm/`

Informacije

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

http://web.math.hr/~singer/num_mat/

Tamo su kompletna predavanja od prošle dvije godine, a stizat će i nova (kako nastaju).

- Prva 2 su još nesređena — onako kako ste ih vidjeli!

Skraćena verzija skripte — 1. dio (prvih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat1.pdf

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 6 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat2.pdf

Informacije — demonstratori

Kolegij "Numerička matematika" ima čak 3 demonstratora:

- Ervin Duraković, Nika Kenda i Marin Mišur.

Za upute za dogovor i termine demonstratura

- pogledajte oglase na oglasnoj ploči i
- web stranicu kolegija — pod "nastava".

Produljena trapezna formula za periodičke funkcije

Prednosti produljene trapezne metode

Iako produljena trapezna metoda egzaktno integrira samo polinome stupnja 1, ona “puno bolje” integrira trigonometrijske funkcije.

Zbog jednostavnosti, pretpostavimo da je $[a, b]$ interval $[0, 2\pi]$ i neka je $\mathcal{T}_N$ familija trigonometrijskih funkcija,

$$\mathcal{T}_N[0, 2\pi] = \left\{ f \;\middle|\; f(x) = a_0 + \sum_{k=1}^{N} \big(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx) \big) \right\}.$$

Tvrdnja. Neka je $E_n^T(f)$ greška produljene trapezne formule s n podintervala za funkciju f. Tada vrijedi

$$E_n^T(f) = 0 \quad \text{za svaki} \quad f \in \mathcal{T}_{n-1}[0, 2\pi],$$

tj. imamo egzaktnu integraciju na prostoru $\mathcal{T}_{n-1}[0, 2\pi]$.

Greška trapezne metode za trig. funkcije

Dokaz. Provjeru je najlakše napraviti korištenjem kompleksne eksponencijalne funkcije

$$e_k(x) := e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx), \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Greška produljene trapezne formule za funkciju e_k je prava vrijednost integrala minus aproksimacija po trapeznoj formuli

$$E_n^T(e_k) = \int_0^{2\pi} e_k(x)\,dx - \frac{\pi}{n}\Bigg(e_k(0) + 2\sum_{\ell=1}^{n-1} e_k\Big(\frac{2\pi\ell}{n}\Big) + e_k(2\pi)\Bigg)$$

$$= \int_0^{2\pi} e^{ikx}\,dx - \frac{2\pi}{n}\sum_{\ell=0}^{n-1} e^{2\pi k\ell i/n}.$$

Greška trapezne metode za trig. funkcije

Kad je $k = 0$, onda je

$$E_n^T(e_0) = \int_0^{2\pi} dx - \frac{2\pi}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} 1 = x \,\Big|_0^{2\pi} - \frac{2\pi}{n} \cdot n = 2\pi - 2\pi = 0.$$

Kad je $k > 0$, imamo

$$\begin{aligned} E_n^T(e_k) &= \int_0^{2\pi} e^{ikx}\, dx - \frac{2\pi}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} e^{2\pi k\ell i/n} \\ &= \left\{ \int_0^{2\pi} e^{ikx}\, dx = \frac{1}{ik} e^{ikx} \,\Big|_0^{2\pi} = 0 \right\} = -\frac{2\pi}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \left(e^{2\pi ki/n}\right)^{\ell}. \end{aligned}$$

Greška trapezne metode za trig. funkcije

Ako $n|k$, tj. ako je $k = 0 \pmod n$, onda je $e^{2\pi ki/n} = 1$, pa je

$$E_n^T(e_k) = -\frac{2\pi}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} 1 = -2\pi.$$

Ako $n \not| k$, tj. ako je $k \neq 0 \pmod n$, onda je $e^{2\pi ki/n} \neq 1$, pa je

$$E_n^T(e_k) = -\frac{2\pi}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \left(e^{2\pi ki/n}\right)^\ell = \text{(geometrijski red)}$$

$$= -\frac{2\pi}{n} \cdot \frac{1 - e^{2\pi kin/n}}{1 - e^{2\pi ki/n}} = -\frac{2\pi}{n} \cdot \frac{1 - 1}{1 - e^{2\pi ki/n}} = 0.$$

Greška trapezne metode za trig. funkcije

Zaključujemo da je

$$E_n^T(e_k) = \begin{cases} -2\pi, & \text{za } k > 0 \text{ i } k = 0 \pmod{n}, \\ 0, & \text{za } k = 0 \ \text{ili} \ k > 0 \text{ i } k \neq 0 \pmod{n}. \end{cases}$$

Uzimanjem realnog i imaginarnog dijela dobivamo

$$E_n^T(\cos(kx)) = \begin{cases} -2\pi, & \text{za } k > 0 \text{ i } k = 0 \pmod{n}, \\ 0, & \text{za } k = 0 \ \text{ili} \ k > 0 \text{ i } k \neq 0 \pmod{n}, \end{cases}$$

$$E_n^T(\sin(kx)) = 0.$$

Posebno, iz prve relacije odmah slijedi da je

$$E_n^T(e_k) = 0 \quad \text{za} \quad k = 0, \ldots, n-1. \qquad \blacksquare$$

Integral Fourierovog reda

Neka je f periodička funkcija s periodom 2π, koja ima uniformno konvergentan Fourierov razvoj (smijemo integrirati član po član!)

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \big(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)\big),$$

pri čemu su a_k i b_k Fourierovi koeficijenti za funkciju f.

Greška aproksimacije za integral funkcije f korištenjem produljene trapezne formule je

$$E_n^T(f) = \sum_{k=0}^{\infty} \big(a_k E_n^T(\cos(kx)) + b_k E_n^T(\sin(kx))\big) = -2\pi \sum_{\ell=1}^{\infty} a_{\ell \cdot n}.$$

Što je funkcija f glađa, to Fourierovi koeficijenti brže teže u 0.

Integral Fourierovog reda

Preciznije, neka je $f \in C^r(\mathbb{R})$, tj. f ima r neprekidnih derivacija na cijelom $\mathbb{R}$. Onda je

$$a_k = O(k^{-r}) \quad \text{za} \quad k \to \infty.$$

Slično vrijedi i za b_k. To znači da je greška u $E_n^T(f)$ približno jednaka prvom članu greške za $\ell = 1$, tj.

$$E_n^T(f) \approx -2\pi a_n,$$

odakle slijedi

$$E_n^T(f) = O(n^{-r}) \quad \text{za} \quad n \to \infty.$$

Budući da je općenito $h = (b-a)/n$ (ovdje je $h = 2\pi/n$), onda ovu ocjenu možemo zapisati kao

$$E_n^T(f) = O(h^r) \quad \text{za} \quad h \to 0.$$

Integral Fourierovog reda

Ako je $r > 2$, onda je ova ocjena za periodičke funkcije

$$E_n^T(f) = O(h^r) \quad \text{za} \quad h \to 0,$$

bitno bolja od relacije

$$E_n^T(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) = O(h^2), \quad \text{za} \quad h \to 0,$$

koja vrijedi za neperiodičke funkcije f.

Zadnju “standardnu” asimptotsku ocjenu možemo napisati i kao $E_n^T(f) = O(n^{-2})$, za $n \to \infty$.

Posebno, ako je $r = \infty$, onda produljena trapezna formula za periodičke funkcije konvergira brže od bilo koje potencije od h.

Još jedno dobro svojstvo produljene trapezne f.

Neka je f definirana na $\mathbb{R}$ i za neki $r \geq 1$ ima sljedeća svojstva:

$$f \in C^{2r+1}(\mathbb{R}), \qquad \int_{-\infty}^{\infty} |f^{(2r+1)}(x)|\, dx < \infty,$$

$$\lim_{x \to -\infty} f^{(2\rho-1)}(x) = \lim_{x \to \infty} f^{(2\rho-1)}(x) = 0, \quad \rho = 1, \ldots, r.$$

Tada se može pokazati da vrijedi

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, dx = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) + E(f;h),$$

pri čemu greška zadovoljava $E(f;h) = O(h^{2r+1})$, kad $h \to 0$.

Brza konvergencija produljene trapezne formule

Primjer. Korištenjem produljene trapezne formule izračunajte

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \, dx$$

za razne vrijednosti h.

Funkcija e^{-x^2} zadovoljava sva svojstva s prethodne folije, i to za svaki $r \in \mathbb{N}$. Onda možemo upotrijebiti formulu

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \, dx \approx h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh),$$

s tim da za grešku vrijedi $E(f; h) = O(h^{2r+1})$, kad $h \to 0$. Primjenom za $r = 1, 2, 3, \ldots$, vidimo da greška teži u nulu brže od bilo koje potencije od h.

Brza konvergencija produljene trapezne formule

Prethodnu formulu upotrebljavamo tako da u sumi, umjesto ∞, uzmemo dovoljno velik realni (cijeli) broj M, pa dobivamo

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx \approx h \sum_{k=-M}^{M} f(kh).$$

Budući da e^{-x^2} brzo trne za $x \to \infty$, odredimo M tako da je $Mh = 10$, što odgovara granicama integracije od -10 do 10.

