

Numerička matematika

12. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.hr/~singer`

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Numerička integracija (nastavak):
 - Osnovna svojstva Gaussovih formula.
 - Gaussove formule i Hermiteova interpolacija.
 - Računanje čvorova i težina Gaussovih formula.
 - Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula.
- Rješavanje nelinearnih jednažbi:
 - Općenito o iterativnim metodama.
 - Brzina konvergencije i pojam reda konvergencije.
 - Metoda raspolavljanja — bisekcije.

Informacije — kolokvij, rok za zadaće

Službeni termin drugog kolokvija je:

- utorak, 7. 6., u 12 sati.

Rok za predaju zadaća je

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

Napomene:

- mene i prof. Grubišića nema od 13. do 17. lipnja.
- Zato, obavite upise ocjena prije toga.

Informacije — provjera zadaća

Bitno: Sve dosadašnje **domaće zadaće** su “**re-evaluirane**”,

● tj. **iznova** provjerene i bodovane!

Zato pažljivo pogledajte **trenutno** stanje **bodova**.

● Može se desiti da **sad** imate **manje bodova** nego prije.

Imali smo “**bug**” u automatskoj provjeri zadaća, pa su nekima

● bila **prihvaćena** i **pogrešna** rješenja, kao da su **ispravna**.

Isprika svima — ali programe pišu **ljudi** ...

Informacije — riješeni zadaci ...

Novost. Na **mojoj** i **službenoj** web stranici možete naći

- **riješene** zadatke iz **neprekidnih najmanjih kvadrata** (pdf format).

Tamo ima **6** zadataka s detaljnim rješenjima, a neki zadaci imaju i **dva** rješenja.

Neprekidni najmanji kvadrati se

- **detaljno** rade na **predavanjima**, skupa sa zadacima, a ovo je dodatak za **vježbanje**.

Vježbe, kao i inače, prelaze

- na **numeričku integraciju**, pa na **rješavanje jednadžbi**, tako da se sve “uredno stigne” do kraja.

Informacije

Konzultacije (službeno):

🕒 petak, 12–14 sati, ili — po dogovoru.

Ne zaboravite, “žive” su i **domaće zadaće** na adresi

<http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php>

ili, izravno

<http://degiorgi.math.hr/nm/>

Dodatni bodovi “čekaju na vas”.

Informacije

Moja web stranica za **Numeričku matematiku** je

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

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

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 **tri demonstratora**:

- **Anastasia Kruchinina** — termin: **srijeda, 18–20**.
- **Ines Marušić** — termin: **srijeda, 14–16**, uz prethodnu najavu mailom,
- **Melkior Ornik** — termin: **četvrtak, 10–12**.

Demosi lijepo **mole** da im se **najavite** mailom koji dan ranije!

- Njihove mail adrese nađete na **oglasnoj ploči**,
- ili se javite meni.

Gaussove integracijske formule

Gaussove integracijske formule — ponavljanje

Gaussova integracijska ili kvadratura formula s težinskom funkcijom w na intervalu $[a, b]$ ima oblik

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

i dostiže **maksimalni** stupanj egzaktnosti $d_{\max} = 2n - 1$.

● Čvorovi x_k su sve **nultočke** ortogonalnog polinoma p_n s težinskom funkcijom w na $[a, b]$,

● Težine w_k su dane formulom

$$w_k = \int_a^b w(x) \frac{p_n(x)}{(x - x_k) p'_n(x_k)} dx, \quad k = 1, \dots, n.$$

Čvorovi Gaussovih integracijskih formula

U nastavku, detaljnije analiziramo neka bitna svojstva Gaussovih formula. Samo radi jednostavnosti, dodatno pretpostavljamo da je težinska funkcija w

- pozitivna na cijelom intervalu $[a, b]$, osim eventualno u konačno mnogo točaka (singulariteti dozvoljeni).

Teorem (Svojstva čvorova). Svi čvorovi x_k su realni, različiti i leže unutar otvorenog intervala $[a, b]$.

Dokaz. Znamo da su čvorovi x_k sve nultočke odgovarajućeg ortogonalnog polinoma p_n s težinskom funkcijom w na $[a, b]$,

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

Sve tvrdnje o čvorovima direktna su posljedica tvrdnji o nultočkama odgovarajućih ortogonalnih polinoma. ■

Pozitivnost težina u Gaussovim formulama

Teorem (Pozitivnost težina). Sve težine w_k su **pozitivne**.