Prava vrijednost integrala je 1, a za razne h dobivamo

h	n	Aproksimacija $I_n(f)$	Greška $I(f) - I_n(f)$
1	20	1.000103446372407640	−0.000103446372407639
0.5	40	1.000000000000000010	−0.000000000000000015
0.25	80	1.000000000000000000	−0.000000000000000000

Integracija singularne funkcije

Pretpostavimo sada da integriramo funkciju f na konačnoj domeni, ali takvu da je singularna u jednoj ili obje granice.

Ideja. Napraviti takvu transformaciju da

- granice integracije postanu $\pm\infty$, a
- funkcija zadovoljava "lijepa svojstva" za brzu integraciju produljenom trapeznom formulom.

Pretpostavimo da računamo integral

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

takav da su obje granice a i b konačne.

Integracija singularne funkcije

Konstruiramo preslikavanje

$$z = z(x) \qquad \text{(ili ekvivalentno)} \qquad x = x(z),$$

takvo da je

$$z(a) = -\infty, \quad z(b) = \infty.$$

Tada se zamijeni varijabla u integralu I, pa imamo

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} f(x(z)) \left(\frac{dx}{dz} \right) dz.$$

Točnost numeričke integracije ovisi o izabranoj transformaciji.

Integracija singularne funkcije

Primjeri takvih transformacija:

- eksponencijalna transformacija
$$x = \frac{1}{2}\big(a + b + (b-a)\,\mathrm{th}(z)\big),$$
odnosno
$$z = \mathrm{Arth}\left(\frac{2x - a - b}{b - a}\right),$$
- dvostruka eksponencijalna transformacija (jako dobra)
$$x = \frac{1}{2}\left[a + b + (b-a)\,\mathrm{th}\left(\frac{\pi}{2}\,\mathrm{sh}(z)\right)\right],$$
pri čemu je
$$\frac{dx}{dz} = \frac{\frac{\pi}{4}(b-a)\,\mathrm{ch}\,z}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\pi}{2}\,\mathrm{sh}(z)\right)}.$$

Rombergov algoritam

Općenito o Rombergovom algoritmu

Pri izvodu Rombergovog algoritma koristimo se sljedećim principima:

- udvostručavanjem broja podintervala u produljenoj trapeznoj metodi,
- eliminacijom vodećeg člana u asimptotskom razvoju greške, iz dvije susjedne produljene formule.

Ponovljena primjena ovog principa zove se Richardsonova ekstrapolacija.

Za početak, treba objasniti

- što je to asimptotski razvoj.

Asimptotski razvoj

Da bismo mogli približno izračunati sumu konvergentnog reda neke funkcije f u točki x, oblika

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n p_n(x),$$

red smo aproksimirali konačnom parcijalnom sumom

$$f_N(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n p_n(x).$$

Time smo podrazumijevali da ostatak reda teži prema nuli, i to po N, za fiksni x

$$\lim_{N\to\infty} (f(x) - f_N(x)) = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=N+1}^{\infty} a_n p_n(x) = 0.$$

Precizna definicija asimptotskog niza

Ako zamijenimo ulogu N i x u konvergenciji razvoja, dobivamo novi pojam asimptotskog razvoja. Pritom red uopće ne mora konvergirati.

Precizna definicija asimptotskog razvoja u okolini neke točke bazirana je na definiciji asimptotskog niza u okolini te točke.

Definicija. (Asimptotski niz) Neka je $D \subseteq \mathbb{R}$ neka domena i $c \in \operatorname{Cl} D$ neka točka iz zatvarača skupa D, s tim da c može biti i $+\infty$ ili $-\infty$. Nadalje, neka je $\varphi_n : D \to \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}_0$, niz funkcija za kojeg vrijedi

$$\varphi_n(x) = o(\varphi_{n-1}(x)) \quad (x \to c \text{ u } D),$$

za svaki $n \in \mathbb{N}$. Tada kažemo da je (φ_n) asimptotski niz kad $x \to c$ u skupu D. ■

Precizna definicija asimptotskog razvoja

Podsjetnik. Oznaka $\varphi_n(x) = o(\varphi_{n-1}(x))$ znači da svaka funkcija φ_n raste bitno sporije od prethodne funkcije φ_{n-1} u okolini neke točke (kod nas c), u smislu da vrijedi

$$\lim_{\substack{x \to c \\ x \in D}} \frac{\varphi_n(x)}{\varphi_{n-1}(x)} = 0,$$

što uključuje i pretpostavku da je $\varphi_{n-1}(x) \neq 0$ na nekoj okolini točke c gledano u skupu D, osim eventualno u samoj točki c.

Definicija. (Asimptotski razvoj) Neka je (φ_n), $n \in \mathbb{N}_0$, asimptotski niz kad $x \to c$ u skupu D. Formalni red funkcija

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n$$

Precizna definicija asimptotskog razvoja

je asimptotski razvoj funkcije f za $x \to c$ u skupu D, oznaka

$$f(x) \sim \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \quad (x \to c \text{ u } D),$$

ako za svaki $N \in \mathbb{N}$ vrijedi relacija asimptotskog ponašanja

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} a_n \varphi_n(x) + O(\varphi_N(x)) \quad (x \to c \text{ u } D),$$

tj. apsolutna greška između f i $(N-1)$-e parcijalne sume reda raste najviše jednako brzo kao i N-ti član asimptotskog niza, u okolini točke c. ■

Euler–MacLaurinova formula

Asimptotski razvoj pogreške za produljenu trapeznu metodu integracije daje Euler–MacLaurinova formula.

Teorem. (Euler–MacLaurinova formula) Neka su m i n cijeli brojevi takvi da je $m \geq 0$ i $n \geq 1$. Definiramo ekvidistantnu mrežu s n podintervala na $[a, b]$, tj.

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_k = a + kh, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Pretpostavimo da je $f \in C^{(2m+2)}[a, b]$. Za pogrešku produljene trapezne metode vrijedi

$$E_n(f) = \int\limits_a^b f(x)\, dx - I_n^T(f) = \sum_{i=1}^{m} \frac{d_{2i}}{n^{2i}} + F_{n,m},$$

Euler–MacLaurinova formula

gdje su koeficijenti

$$d_{2i} = -\frac{B_{2i}}{(2i)!}\,(b-a)^{2i}\,\bigl(f^{(2i-1)}(b) - f^{(2i-1)}(a)\bigr),$$

a ostatak je

$$F_{n,m} = \frac{(b-a)^{2m+2}}{(2m+2)!\,n^{2m+2}} \cdot \int\limits_a^b \overline{B}_{2m+2}\left(\frac{x-a}{h}\right) f^{(2m+2)}(x)\,dx.$$

Ovdje su B_{2i} Bernoullijevi brojevi,

$$B_i = -\int\limits_0^1 B_i(x)\,dx, \quad i \geq 1,$$

Euler–MacLaurinova formula

a $\overline{B}_i$ je periodičko proširenje običnih Bernoullijevih polinoma

$$\overline{B}_i(x) = \begin{cases} B_i(x), & \text{za } 0 \leq x \leq 1, \\ \overline{B}_i(x-1), & \text{za } x \geq 1. \end{cases}$$

Dokaz je u klasičnim udžebnicima numeričke analize. ■

U koeficijentima d_{2i} javljaju se Bernoullijevi brojevi. Osim $B_1 = -\frac{1}{2}$, svi ostali neparni Bernoullijevi brojevi su 0, a prvih nekoliko parnih je:

$$B_0 = 1, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \quad B_8 = -\frac{1}{30},$$
$$B_{10} = \frac{5}{66}, \quad B_{12} = -\frac{691}{2730}, \quad B_{14} = \frac{7}{6}, \quad B_{16} = -\frac{3617}{510}.$$

Nadalje, brojevi B_{2i} vrlo brzo rastu po apsolutnoj vrijednosti, tako da je $B_{60} \approx -2.139994926 \cdot 10^{34}$.

Eliminacija člana greške

"Red" u n^{-2}, koji se javlja u asimptotskoj ocjeni pogreške za produljenu trapeznu metodu

$$E_n(f) = \int_a^b f(x)\,dx - I_n^T(f) = \sum_{i=1}^{m} \frac{d_{2i}}{n^{2i}} + F_{n,m},$$

- ne konvergira — kad "glatkoća" m raste u ∞, jer koeficijenti d_{2i} ne teže prema nuli.

Naravno, znamo da $E_n(f) \to 0$, kad broj podintervala $n \to \infty$.

Ideja: Ako je funkcija f dovoljno glatka,

- eliminirati član po član u sumi za grešku,
- na osnovu izračunatih vrijednosti integrala s $n/2$ i n podintervala, odnosno, s duljinama koraka $2h$ i h.

Izvod Rombergovog algoritma

Neka je $I_n^{(0)}$ trapezna formula n podintervala.

Iz Euler–MacLaurinove formule, (ako je funkcija f dovoljno glatka i n paran), za asimptotski razvoj greške imamo

$$I - I_n^{(0)} = \frac{d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{d_4^{(0)}}{n^4} + \cdots + \frac{d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n,m}$$

$$I - I_{n/2}^{(0)} = \frac{4d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{16d_4^{(0)}}{n^4} + \cdots + \frac{2^{2m}d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n/2,m}.$$

Želimo eliminirati prvi član greške s n^{-2}, pa prvi razvoj pomnožimo s 4 i oduzmemo mu drugi razvoj. Dobivamo

$$4(I - I_n^{(0)}) - (I - I_{n/2}^{(0)}) = -\frac{12d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{60d_6^{(0)}}{n^6} + \cdots.$$

Izvod Rombergovog algoritma

Premješanjem članova koji imaju I na lijevu stranu, a zatim dijeljenjem, dobivamo

$$I = \frac{4I_n^{(0)} - I_{n/2}^{(0)}}{3} - \frac{4d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{20d_6^{(0)}}{n^6} + \cdots .$$

Prvi član zdesna uzimamo kao bolju, popravljenu aproksimaciju integrala. Označimo tu aproksimaciju s

$$I_n^{(1)} = \frac{4I_n^{(0)} - I_{n/2}^{(0)}}{3}, \quad n \text{ paran}, \ n \geq 2.$$

Sada u formuli za grešku, da bismo lakše računali, definiramo

$$d_4^{(1)} = -4d_4^{(0)}, \quad d_6^{(1)} = -20d_6^{(0)}, \ldots$$

Izvod Rombergovog algoritma

Time smo dobili novi integracijski niz $I_2^{(1)}, I_4^{(1)}, I_8^{(1)}, \ldots$
Njegova je greška

$$I - I_n^{(1)} = \frac{d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots.$$

Sličan argument kao i prije možemo upotrijebiti i dalje.
Eliminirajmo prvi član pogreške iz $I_n^{(1)}$ i $I_{n/2}^{(1)}$,

$$I - I_{n/2}^{(1)} = \frac{16d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{64d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots,$$

uz uvjet da je funkcija dovoljno glatka i da je n djeljiv s 4.
Tada je

$$16(I - I_n^{(1)}) - (I - I_{n/2}^{(1)}) = \frac{-48d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots,$$

Izvod Rombergovog algoritma

odnosno

$$I = \frac{16 I_n^{(1)} - I_{n/2}^{(1)}}{15} - \frac{-48 d_6^{(1)}}{15 n^6} + \cdots.$$

Ponovno, prvi član s desne strane proglasimo za novu aproksimaciju integrala

$$I_n^{(2)} = \frac{16 I_n^{(1)} - I_{n/2}^{(1)}}{15}, \quad n \text{ djeljiv s } 4, \quad n \geq 4.$$

Induktivno, nastavljanjem postupka, dobivamo Richardsonovu ekstrapolaciju

$$I_n^{(k)} = \frac{4^k I_n^{(k-1)} - I_{n/2}^{(k-1)}}{4^k - 1}, \quad n \geq 2^k.$$

Izvod Rombergovog algoritma

Pritom je greška jednaka

$$E_n^{(k)} = I - I_n^{(k)} = \frac{d_{2k+2}^{(k)}}{n^{2k+2}} + \cdots$$

$$= \beta_k (b-a) h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi), \quad a \leq \xi \leq b.$$

Sada možemo složiti Rombergovu tablicu

$$\begin{array}{llll} I_1^{(0)} & & & \\ I_2^{(0)} & I_2^{(1)} & & \\ I_4^{(0)} & I_4^{(1)} & I_4^{(2)} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} .$$

Poredak računanja

Poredak računanja u tablici je sljedeći:

$$\begin{array}{llll} 1 & & & \\ 2 & 3 & & \\ 4 & 5 & 6 & \\ 7 & 8 & 9 & \cdots \end{array} .$$

Iz ocjene greške možemo izvesti omjere grešaka u stupcu Rombergove tablice, uz pretpostavku dovoljne glatkoće funkcije f. Dobivamo

$$\frac{E_n^{(k)}}{E_{2n}^{(k)}} \approx 2^{2k+2},$$

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

$$
\begin{array}{ccccc}
1 & & & & \\
4 & 1 & & & \\
4 & 16 & 1 & & \\
4 & 16 & 64 & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
.
$$

Puno ilustrativnije od omjera grešaka $E_n^{(k)} / E_{2n}^{(k)} \approx 2^{2k+2}$ je promatranje eksponenta omjera grešaka $2k+2$,

$$
\begin{array}{ccccc}
1 & & & & \\
2 & 1 & & & \\
2 & 4 & 1 & & \\
2 & 4 & 6 & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
.
$$

Primjeri za Rombergov algoritam

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

Pokažimo na primjeru da prethodni omjeri pogrešaka u stupcu vrijede samo ako je funkcija dovoljno glatka.

Primjer. Rombergovim algoritmom s točnošću 10^{-12} nađite vrijednosti integrala

$$\int\limits_0^1 e^x \, dx, \qquad \int\limits_0^1 x^{3/2} \, dx, \qquad \int\limits_0^1 \sqrt{x} \, dx$$

i pokažite kako se ponašaju omjeri pogrešaka i eksponenti omjera pogrešaka u stupcima.

Eksponencijalna funkcija

Eksponencijalna funkcija ima beskonačno mnogo neprekidnih derivacija, pa bi se računanje integrala moralo ponašati po predviđanju.

Ako uspoređujemo vrijednosti samo "po dijagonali" tablice, nakon $2^5 = 32$ podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo približnu vrijednost integrala I_5 takvu da je

$$I_5 = 1.7182818284590452$$
$$I = e - 1 = 1.7182818284590452$$
$$I - I_5 = 0.$$

Eksponencijalna funkcija

Omjeri pogrešaka u stupcima su

0	1.0000					
1	3.9512	1.0000				
2	3.9875	15.6517	1.0000			
3	3.9969	15.9913	62.4639	1.0000		
4	3.9992	15.9777	63.6087	249.7197	1.0000	
5	3.9998	15.9944	63.9017	254.4010	1000.5738	1.0000

pa uz malo "kreativnog vida" vidimo da su omjeri prema predviđanju $4, 16, 64, 256, 1024, \ldots$

Eksponencijalna funkcija

Eksponenti omjera pogrešaka su

$$\begin{array}{c|cccccc}
0 & 1.0000 \\
1 & 1.9823 & 1.0000 \\
2 & 1.9955 & 3.9682 & 1.0000 \\
3 & 1.9989 & 3.9920 & 5.9650 & 1.0000 \\
4 & 1.9997 & 3.9980 & 5.9912 & 7.9642 & 1.0000 \\
5 & 1.9999 & 3.9995 & 5.9978 & 7.9910 & 9.9666 & 1.0000
\end{array}$$

pa ponovno čitamo da su eksponenti omjera pogrešaka $2, 4, 6, 8, 10, \ldots$

Funkcija $x^{3/2}$

Funkciji $f(x) = x^{3/2}$ puca druga derivacija u 0, pa bi

- "zanimljivo ponašanje" moralo početi već u drugom stupcu, jer je
- za trapez je funkcija dovoljno glatka za ocjenu pogreške.

Nakon 2^{15} podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo približnu vrijednost

$$I_{15} = 0.4000000000004512$$

$$I = 2/5 = 0.4000000000000000$$

$$I - I_{15} = -0.0000000000004512.$$

Primijetite da je broj intervala poprilično velik!

Funkcija $x^{3/2}$

Što je s omjerima pogrešaka?

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
0 & 1.0000 & & & & & & \\
1 & 3.7346 & 1.0000 & & & & & \\
2 & 3.8154 & 5.4847 & 1.0000 & & & & \\
3 & 3.8721 & 5.5912 & 5.6484 & 1.0000 & & & \\
4 & 3.9112 & 5.6331 & 5.6559 & 5.6566 & 1.0000 & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & \ddots & \\
15 & 3.9981 & 5.6569 & \cdots & & \cdots & 5.6569 & 1.0000
\end{array}
$$

Nakon prvog stupca omjeri pogrešaka su se stabilizirali.

Funkcija $x^{3/2}$

Bit će nam mnogo lakše provjeriti što se događa ako napišemo samo eksponente omjera pogrešaka.

0	1.0000						
1	1.9010	1.0000					
2	1.9318	2.4554	1.0000				
3	1.9531	2.4832	2.4978	1.0000			
4	1.9676	2.4939	2.4998	2.4999	1.0000		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	1.9993	2.5000	$\cdots$		$\cdots$	2.5000	1.0000

Eksponenti omjera pogrešaka od drugog stupca nadalje su za točno 1 veći od eksponenta same funkcije (integriramo!).

Funkcija $\sqrt{x}$

Situacija s funkcijom $f(x) = \sqrt{x}$ mora biti još gora, jer njoj puca prva derivacija u 0.