Dokaz. Neka su l_j , za $j = 1, \dots, n$, polinomi **Lagrangeove** baze na mreži čvorova x_1, \dots, x_n (stupanj od l_j je $n - 1$).

Za polinom l_j u **čvoru** x_k vrijedi

$$l_j(x_k) = \delta_{j,k} = \begin{cases} 0, & \text{za } j \neq k, \\ 1, & \text{za } j = k. \end{cases}$$

Uočite da **ista** relacija vrijedi i za **kvadrate** l_j^2 polinoma Lagrangeove baze u **čvorovima** x_k

$$l_j^2(x_k) = l_j(x_k) = \delta_{j,k} = \begin{cases} 0, & \text{za } j \neq k, \\ 1, & \text{za } j = k. \end{cases}$$

Pozitivnost težina u Gaussovima formulama

Onda je očito da vrijedi

$$w_j = \sum_{k=1}^n w_k \ell_j(x_k) = \sum_{k=1}^n w_k \ell_j^2(x_k), \quad j = 1, \dots, n.$$

No, polinomi ℓ_j^2 imaju stupanj $2n - 2$, pa ih Gaussova formula integrira **egzaktno!** To znači da je

$$w_j = \sum_{k=1}^n w_k \ell_j^2(x_k) = \int_a^b w(x) \ell_j^2(x) dx > 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

zbog **pozitivnosti** podintegralne funkcije na **desnoj** strani.

Time je dokazana **pozitivnost** težina w_k u Gaussovima integracijskim formulama. ■

Pozitivnost težina u formulama s $d = 2n - 2$

Potpuno isti argument **vrijedi** i za

- integracijske formule stupnja egzaktnosti $2n - 2$,
(za **jedan** manjeg nego u **Gaussovima** formulama),
- jer **egzaktno** integriraju polinome ℓ_k^2 , za $k = 1, \dots, n$.

Na primjer,

- težine u **Gauss–Radau** formulama su, također, **pozitivne**.

Integralne relacije za težine — uz $d \geq 2n - 2$

Prema ranijem teoremu, u svim **interpolacijskim** kvadraturnim formulama, za **težine** w_k vrijedi

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

Iz dokaza **pozitivnosti** težina odmah dobivamo i “**proširenu**” relaciju

$$w_k = \int_a^b w(x) \ell_k(x) dx = \int_a^b w(x) \ell_k^2(x) dx > 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Opet, to vrijedi za **težine** w_k u **Gaussovima** formulama ($d = 2n - 1$) i formulama stupnja egzaktnosti $d = 2n - 2$.

Konvergenција Gaussovih formula

Tvrdnja. Ako je $[a, b]$ konačni interval, tada Gaussova formula konvergira za bilo koju neprekidnu funkciju f , tj. za $f \in C[a, b]$ vrijedi

$$E_n(f) \rightarrow 0, \quad \text{za } n \rightarrow \infty.$$

Dokaz se temelji na Weierstrassovom teoremu o uniformnoj aproksimaciji polinomima, koji kaže:

Ako je $\hat{p}_{2n-1}(f; \cdot)$ polinom stupnja $2n - 1$ koji najbolje uniformno aproksimira f na $[a, b]$, onda vrijedi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f(\cdot) - \hat{p}_{2n-1}(f; \cdot)\|_{\infty} = 0.$$

Za bilo koji $n \in \mathbb{N}$, gledamo grešku Gaussove formule reda n .

Konvergenција Gaussovih formula

Budući da je $E_n(\hat{p}_{2n-1}) = 0$ (zbog polinomnog **stupnja** **egzaktnosti** $d = 2n - 1$), slijedi

$$\begin{aligned} |E_n(f)| &= |E_n(f - \hat{p}_{2n-1})| \\ &= \left| \int_a^b w(x) (f(x) - \hat{p}_{2n-1}(x)) dx - \sum_{k=1}^n w_k (f(x_k) - \hat{p}_{2n-1}(f; x_k)) \right| \\ &\leq \int_a^b w(x) |f(x) - \hat{p}_{2n-1}(x)| dx + \sum_{k=1}^n |w_k| |f(x_k) - \hat{p}_{2n-1}(f; x_k)| \\ &\leq \|f(\cdot) - \hat{p}_{2n-1}(f; \cdot)\|_\infty \left(\int_a^b w(x) dx + \sum_{k=1}^n |w_k| \right). \end{aligned}$$