Nakon 2^{15} podintervala u trapeznoj formuli, ne dobivamo željenu točnost

$$\begin{aligned} I_{15} &= 0.6666666551083763 \\ I &= 2/3 = 0.6666666666666667 \\ I - I_{15} &= 0.0000000115582903. \end{aligned}$$

Funkcija $\sqrt{x}$

Omjeri pogrešaka u tablici su:

0	1.0000						
1	2.6408	1.0000					
2	2.6990	2.8200	1.0000				
3	2.7393	2.8267	2.8281	1.0000			
4	2.7667	2.8281	2.8284	2.8284	1.0000		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	2.8271	2.8284	$\cdots$		$\cdots$	2.8284	1.0000

Funkcija $\sqrt{x}$

Pripadni eksponenti su

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
0 & 1.0000 \\
1 & 1.4010 & 1.0000 \\
2 & 1.4324 & 1.4957 & 1.0000 \\
3 & 1.4538 & 1.4991 & 1.4998 & 1.0000 \\
4 & 1.4681 & 1.4998 & 1.5000 & 1.5000 & 1.0000 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & \ddots \\
15 & 1.4993 & 1.5000 & \cdots & & \cdots & 1.5000 & 1.0000
\end{array}
$$

U posljednja dva primjera, Rombergovom algoritmu se može "pomoći" tako da supstitucijom u integralu dobijemo glatku funkciju.

U oba slučaja, supstitucija je $x = t^2$.

Zadatak

Ako u posljednjem integralu promijenimo granice integracije

$$\int_1^2 \sqrt{x}\, dx$$

što mislite kojoj će se funkciji iz prethodnog primjera najsličnije ponašati omjeri pogrešaka?

Druge oznake

U literaturi postoji i drugačija oznaka za aproksimacije integrala u Rombergovoj tablici

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}.$$

Sama tablica ima oblik

$$\begin{array}{llll} T_0^{(0)} & & & \\ T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & & \\ T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}.$$

Još malo o Rombergovoj tablici

Tvrdnja. Drugi stupac Rombergove tablice odgovara produljenoj Simpsonovoj formuli redom s $2, 4, \ldots$ podintervala.

Nađimo eksplicitnu formulu za $I_n^{(1)}$. Ako trapezna formula ima

- n podintervala, onda je pripadni $h = (b-a)/n$,
- $n/2$ podintervala, onda je pripadni $h_1 = 2(b-a)/n = 2h$.

Iz trapeznih formula za n i $n/2$ podintervala,

$$I_n^{(0)} = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \cdots 2f_{n-1} + f_n)$$

$$I_{n/2}^{(0)} = \frac{h_1}{2}(f_0 + 2f_2 + \cdots 2f_{n-2} + f_n),$$

Još malo o Rombergovoj tablici

uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

$$\begin{aligned} I_n^{(1)} = \frac{4I_n^{(0)} - I_{n/2}^{(0)}}{3} &= \frac{4}{3} \cdot \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\ &\quad - \frac{1}{3} \cdot \frac{h_1}{2}(f_0 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + f_n) \\ &= \frac{2h}{3}(f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\ &\quad - \frac{h}{3}(f_0 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + f_n) \\ &= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n), \end{aligned}$$

što je Simpsonova formula s n podintervala.

Zadatak

Odgovaraju li ostali stupci u Rombergovoj tablici sljedećim Newton–Cotesovim formulama (Simpsonovoj formuli $3/8$, Booleovoj formuli, ...)?

Na sreću, odgovor je ne!

U protivnom, Rombergov algoritam ne bi konvergirao, recimo za funkciju Runge. Za točnost 10^{-12}, ako uspoređujemo "dijagonalni dio" tablice, potrebno je $2^{10} = 1024$ podintervala, a dobiveni rezultat je

$$\begin{aligned} I_{10} &= 2.74680153389003183 \\ I &= 2.74680153389003172 \\ I - I_{10} &= -0.00000000000000011. \end{aligned}$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

$$\int_0^1 \sin(17\pi x)\,dx$$

tako da greška bude manja ili jednaka 10^{-4}.

Podintegralna funkcija je relativno brzo oscilirajuća i ima 17 "grba".

Tablicu ispisujemo samo na prvih par decimala (a računamo u punoj točnosti tipa `extended`).

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Rombergova tablica:

0	0.0000							
1	0.5000	0.6667						
2	0.6036	0.6381	0.6362					
3	0.6284	0.6367	0.6366	0.6366				
4	−0.0063	−0.2177	−0.2746	−0.2891	−0.2927			
5	0.0283	0.0398	0.0598	0.0622	0.0636	0.0640		
6	0.0352	0.0376	0.0374	0.0371	0.0370	0.0370	0.0370	
7	0.0369	0.0375	0.0374	0.0374	0.0374	0.0375	0.0375	0.0375

Rezultat (sa svim znamenkama):

$$I_7 = 0.03744821953512704$$
$$I = 0.03744822190397537$$
$$I - I_7 = 0.0000000023688434.$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

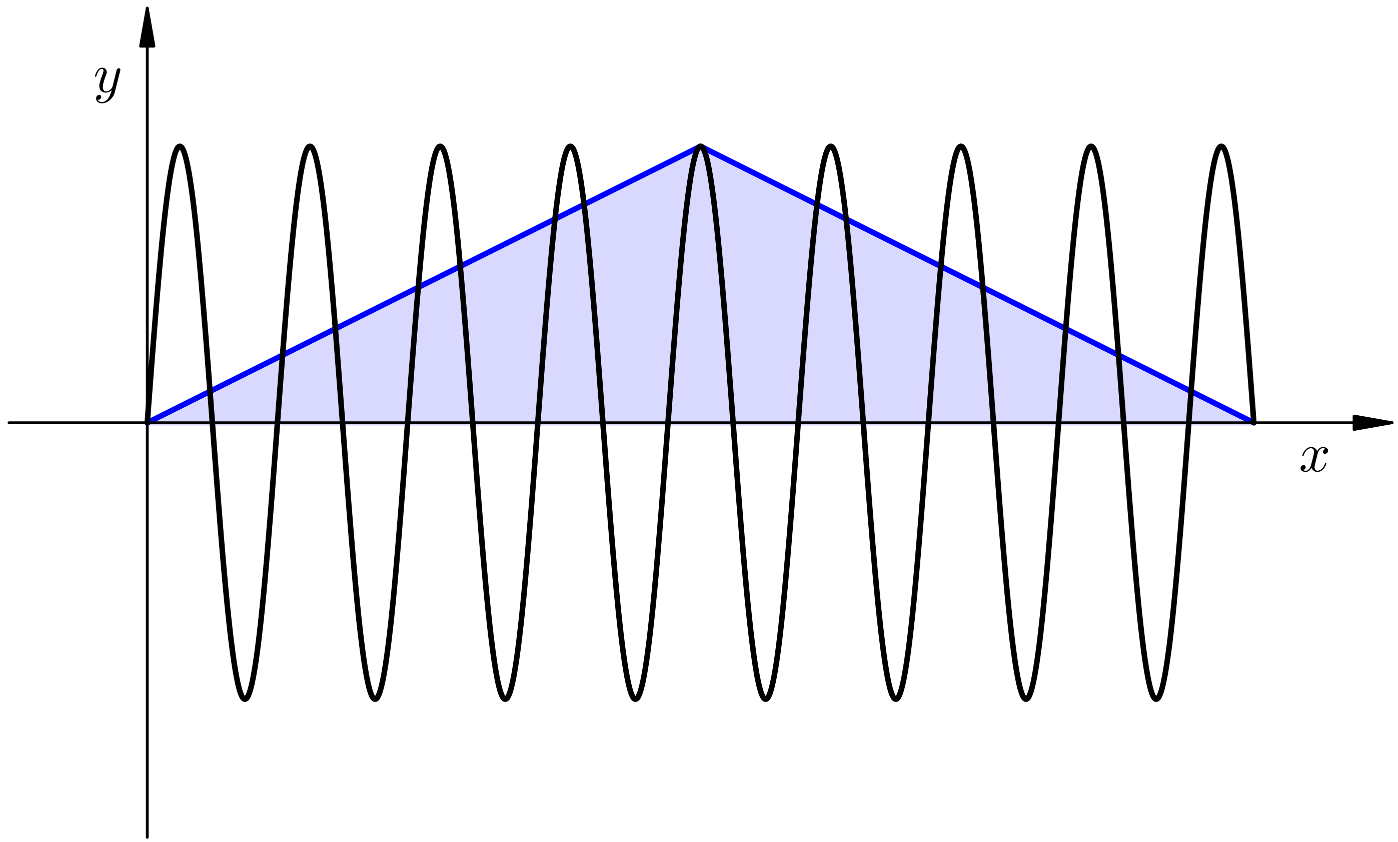
Što je razlog stabilizacije oko jedne, pa oko druge vrijednosti?

- Nedovoljan broj podintervala u trapeznoj formuli, koji ne opisuje dobro ponašanje funkcije.
- Rješenje problema: u svaku "grbu" treba staviti barem nekoliko točaka.