Konvergenција Gaussovih formula

Sad iskoristimo da su težinski koeficijenti w_k pozitivni, tj. da je $|w_k| = w_k$, u Gaussovim formulama, pa je

$$\sum_{k=1}^n |w_k| = \sum_{k=1}^n w_k.$$

Na kraju, uočimo još da je

$$\sum_{k=1}^n w_k = \int_a^b w(x) dx = \mu_0.$$

Iz prethodne formule za ocjenu greške $|E_n(f)|$ zaključujemo

$$|E_n(f)| \leq 2\mu_0 \|f(\cdot) - \hat{p}_{2n-1}(f; \cdot)\|_\infty \rightarrow 0, \quad \text{za } n \rightarrow \infty,$$

što je trebalo dokazati. ■

Ne vrijedi za Newton–Cotesove formule

Ovaj zaključak **ne vrijedi** za Newton–Cotesove formule,

● iako formula s n čvorova **egzaktno** integrira polinom \hat{p}_{n-1} .

Naime, za malo veće n , **težine** w_k mogu biti i **negativne**. Tada još uvijek vrijedi

$$\sum_{k=1}^n w_k = \int_a^b w(x) dx = \mu_0,$$

zbog **egzaktne** integracije **konstante** $f(x) = 1$. Međutim, **apsolutne** vrijednosti **težina neograničeno** rastu, kad n raste, tako da

$$\sum_{k=1}^n |w_k| \rightarrow \infty, \quad \text{za } n \rightarrow \infty,$$

a upravo **ova** suma ulazi u ocjenu **greške**.

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Integracija i interpolacija — ponavljanje

Vidjeli smo da se **Newton–Cotesove** formule mogu dobiti

- integracijom **Lagrangeovog** interpolacijskog polinoma za funkciju f na (zadanoj) mreži čvorova x_1, \dots, x_n .

Tu činjenicu smo onda iskoristili za

- nalaženje i ocjenu **greške** integracijske formule.

Na sličan način, i **Gaussove** formule mogu se dobiti

- integracijom **Hermiteovog** interpolacijskog polinoma za funkciju f na mreži čvorova x_1, \dots, x_n ,
- uz **dodatni** zahtjev da **koeficijenti** uz članove s **derivacijama** budu jednaki **nula** — to će **odrediti** čvorove.

Nakon dokaza, to ćemo iskoristiti za nalaženje **greške** **Gaussove** integracije.

Hermiteova interpolacija — ponavljanje

Hermiteov interpolacijski polinom za funkciju f na mreži čvorova x_1, \dots, x_n ,

- interpolira vrijednosti **funkcije** i njezine **derivacije** u čvorovima ($2n$ uvjeta),

pa, općenito, ima **stupanj** $2n - 1$.

To odgovara stupnju **egzaktnosti** $d = 2n - 1$ za **Gaussove** formule, pa cijeli pristup ima smisla.

Za početak, **ponovimo** osnovne činjenice o **Hermiteovoj** interpolaciji,

- s **promijenjenim** oznakama, jer čvorove sad brojimo od 1 , a ne od 0 .

Hermiteova interpolacija — ponavljanje

Neka su x_1, \dots, x_n međusobno različite točke. Ove točke interpretiramo kao

• dvostruke čvorove interpolacije za zadanu funkciju f .

Uvedimo još skraćene oznake za vrijednosti funkcije f i njezine derivacije f' u čvorovima:

$$f_k := f(x_k), \quad f'_k = f'(x_k), \quad k = 1, \dots, n.$$

Raniji rezultat o Hermiteovoj interpolaciji sada ima oblik:

Teorem. Postoji jedinstveni polinom $h_{2n-1} \in \mathcal{P}_{2n-1}$, stupnja najviše $2n - 1$, koji zadovoljava interpolacijske uvjete

$$h_{2n-1}(x_k) = f_k, \quad h'_{2n-1}(x_k) = f'_k, \quad k = 1, \dots, n.$$



Hermiteova interpolacija — ponavljanje

Ovaj polinom h_{2n-1} možemo prikazati u tzv. **Hermiteovoj** bazi na mreži čvorova x_1, \dots, x_n , kao linearnu kombinaciju

$$h_{2n-1}(x) = \sum_{k=1}^n (f_k h_{k,0}(x) + f'_k h_{k,1}(x)),$$

gdje su $h_{k,0}$ i $h_{k,1}$, za $k = 1, \dots, n$, polinomi **Hermiteove** baze definirani relacijama

$$h_{k,0}(x_j) = \begin{cases} 0, & \text{za } j \neq k, \\ 1, & \text{za } j = k, \end{cases} \quad h'_{k,0}(x_j) = 0,$$

$$h_{k,1}(x_j) = 0, \quad h'_{k,1}(x_j) = \begin{cases} 0, & \text{za } j \neq k, \\ 1, & \text{za } j = k. \end{cases}$$

Hermiteova interpolacija — ponavljanje

Polinome **Hermiteove** baze možemo eksplicitno izraziti u obliku

$$h_{k,0}(x) = [1 - 2(x - x_k)l'_k(x_k)] l_k^2(x)$$

$$h_{k,1}(x) = (x - x_k) l_k^2(x),$$

gdje je l_k odgovarajući polinom **Lagrangeove** baze na mreži čvorova x_1, \dots, x_n , za $k = 1, \dots, n$.

Budući da je l_k polinom stupnja $n - 1$, onda

• su $h_{k,0}$ i $h_{k,1}$ polinomi stupnja $2n - 1$.

Ako su točke x_1, \dots, x_n međusobno **različite**, onda su polinomi

• l_k , za $k = 1, \dots, n$, — **baza** u prostoru \mathcal{P}_{n-1} ,

• $h_{k,0}, h_{k,1}$, za $k = 1, \dots, n$, — **baza** u prostoru \mathcal{P}_{2n-1} .

Greška Hermiteove interpolacije — ponavljanje

Za funkciju **greške** Hermiteove interpolacije

$$e_h(x) := f(x) - h_{2n-1}(x)$$

u svakom čvoru x_k , očito, vrijedi

$$e_h(x_k) = 0, \quad e'_h(x_k) = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Dakle, **greška** e_h ima **dvostruke** nultočke u točkama x_1, \dots, x_n .

Pripadni **polinom čvorova** ω_h za **Hermiteovu** interpolaciju je

$$\omega_h(x) = (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 = \omega_n^2(x),$$

gdje je ω_n polinom čvorova za **Lagrangeovu** interpolaciju na istoj mreži.

U novim oznakama, za **grešku** vrijedi sljedeći rezultat.

Greška Hermiteove interpolacije — ponavljanje

Teorem. Neka su $x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ međusobno različite točke i pretpostavimo da je $f \in C^{2n}[a, b]$.

Nadalje, neka je e_h greška Hermiteovog interpolacijskog polinoma h_{2n-1} za funkciju f na mreži čvorova x_1, \dots, x_n .

Za svaku točku $x \in [a, b]$, postoji točka $\xi \in [a, b]$, takva da je

$$e_h(x) = f(x) - h_{2n-1}(x) = \omega_n^2(x) \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}.$$

Znamo da za ξ vrijedi i jača ocjena $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$, gdje je

$$x_{\min} := \min\{x, x_1, \dots, x_n\}, \quad x_{\max} := \max\{x, x_1, \dots, x_n\},$$

ali nam to neće trebati za Gaussovu integraciju.

Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Integracijom **Hermiteovog** interpolacijskog polinoma

$$h_{2n-1}(x) = \sum_{k=1}^n (f_k h_{k,0}(x) + f'_k h_{k,1}(x)),$$

dobivamo “**novu**” **integracijsku formulu** oblika

$$I'_n := \int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{k=1}^n (w_k f_k + w'_k f'_k),$$

gdje je

$$w_k = \int_a^b w(x) h_{k,0}(x) dx, \quad w'_k = \int_a^b w(x) h_{k,1}(x) dx,$$

za $k = 1, \dots, n$. Naime, f_k i f'_k su **brojevi** i **ne ovise** o x .

Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Težinske koeficijente w_k i w'_k možemo napisati i tako da

- uvrstimo izraze za polinome $h_{k,0}$ i $h_{k,1}$ Hermiteove baze,
- u terminima polinoma l_k Lagrangeove baze.

Dobivamo sljedeće formule za težine u I'_n

$$w_k = \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_k)\ell'_k(x_k)] \ell_k^2(x) dx,$$

$$w'_k = \int_a^b w(x) (x - x_k) \ell_k^2(x) dx,$$

za $k = 1, \dots, n$.