Sljedeće slike nam to zorno i pokazuju. Tek kad smo stavili 16 točaka u trapeznu formulu,

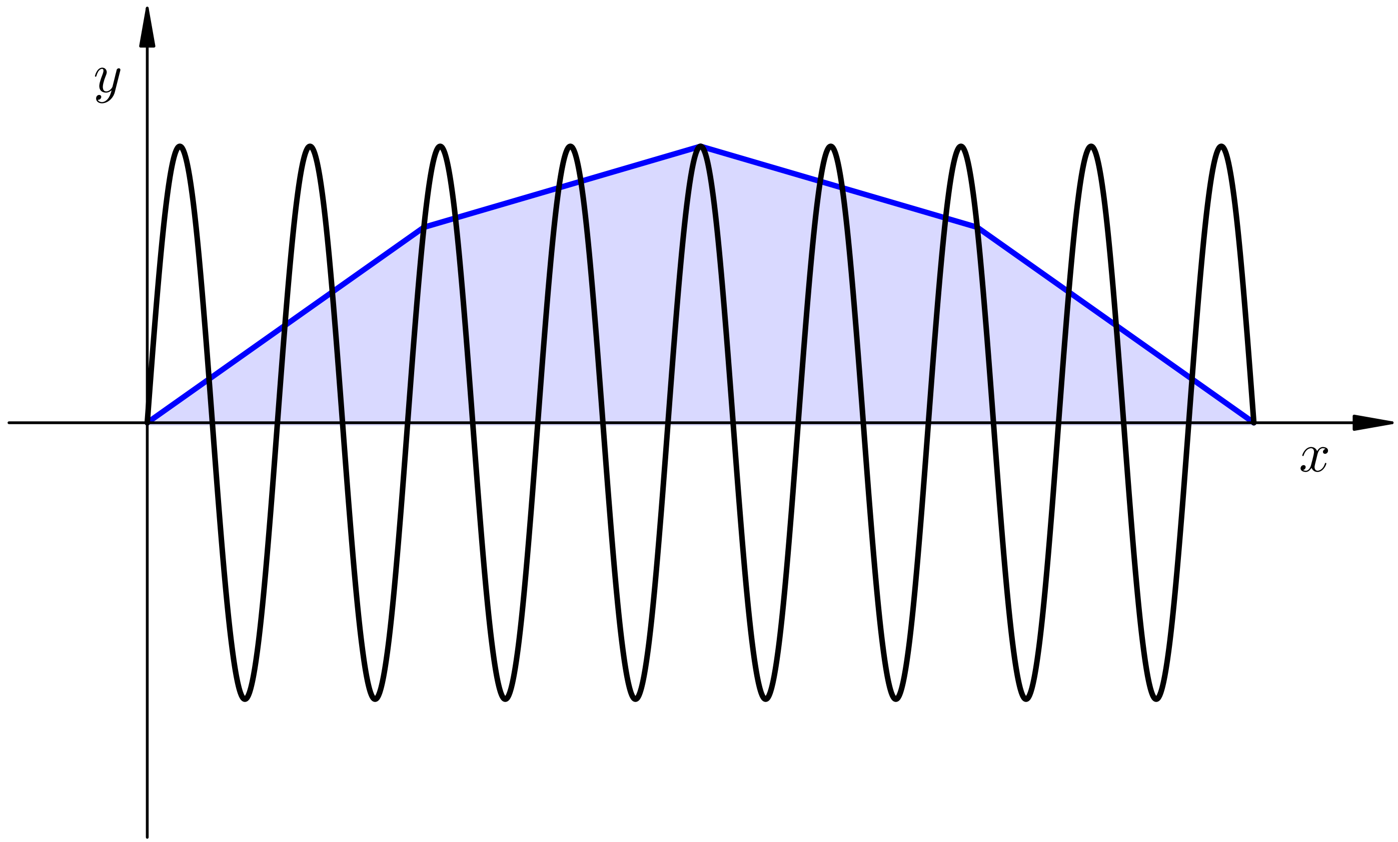
- stavili smo skoro jednu točku po grbi
- i trapezna formula je počela "prepoznavati oblik" podintegralne funkcije.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



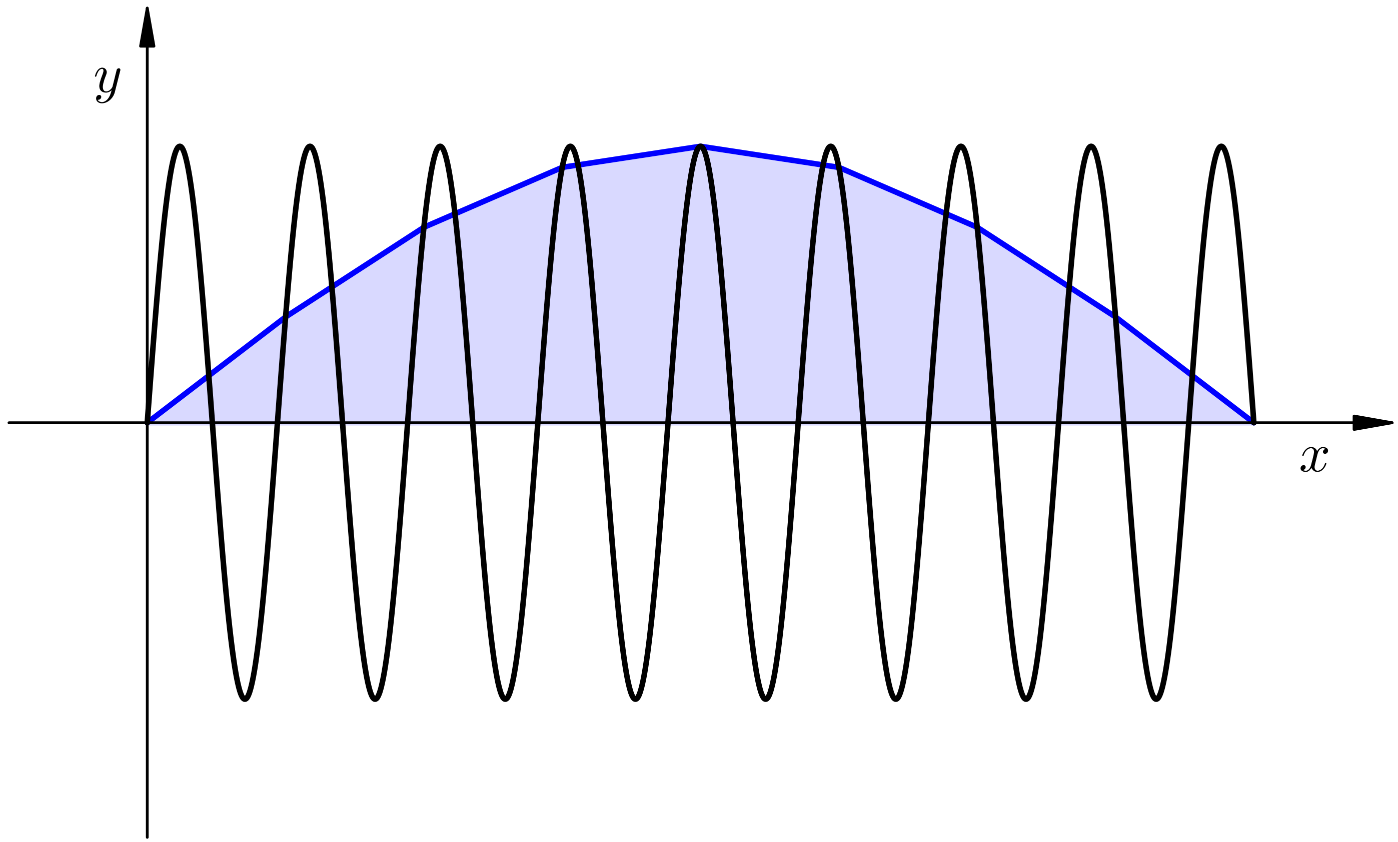
Produljena trapezna formula s 2 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