Integracijske formule s derivacijama u čvorovima

Ovakve **integracijske** formule

$$I'_n := \int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{k=1}^n \left(w_k f_k + w'_k f'_k \right),$$

“slične” na **Gaussove** integracijske formule, osim što imaju

- **dodatne** članove $w'_k f'_k$, u kojima se koriste i **derivacije** funkcije f u **čvorovima** integracije x_k .

Kad bi, kao u **Newton–Cotesovim** formulama,

- svi **čvorovi** x_k bili unaprijed **zadani**,

iz uvjeta **egzaktne** integracije polinoma trebalo bi odrediti

- $2n$ parametara — **težinske** koeficijente w_k i w'_k .

Integracijske formule s derivacijama u čvorovima

Očekujemo da ovakva formula I'_n **egzaktno** integrira polinome do stupnja $2n - 1$ (dimenzija prostora je $2n$).

Zaista, **uvjeti egzaktne** integracije na bazi prostora \mathcal{P}_{2n-1} daju

- **regularni** linearni sustav reda $2n$ za **težine**.

To je očito, jer **formule** za **težine** već imamo. Osim toga,

- **integracijska** formula je dobivena “**interpolacijski**” — na **Hermiteovoj** bazi prostora \mathcal{P}_{2n-1} .

Dakle, stupanj **egzaktnosti** formule I'_n je sigurno $d = 2n - 1$.

Uz pretpostavku dovoljne **glatkoće** funkcije f ,

- **jednostavno** se izvodi i **greška** integracijske formule I'_n ,
- direktno iz **greške Hermiteovog** interpolacijskog polinoma.

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

Sasvim općenito, za integracijske formule I'_n vrijedi

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = I'_n(f) + E'_n(f),$$

gdje je $E'_n(f)$ **greška** te formule za zadanu funkciju f .

Integracijsku formulu $I'_n(f)$ dobili smo “**interpolacijski**”, kao

- **egzaktni** integral **Hermiteovog** interpolacijskog polinoma h_{2n-1} za funkciju f na mreži čvorova x_1, \dots, x_n ,

$$I'_n(f) := \int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{k=1}^n \left(w_k f_k + w'_k f'_k \right).$$

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

Greška $E'_n(f)$ integracijske formule $I'_n(f)$ je

$$E'_n(f) = \int_a^b w(x)(f(x) - h_{2n-1}(x)) dx = \int_a^b w(x)e_h(x) dx,$$

tj. $E'_n(f)$ je **integral** greške e_h interpolacijskog polinoma h_{2n-1} .

Neka je funkcija $f \in C^{2n}[a, b]$. U **svakoj** točki $x \in [a, b]$ vrijedi

$$e_h(x) = f(x) - h_{2n-1}(x) = \omega_n^2(x) \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!},$$

za **neki** $\xi \in [a, b]$.

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

Kad to uvrstimo u izraz za grešku $E'_n(f)$, dobivamo

$$E'_n(f) = \int_a^b w(x)e_h(x) dx = \int_a^b w(x) \omega_n^2(x) \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} dx.$$

Zbog pretpostavke $f \in C^{2n}[a, b]$, slijedi da je $f^{(2n)} \in C[a, b]$, tj. $f^{(2n)}$ je neprekidna na $[a, b]$. Osim toga, očito je

$$w(x) \omega_n^2(x) \geq 0, \quad \text{za svaki } x \in [a, b],$$

pa možemo iskoristiti teorem srednje vrijednosti za integrale s težinama, s tim da je

$$g(x) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}.$$

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

Zaključujemo da postoji $\zeta \in [a, b]$ za koji je

$$E'_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) \omega_n^2(x) dx.$$

Integral na desnoj strani ovisi samo o čvorovima x_1, \dots, x_n , i treba ga eksplicitno izračunati za zadani raspored čvorova.

Iz ovog oblika greške integracijske formule I'_n odmah vidimo da je stupanj egzaktnosti jednak $d = 2n - 1$.

Međutim, za praktičnu primjenu formule I'_n trebamo znati

- ne samo funkcijske vrijednosti $f(x_k)$ u čvorovima,
- već i vrijednosti derivacije $f'(x_k)$ u tim čvorovima.

Put prema Gausovim integracijskim formulama

Zato je ideja da probamo **izbjeći** korištenje **derivacija**,

• tako da **izborom** čvorova x_k

• **poništimo** sve težinske koeficijente w'_k uz **derivacije** f'_k .

Ako to “ide”, tj. **ako** je $w'_k = 0$, za $k = 1, \dots, n$, dobili bismo

$$I'_n = \int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{k=1}^n \left(w_k f_k + w'_k f'_k \right) = \sum_{k=1}^n w_k f_k.$$

Stupanj **egzaktnosti** ove “**specijalne**” integracijske formule I'_n mora ostati **isti** — $d = 2n - 1$. No, **tako** dobivena formula

• koristila bi **samo funkcijske** vrijednosti f_k u **čvorovima**, tj. postala bi **Gaussova** integracijska formula I_n .

Gaussove formule kao interpolacijske formule

To se **može** postići! Sljedeći rezultat govori o tome **kako** treba izabrati **čvorove** x_k .

Teorem. U integracijskoj formuli I'_n vrijedi

$$w'_k = 0, \quad k = 1, \dots, n,$$

tj. I'_n je **Gaussova** integracijska formula, **ako i samo ako** je polinom **čvorova**

$$\omega_n := (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

ortogonalan na **sve** polinome **nižeg** stupnja, tj. vrijedi

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

Dokaz. Koristimo eksplicitni izraz za težine u formuli I'_n

$$w'_k = \int_a^b w(x) (x - x_k) \ell_k^2(x) dx, \quad k = 1, \dots, n,$$

gdje su ℓ_k , za $k = 1, \dots, n$, polinomi **Lagrangeove** baze na mreži čvorova x_1, \dots, x_n .

Ove polinome možemo izraziti preko polinoma **čvorova** ω_n

$$\ell_k(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_k) \omega'_n(x_k)}, \quad k = 1, \dots, n,$$

pa je

$$(x - x_k) \ell_k(x) = \frac{\omega_n(x)}{\omega'_n(x_k)}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Gaussove formule kao interpolacijske formule

Kad tu formulu uvrstimo u izraz za težine, dobivamo

$$w'_k = \frac{1}{\omega'_n(x_k)} \int_a^b w(x) \omega_n(x) \ell_k(x) dx, \quad k = 1, \dots, n,$$

1. smjer (nužnost): svi $w'_k = 0 \implies$ ortogonalnost.

Ako je

$$w'_k = 0, \quad k = 1, \dots, n,$$

odmah vidimo da je ω_n ortogonalan na sve polinome ℓ_k , za $k = 1, \dots, n$. No, ti polinomi čine bazu prostora \mathcal{P}_{n-1} , pa je

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

2. smjer (dovoljnost): ortogonalnost \implies svi $w'_k = 0$.

Ako je ω_n ortogonalan na sve polinome $p \in \mathcal{P}_{n-1}$, onda to vrijedi i za polinome Lagrangeove baze, tj. za $p = \ell_k$, pa je

$$\int_a^b w(x) \omega_n(x) \ell_k(x) dx = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Oдавде odmah slijedi i

$$w'_k = \frac{1}{\omega'_n(x_k)} \int_a^b w(x) \omega_n(x) \ell_k(x) dx = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$



Gaussove formule kao interpolacijske formule

Prema očekivanju, dobivamo **isti** zaključak kao i ranije.

Integracijska formula oblika I'_n je **Gaussova** integracijska formula I_n , **ako i samo ako** su **čvorovi** x_k upravo

- sve **nultočke** odgovarajućeg **ortogonalnog** polinoma p_n , stupnja n , s **težinskom** funkcijom w na $[a, b]$.

Pripadni polinom **čvorova** ω_n mora biti jednak

- polinomu p_n s **vodećim** koeficijentom $A_n = 1$.

Time smo još jednom dokazali **egzistenciju** i **jedinstvenost** **Gaussovih** integracijskih formula, za zadanu težinsku funkciju w na $[a, b]$.

Usput, dobivamo i **grešku** za **Gaussove** integracijske formule!

Greška Gaussovih integracijskih formula

Teorem. Neka je $I_n(f)$ Gaussova integracijska formula reda n s težinskom funkcijom w na $[a, b]$

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

Ako je $f \in C^{2n}[a, b]$, onda postoji $\zeta \in [a, b]$ za koji je

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) p_n^2(x) dx,$$

gdje je p_n ortogonalni polinom stupnja n

• s vodećim koeficijentom $A_n = 1$,

uz težinsku funkciju w na $[a, b]$.