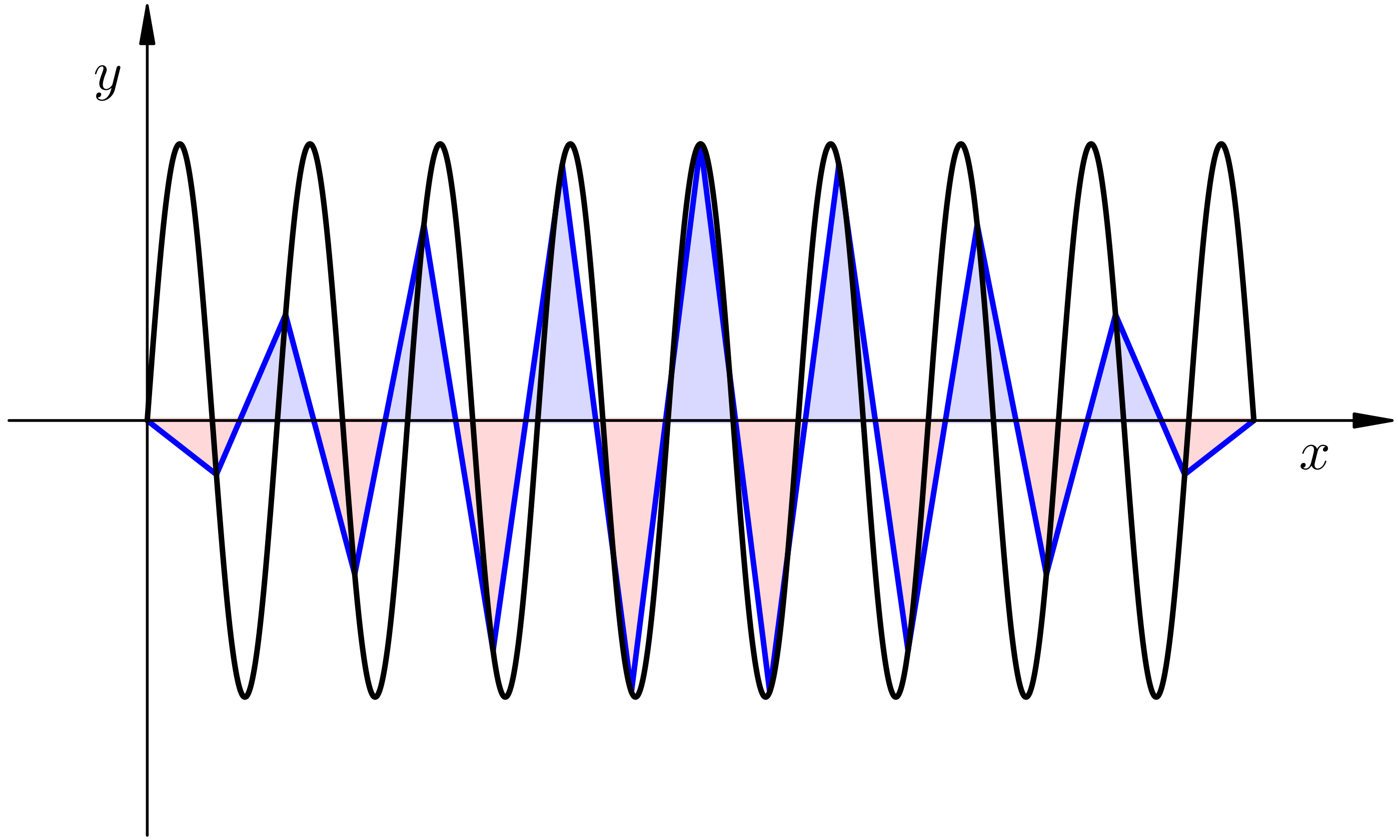
Produljena trapezna formula s 4 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula s 8 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula sa 16 podintervala.

Zadatak

Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

$$\int_0^1 \sin(257\pi x)\,dx$$

tako da greška bude manja ili jednaka 10^{-12}.

Oprez, ako u Rombergovom algoritmu

- ne zahtijevate stavljanje dovoljnog broja podintervala,

dobiveni rezultat bit će pogrešan!

Trapez može biti brži od Romberga

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

$$\int_0^1 e^{\cos(\pi x)} \cos(\pi x)\, dx$$

tako da greška bude manja ili jednaka 10^{-4}.

U ovom primjeru događa se zanimljiv fenomen:

- produljena trapezna formula može brže izračunati točan rezultat nego Rombergov algoritam.

Razlog: “Dobro” ponašanje produljene trapezne formule za periodičke funkcije!

Trapez može biti brži od Romberga

Početni dio Rombergove tablice:

0	1.17520119364380146		
1	0.58760059682190073	0.39173373121460049	
2	0.56516070872910212	0.55768074603150258	0.56874388035262938
3	0.56515910399248505	0.56515856908027936	0.56565709061686448
4	0.56515910399248503	0.56515910399248502	0.56515913965329873
5	0.56515910399248503	0.56515910399248503	0.56515910399248503

Crveno označeni brojevi imaju sve znamenke točne.

Rombergov algoritam daje netočniju aproksimaciju 0.5651591437527359

Trapez može biti brži od Romberga

Sporost Rombergovog algoritma posljedica je činjenice da

- trapezna formula s jednim podintervalom ima veliku grešku.
- Budući da ona ulazi u ekstrapolaciju rezultata na "dijagonali", dijagonalni rezultati su dosta pogrešni.

Stvarno, za produljenu trapeznu formulu ne vrijedi isti razvoj pogreške (puno je točnija)!

Rješenje problema:

- usporedimo susjedne rezultate u stupcima tablice i ako se oni "slože" na odgovarajuću točnost, uzmemo ih kao aproksimaciju.

Teorija integracijskih formula — nastavak

Težinske integracijske formule — sažetak

Do sada smo radili integracijske formule oblika

$$\int_a^b w(x) f(x)\, dx = I_m(f) + E_m(f), \quad I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k f(x_k),$$

(ispuštamo gornje indekse m) u kojima su

- čvorovi integracije $x_0, \ldots, x_m$ bili fiksni — unaprijed zadani,
- a težinske koeficijente $w_0, \ldots, w_m$ određivali smo iz uvjeta egzaktnosti na vektorskom prostoru polinoma $\mathcal{P}_d$ što većeg stupnja d.

Iz teorema o "interpolacijskim" formulama znamo da za polinomni stupanj egzaktnosti d takvih formula vrijedi $d = m$.

Težinske integracijske formule — sažetak

Kod nekih formula (Simpson, srednja točka) dobili smo da je

- za parne m, stvarni stupanj egzaktnosti za jedan veći, tj. vrijedi $d = m + 1$,

iako se težine određuju iz uvjeta egzaktnosti na prostoru $\mathcal{P}_m$.

U nastavku tražimo integracijske formule još višeg stupnja egzaktnosti — za koje vrijedi $d > m$. To znači da

- neki ili svi čvorovi integracije moraju biti "slobodni",
- tako da i njih određujemo iz uvjeta egzaktne integracije.

Iz tradicionalnih razloga, zbog veze s

- ortogonalnim polinomima i njihovim nultočkama,

takve formule se malo drugačije označavaju!

Promjena oznaka za integracijske formule

Promjene u oznakama su:

- čvorovi se broje od 1, a ne od 0,
- broj čvorova označava se s n, umjesto $m + 1$.

Težinska integracijska ili kvadraturna formula onda ima sljedeći oblik:

$$\int_a^b w(x) f(x)\,dx = I_n(f) + E_n(f), \quad I_n(f) = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k).$$

- Broj $n \in \mathbb{N}$ zove se red formule.

Opet ispuštamo gornje indekse n, tj. ne pišemo $w_k^{(n)}$, $x_k^{(n)}$.

Težinska funkcija u integracijskoj formuli

Pretpostavljamo da je težinska funkcija w

- pozitivna (ili barem nenegativna) i integrabilna na $[a, b]$.

Ako je interval $[a, b]$ beskonačan, moramo osigurati da prethodni integral postoji, bar u slučaju kad je

- funkcija f polinom, neovisno o stupnju.

To postižemo zahtjevom da svi momenti težinske funkcije w

$$\mu_k := \int_a^b x^k w(x)\, dx, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

postoje (kao integrali) i da su konačni.

Takve težinske funkcije w zovemo polinomno dopustivima. Nadalje pretpostavljamo da je w takva!

Interpolacijske težinske kvadraturne formule

Uz ove pretpostavke i oznake,

- za bilo kojih n različitih čvorova $x_1, \ldots, x_n$,

težinska integracijska ili kvadraturna formula

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

ima polinomni stupanj egzaktnosti (barem) $d = n - 1$,

- ako i samo ako je interpolacijska,

tj. dobivena je kao

- egzaktni integral interpolacijskog polinoma funkcije f u čvorovima $x_1, \ldots, x_n$.

Težine u interpolacijskim formulama

Ekvivalentno, polinomni stupanj egzaktnosti integracijske formule je (barem) $d = n - 1$, ako i samo ako za težinske koeficijente w_k vrijedi

$$w_k = \int\limits_a^b w(x) \ell_k(x) \, dx, \qquad k = 1, \ldots, n,$$

gdje su ℓ_k, za $k = 1, \ldots, n$, polinomi Lagrangeove baze na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$ (stupanj tih polinoma je sada $n - 1$)

$$\ell_k(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Napomena: Ovo smo već dokazali, samo oznake su nove! ■

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Nameće se prirodno pitanje: može li se postići i bolje, tj.

- možemo li dobiti veći stupanj egzaktnosti, $d > n - 1$?

Uočite: Jedina šansa za to je

- "pažljiviji" izbor čvorova integracije x_k.

Naime, čim je $d \geq n - 1$,

- težine w_k su nužno određene prethodnom formulom,

pa njih više ne možemo "birati".

Odgovor je potvrdan i relativno jednostavan!
Za formulaciju rezultata definiramo tzv. polinom čvorova

$$\omega_n(x) = \prod_{k=1}^{n} (x - x_k).$$

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Teorem. Neka je k zadani cijeli broj takav da je $0 \leq k \leq n$. Težinska integracijska formula

$$\int_a^b w(x)f(x)\,dx = I_n(f) + E_n(f), \quad I_n(f) = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k),$$

ima polinomni stupanj egzaktnosti $d = n - 1 + k$, ako i samo ako je formula interpolacijska i

- polinom čvorova ω_n je ortogonalan na sve polinome $p \in \mathcal{P}_{k-1}$ s težinskom funkcijom w,

$$\int_a^b w(x)\,\omega_n(x)p(x)\,dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{k-1}.$$

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Dokaz. Iz prošlog teorema znamo da za stupanj egzaktnosti vrijedi $d \geq n-1$ ako i samo ako je formula interpolacijska.