Greška Gaussovih integracijskih formula

Dokaz. Znamo da je $I_n(f) = I'_n(f)$ ako i samo ako je

- pripadni polinom **čvorova** ω_n jednak
- **ortogonalnom** polinomu p_n s **vodećim** koeficijentom $A_n = 1$.

Tvrdnja izlazi direktno iz formule za **grešku** odgovarajuće integracijske formule $I'_n(f)$, s tim da je $\omega_n = p_n$. ■

Formulu za **grešku** Gaussove integracijske formule

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) p_n^2(x) dx$$

možemo i drugačije zapisati.

Greška Gaussovih integracijskih formula

Integral na desnoj strani je kvadrat norme polinoma p_n s vodećim koeficijentom $A_n = 1$, pa je

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) p_n^2(x) dx = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \|p_n\|^2.$$

U principu, za zadane w i $[a, b]$,

- $\|p_n\|^2$ se može eksplicitno izračunati i ovisi samo o n (v. malo kasnije za klasične formule).

Ako koristimo p_n za koji je $A_n \neq 1$, formula za grešku se trivijalno mijenja

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \cdot \frac{\|p_n\|^2}{A_n^2}.$$

Pozitivnost težina u Gaussovima formulama

Na kraju, iz općih izraza za težine u integracijskoj formuli I'_n , jednostavno se dokazuje i

- pozitivnost težina w_k u Gaussovima integracijskim formulama.

Za težine u formuli I'_n vrijedi

$$w_k = \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_k)l'_k(x_k)] l_k^2(x) dx,$$

$$w'_k = \int_a^b w(x) (x - x_k) l_k^2(x) dx, \quad k = 1, \dots, n.$$

U izrazu za w_k iskoristimo relaciju za w'_k .

Pozitivnost težina u Gaussovima formulama

Težine w_k onda možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned}w_k &= \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_k)l'_k(x_k)] l_k^2(x) dx \\ &= \int_a^b w(x) l_k^2(x) dx - 2l'_k(x_k)w'_k.\end{aligned}$$

U Gaussovima formulama je $w'_k = 0$, pa izlazi poznata formula

$$w_k = \int_a^b w(x) l_k^2(x) dx > 0, \quad k = 1, \dots, n,$$

zbog pozitivnosti podintegralne funkcije na desnoj strani. ■

Računanje čvorova i težina u Gaussovima formulama

Problem nalaženja Gaussovih formula

Neka je zadana **težinska** funkcija $w \geq 0$ na intervalu $[a, b]$.

Problem: Za zadani $n \in \mathbb{N}$, treba naći sve “parametre” odogovarajuće **Gaussove** integracijske formule **reda** n

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

To znači da treba **izračunati**

• sve **čvorove** x_k i **težine** w_k , za $k = 1, \dots, n$.

Usput, ove parametre treba izračunati maksimalno **točno**, da osiguramo što **točniju numeričku** integraciju **raznih** funkcija f .

Idealno: izračunati čvorove i težine na “**punu**” točnost aritmetike računala (u kojoj radimo).

Sustav jednažbi iz uvjeta egzaktne integracije

Znamo da **Gaussove** integracijske formule **egzaktno** integriraju sve polinome iz \mathcal{P}_{2n-1} .

- Možemo izabrati bilo koju **bazu** u tom prostoru \mathcal{P}_{2n-1}
- i napisati sustav od **$2n$ jednažbi** s **$2n$ nepoznanica**, iz **uvjeta egzaktne** integracije na toj **bazi**.

Na primjer, u **standardnoj** bazi $\{1, x, x^2, \dots, x^{2n-1}\}$ dobivamo sustav oblika

$$\mu_j = \int_a^b w(x)x^j dx = \sum_{k=1}^n w_k x_k^j, \quad j = 0, 1, \dots, 2n - 1.$$

Međutim, to je **loš** pristup!

Sustav jednažbi iz uvjeta egzaktne integracije

Što **ne valja**? Ključni problem je **nelinearnost** ovog sustava.

- Ovisnost o nepoznanicama x_k je **nelinearna**.

Već i dokaz da ovaj **nelinearni** sustav ima **jedinstveno** rješenje **nije jednostavan**.

Drugi problem je moguća

- **loša uvjetovanost** izabrane baze prostora polinoma.

Potencijalni **popravak**:

- uzeti bazu pripadnih **ortogonalnih** polinoma p_n .