- Preostaje pokazati da je $d = n-1+k$ ekvivalentno relaciji ortogonalnosti za polinom ω_n.

1. smjer (nužnost): $d = n-1+k \implies$ ortogonalnost.

Neka je $p \in \mathcal{P}_{k-1}$ bilo koji polinom stupnja najviše $k-1$. Za produkt $f = \omega_n p$ onda vrijedi $\omega_n p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$.

Zbog pretpostavke $d = n-1+k$, integracijska formula egzaktno integrira polinom $f = \omega_n p$, pa je

$$\int_a^b w(x)\,\omega_n(x)p(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} w_k\,\omega_n(x_k)p(x_k).$$

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

No, svi čvorovi x_k su nultočke polinoma čvorova ω_n, tj. vrijedi

$$\omega_n(x_k) = 0, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Onda je

$$\int_a^b w(x)\, \omega_n(x) p(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} w_k\, \omega_n(x_k) p(x_k) = 0,$$

za svaki $p \in \mathcal{P}_{k-1}$, što dokazuje prvi smjer.

2. smjer (dovoljnost): ortogonalnost $\implies$ $d = n - 1 + k$.

Neka je $p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$ bilo koji polinom. Treba pokazati da integracijska formula I_n egzaktno integrira polinom p.

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Prvo podijelimo p s polinomom čvorova ω_n — po Euklidovom teoremu o dijeljenju s ostatkom. Onda je

$$p = q\,\omega_n + r,$$

gdje je $q \in \mathcal{P}_{k-1}$ kvocijent, a $r \in \mathcal{P}_{n-1}$ ostatak.

Egzaktnom integracijom dobivamo

$$\int_a^b w(x)p(x)\,dx = \int_a^b w(x)q(x)\,\omega_n(x)\,dx + \int_a^b w(x)r(x)\,dx.$$

Zbog $q \in \mathcal{P}_{k-1}$ i pretpostavke ortogonalnosti

- prvi integral na desnoj strani je nula.

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Dobivamo da je

$$\int_a^b w(x)p(x)\,dx = \int_a^b w(x)r(x)\,dx.$$

No, zbog $r \in \mathcal{P}_{n-1}$ i pretpostavke da je formula interpolacijska,

- formula I_n egzaktno integrira polinom r.

Zato je

$$\int_a^b w(x)r(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} w_k r(x_k).$$

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Sad uvrstimo $r = p - q\,\omega_n$. Dobivamo redom

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n} w_k r(x_k) &= \sum_{k=1}^{n} w_k \big(p(x_k) - q(x_k)\,\omega_n(x_k)\big) \\ &= \{\text{ znamo } \omega_n(x_k) = 0, \text{ za } k = 1, \ldots, n \;\} \\ &= \sum_{k=1}^{n} w_k p(x_k).\end{aligned}$$

Kad "spojimo" zadnje tri relacije, izlazi

$$\int_a^b w(x)p(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} w_k p(x_k) = I_n(p),$$

pa formula I_n egzaktno integrira sve polinome $p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$. ∎

O granicama za stupanj egzaktnosti

Nekoliko komentara na prethodni rezultat.

Relacija ortogonalnosti

$$\int_a^b w(x)\,\omega_n(x)p(x)\,dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{k-1},$$

omogućava povećanje stupnja egzaktnosti formule za k,

- s $d = n - 1$,
- na $d = n - 1 + k$.

Ograničenje $0 \leq k \leq n$ u teoremu je prirodno i nužno!

Naime, relacija ortogonalnosti postavlja

- točno k dodatnih uvjeta na čvorove $x_1, \ldots, x_n$.

O granicama za stupanj egzaktnosti

Za $k = 0$ — nema dodatnih ograničenja, jer za bilo koji izbor čvorova možemo dobiti $d = n - 1$ (interpolacijska formula).

S druge strane, zbog nenegativnosti težnske funkcije w, mora biti $k \leq n$. Opravdanje:

- Polinom čvorova ω_n mora biti ortogonalan na sve polinome iz $\mathcal{P}_{k-1}$, tj. na polinome stupnja najviše $k - 1$.
- Za $k > n$, polinom ω_n bi trebao biti ortogonalan na sve polinome iz $\mathcal{P}_n$, a to znači i na samog sebe, što je nemoguće!

Dakle, $k = n$ je maksimalno povećanje stupnja egzaktnosti koje se može postići, a

- maksimalni stupanj egzaktnosti je $d_{\max} = 2n - 1$.

Gaussove integracijske formule — $d = 2n - 1$

Integracijske ili kvadraturne formule maksimalnog stupnja egzaktnosti $d = 2n - 1$ zovu se

- Gaussove ili Gauss–Christofellove formule.

Relacija ortogonalnosti iz prethodnog teorema za $k = n$ glasi

$$\int_a^b w(x)\,\omega_n(x)p(x)\,dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{n-1}.$$

Drugim riječima, polinom čvorova ω_n (stupnja n)

- mora biti ortogonalan na sve polinome nižeg stupnja — do najviše $n - 1$.

No, to isto svojstvo zadovoljava i odgovarajući ortogonalni polinom p_n, stupnja n, s težinskom funkcijom w na $[a, b]$.

Čvorovi u Gaussovim formulama

Znamo da je p_n jednoznačno određen, do na multiplikativnu konstantu.

Ako za p_n uzmemo da ima vodeći koeficijent $A_n = 1$, onda je

$$\omega_n = p_n, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Zato se formule najvišeg stupnja egzaktnosti obično zovu

- Gaussove formule s težinskom funkcijom w na $[a, b]$.

U Gaussovim formulama, čvorovi x_k su potpuno određeni kao sve nultočke polinoma p_n,

$$p_n(x_k) = 0, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Sjetite se, te nultočke su realne, jednostruke i leže u otvorenom intervalu (a, b).

Težine u Gaussovim formulama

Za težine w_k znamo da vrijedi

$$w_k = \int_a^b w(x)\ell_k(x)\,dx, \quad k = 1, \ldots, n,$$

gdje su ℓ_k, za $k = 1, \ldots, n$, polinomi Lagrangeove baze na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$ (stupanj od ℓ_k je $n - 1$).

Kod Lagrangeove interpolacije pokazali smo da polinome ℓ_k možemo izraziti preko polinoma čvorova $\omega_n = p_n$ (ranije ω), u obliku

$$\ell_k(x) = \frac{p_n(x)}{(x - x_k)\,p_n'(x_k)}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Uočite da multiplikativna konstanta u p_n nije bitna — skrati se, pa možemo uzeti bilo koju normalizaciju za polinome p_n.

Težine u Gaussovim formulama

Dobivamo izraz za težine w_k preko ortogonalnih polinoma p_n

$$w_k = \int\limits_a^b w(x) \, \frac{p_n(x)}{(x - x_k) \, p_n'(x_k)} \, dx, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Ova formula se rijetko koristi za stvarno računanje težina. Prema autoru formule, težine w_k u Gaussovim formulama ponekad se zovu i Christofellovi brojevi.

O ostalim svojstvima Gaussovih formula — malo kasnije.

Prvo, spomenimo još dva tipa integracijskih formula koje se koriste u praksi, a imaju

- visoki, ali ne i maksimalni stupanj egzaktnosti, tj. $k < n$.

Integracijske formule s fiksnim rubovima

Prethodni teorem ima praktične primjene i za $k < n$.
U težinskoj integracijskoj ili kvadraturnoj formuli

$$\int_a^b w(x) f(x)\,dx = I_n(f) + E_n(f), \quad I_n(f) = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k).$$

unaprijed zadamo $n - k$ čvorova integracije u $[a, b]$, a

- preostalih k čvorova određujemo tako da dobijemo maksimalni mogući stupanj egzaktnosti $d = n - 1 + k$.

Ovaj pristup se najčešće koristi za $k = n - 1$ i $k = n - 2$, a zadani čvorovi su

- jedan ili oba ruba intervala integracije $[a, b]$,

s tim da zadani rubni čvor mora biti konačan.

Gauss–Radau formule — jedan rub, $d = 2n - 2$

Neka je lijevi rub intervala — točka a konačna

- i zadana kao čvor integracije $x_1 = a$.

Preostalih $k = n - 1$ čvorova određujemo tako da

- dobijemo maksimalni stupanj egzaktnosti $d = 2n - 2$.

Ove integracijske formule zovu se Gauss–Radau formule.

Prema prethodnom teoremu, pripadni polinom čvorova

$$\omega_n(x) = (x - a)(x - x_2) \cdots (x - x_n) =: (x - a)\, p_{n-1}(x)$$

mora zadovoljavati relaciju ortogonalnosti za $k = n - 1$

$$\int\limits_a^b w(x)\, \omega_n(x) p(x)\, dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{n-2}.$$

Gauss–Radau formule — jedan rub, $d = 2n - 2$

To možemo zapisati i ovako

$$\int_a^b w(x)\,(x-a)\,p_{n-1}(x)p(x)\,dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{n-2}.$$

Faktor $(x-a)$, koji odgovara fiksnom čvoru $x_1 = a$, ima fiksni predznak na $[a,b]$ — nenegativan je. Zato ga smijemo

- "izvaditi" iz polinoma čvorova ω_n
- i "dodati" težinskoj funkciji w.

Tako dobivamo "novu" težinsku funkciju

$$w_a(x) := (x-a)\,w(x),$$

koja je, također, nenegativna na $[a,b]$.

Gauss–Radau formule — jedan rub, $d = 2n-2$

Relacija ortogonalnosti sada ima oblik

$$\int_a^b w_a(x)\, p_{n-1}(x) p(x)\, dx = 0, \quad \text{za svaki} \quad p \in \mathcal{P}_{n-2},$$

gdje je p_{n-1} polinom stupnja $n-1$.

Slično ranijem, odavde dobivamo sljedeći zaključak:

- preostalih $n-1$ čvorova $x_2, \ldots, x_n$ moraju biti nultočke ortogonalnog polinoma p_{n-1} s težinskom funkcijom w_a.

Potpuno isti princip radi i za desni rub b, s faktorom $b-x$.

Ako fiksiramo $x_n = b$, preostali čvorovi $x_1, \ldots, x_{n-1}$ moraju biti nultočke ortogonalnog polinoma p_{n-1} s težinskom funkcijom $w_b(x) := (b-x)\, w(x)$.

Gauss–Lobatto formule — oba ruba, $d = 2n - 3$

Neka su oba ruba intervala — točke a i b konačne

- i zadane kao čvorovi integracije $x_1 = a$, $x_n = b$.

Preostala $k = n - 2$ čvora određujemo tako da

- dobijemo maksimalni stupanj egzaktnosti $d = 2n - 3$.

Ove integracijske formule zovu se Gauss–Lobatto formule.

Na potpuno isti način se dokazuje da

- preostala $n - 2$ čvora $x_2, \ldots, x_{n-1}$ moraju biti nultočke ortogonalnog polinoma p_{n-2} s težinskom funkcijom $w_{a,b}$,

$$w_{a,b}(x) := (x - a)(b - x)\, w(x).$$

Napomena: ovo "transformiranje" težinske funkcije radi samo za čvorove u rubovima intervala (nenegativnost).

Primjer za težinske formule

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Primjer. Napravimo usporedbu

- zatvorene Newton–Cotesove formule i
- Gaussove formule

s 2 čvora, za težinsku funkciju $w(x) = x^{-1/2}$ na intervalu $[0, 1]$.

Integracijske formule glase:

$$\int_0^1 x^{-1/2} f(x)\, dx \approx \begin{cases} w_1^{NC} f(0) + w_2^{NC} f(1) & \text{(Newton–Cotes)}, \\[2ex] w_1^{G} f(x_1) + w_2^{G} f(x_2) & \text{(Gauss)}. \end{cases}$$

Težinska Newton–Cotesova formula

U slučaju Newton–Cotesovih formula, težine možemo izračunati iz

$$w_k = \int_a^b w(x)\ell_k(x)\,dx, \quad k = 1, 2.$$

Lagrangeova baza ℓ_1 i ℓ_2 jednaka je

$$\ell_1(x) = \frac{x-1}{0-1} = -x+1,$$

$$\ell_2(x) = \frac{x-0}{1-0} = x,$$

Težinska Newton–Cotesova formula

pa imamo

$$
\begin{aligned}
w_1^{NC} &= \int_0^1 x^{-1/2}\ell_1(x)\,dx = \int_0^1 (x^{-1/2} - x^{1/2})\,dx \\
&= \left(2x^{1/2} - \frac{2}{3}x^{3/2}\right)\Big|_0^1 = \frac{4}{3},
\end{aligned}
$$

$$
w_2^{NC} = \int_0^1 x^{-1/2}\ell_2(x)\,dx = \int_0^1 x^{1/2}\,dx = \frac{2}{3}x^{3/2}\Big|_0^1 = \frac{2}{3}.
$$

Težinska Newton–Cotesova formula

Tražena zatvorena Newton–Cotesova formula glasi:

$$\int_0^1 x^{-1/2} f(x)\,dx = \frac{4}{3} f(0) + \frac{2}{3} f(1) + E_2^{NC}(f),$$

pri čemu je $E_2^{NC}(f)$ pripadna greška.

Uočite da korijenski singularitet u nuli uzrokuje da

- vrijednost $f(0)$ dobiva dvostruko veću težinu od vrijednosti $f(1)$.

Gaussova formula

Gaussovu formulu najlakše je odrediti preko ortogonalnih polinoma. Treba nam normalizirani ortogonalni polinom p_2, stupnja 2, s težinom $x^{-1/2}$ na $[0,1]$

$$p_2(x) = x^2 + a_1 x + a_0.$$

Taj polinom mora biti ortogonalan na polinome nižeg stupnja:

- za polinom 1 dobivamo:

$$0 = \int_0^1 x^{-1/2} p_2(x)\,dx = \int_0^1 (x^{3/2} + a_1 x^{1/2} + a_0 x^{-1/2})\,dx$$

$$= \left(\frac{2}{5}x^{5/2} + \frac{2a_1}{3}x^{3/2} + 2a_0 x^{1/2}\right)\Big|_0^1 = \frac{2}{5} + \frac{2}{3}a_1 + 2a_0,$$

Gaussova formula

- za polinom x izlazi:

$$0 = \int_0^1 x^{-1/2} x \, p_2(x) \, dx = \int_0^1 (x^{5/2} + a_1 x^{3/2} + a_0 x^{1/2}) \, dx$$

$$= \left(\frac{2}{7} x^{7/2} + \frac{2a_1}{5} x^{5/2} + \frac{2}{3} a_0 x^{3/2} \right) \Bigg|_0^1 = \frac{2}{7} + \frac{2}{5} a_1 + \frac{2a_0}{3}.$$

Sustav za koeficijente je:

$$\frac{2}{3} a_1 + 2a_0 = -\frac{2}{5}$$

$$\frac{2}{5} a_1 + \frac{2}{3} a_0 = -\frac{2}{7}.$$

Gaussova formula

Rješenje tog sustava je

$$a_1 = -\frac{6}{7}, \quad a_0 = \frac{3}{35},$$

pa je ortogonalni polinom p_2

$$p_2(x) = x^2 - \frac{6}{7}x + \frac{3}{35}.$$

Čvorovi za Gaussovu integracijsku formulu su nultočke polinoma p_2:

$$x_1 = \frac{1}{7}\left(3 - 2\sqrt{\frac{6}{5}}\right) \approx 0.11558710999704793517,$$

$$x_2 = \frac{1}{7}\left(3 + 2\sqrt{\frac{6}{5}}\right) \approx 0.74155574714580920769.$$

Gaussova formula

Za računanje težinskih koeficijenata w_1^G i w_2^G, mogli bismo iskoristiti formulu za w_k kao kod Newton–Cotesove formule.

Međutim, kad imamo čvorove x_1 i x_2 puno je lakše iskoristiti da Gaussova formula egzaktno integrira bazu polinoma

- stupnja 0, pa stavljamo $f(x) = 1$ i dobivamo jednadžbu

$$w_1^G + w_2^G = \int_0^1 x^{-1/2}\, dx = 2,$$

- i stupnja 1, pa stavljamo $f(x) = x$ i dobivamo jednadžbu

$$x_1 w_1^G + x_2 w_2^G = \int_0^1 x^{-1/2}\, x\, dx = \frac{2}{3}.$$

Gaussova formula

Rješenje prethodne dvije jednadžbe je

$$w_1^G = 1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}} \approx 1.304290309725092285 25,$$

$$w_2^G = 1 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}} \approx 0.69570969027490771475.$$

Sada je težina

- w_1^G približno 1.87476 puta veća od težine w_2^G.

Gaussova formula

Tražena Gaussova formula glasi:

$$\int_0^1 x^{-1/2} f(x)\,dx = \left(1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}\right) \cdot f\left(\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}\right) + \left(1 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}\right) \cdot f\left(\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}\right) + E_2^G(f),$$

pri čemu je $E_2^G(f)$ pripadna greška.

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Usporedimo prethodne dvije formule na integralu

$$I = \int_0^1 x^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx = 2C(1) \approx 1.55978680075364565895,$$

pri čemu C označava Fresnelov kosinusni integral.
Aproksimacije po obje formule formule su:

$$I_{NC} = \frac{4}{3} \approx 1.33333333333333333333,$$
$$I_G \approx 1.55758955959339386882,$$

a pripadne greške

$$E_{NC} \approx 0.2264535, \qquad E_G \approx 0.0021972,$$

što pokazuje da je Gaussova formula puno bolja.