Nažalost, to **pomaže** tek kad jednom **izračunamo** čvorove x_k , pa ostaje **linearni** sustav (reda n) za **težine** w_k .

Dakle, **nema** puno smisla!

Parametri Gaussovih formula

Napomena. Za neke “klasične” izbore težinskih funkcija w i intervala $[a, b]$, postoje

- tablice čvorova i težina pripadnih Gaussovih formula,
- za neke (male) vrijednosti n — tipično je $n \leq 20$,
- na vrlo visoku točnost — 20, pa i više decimala.

Međutim, čak i tad imamo “problem”:

- treba korektno “prekucati” tabelirane vrijednosti u naš program!

Probajte jednom — i provjerite jesu li sve vrijednosti korektne! (Test je egzaktna integracija).

Dakle, korisno je znati kako izgleda algoritam za računanje parametara Gaussovih formula.

Ortogonalni polinomi i tročlana rekurzija

Algoritam se bazira na pripadnim **ortogonalnim** polinomima i **tročlanoj** rekurziji za te polinome.

Neka je $\{p_k \mid k \geq 0\}$ familija **ortogonalnih** polinoma na intervalu $[a, b]$ s težinskom funkcijom w .

Već smo pokazali da ovi polinomi zadovoljavaju **tročlanu homogenu** rekurziju oblika

$$p_{k+1}(x) = (a_k x + b_k)p_k(x) - c_k p_{k-1}(x), \quad k \geq 1.$$

Izveli smo i formule za **koeficijente** a_k , b_k i c_k u ovoj rekurziji (ali nam one neće trebati).

Monični ortogonalni polinomi

Za nalaženje parametara **Gaussovih** formula standardno se koriste **ortogonalni** polinomi p_k

• s **vodećim** koeficijentom $A_k = 1$.

Ovi polinomi katkad se zovu **monični** ortogonalni polinomi.

Monični ortogonalni polinomi zadovoljavaju

• još **jednostavniju tročlanu** rekurziju,

koja se standardno piše u sljedećem obliku:

$$p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, \dots$$

Uočite “**pomak**” u rekurziji — rekurzija starta od **nule!**

Rekurzija za monične ortogonalne polinome

Rekurzija je

$$p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, \dots$$

Po definiciji, **prva dva** polinoma su

$$p_{-1}(x) := 0, \quad p_0(x) = 1.$$

Uz skraćeni zapis integralnog skalarnog produkta $\langle \cdot, \cdot \rangle$,
koeficijenti u ovoj rekurziji dani su formulama

$$\alpha_k = \frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\beta_k = \frac{\langle xp_k, p_{k-1} \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} = \frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} > 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

Rekurzija za monične ortogonalne polinome

Standardno se još **definira** da je

$$\beta_0 := \mu_0 = \int_a^b w(x) dx.$$

Zbog $p_{-1}(x) = 0$, ovaj koeficijent β_0 **nije** bitan u rekurziji, već ima **drugu** svrhu. I za njega vrijedi $\beta_0 > 0$.

Pretpostavimo sad da su

• **svi** potrebni koeficijenti α_k i β_k **poznati**.

Ako **nisu**, postoje **numerički** postupci za njihovo **računanje**.

Za zadani n , **čvorovi** x_1, \dots, x_n su **nultočke** polinoma p_n .

Zato u rekurziji trebamo koeficijente za $k \leq n - 1$.

Matrični zapis rekurzije za ortogonalne polinome

Za početak, rekurziju za **monične** ortogonalne polinome

$$p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, \dots,$$

napišemo tako da član $xp_k(x)$ ostane **sam** na jednoj strani

$$p_{k+1}(x) + \alpha_k p_k(x) + \beta_k p_{k-1}(x) = xp_k(x), \quad k = 0, 1, \dots,$$

Prvih n relacija iz rekurzije, za $k = 0, \dots, n - 1$, možemo zapisati u **matričnom** zapisu,

- tako da **lijevu** stranu **svake** relacije gledamo kao **linearnu kombinaciju** vrijednosti

$$p_0(x), p_1(x), \dots, p_{n-1}(x).$$

U **zadnjoj** relaciji, $p_n(x)$ pišemo **posebno**.

Matrični zapis rekurzije za ortogonalne polinome

Dobivamo

$$\begin{bmatrix} \alpha_0 & 1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-2} & 1 \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ p_n(x) \end{bmatrix} = x \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{bmatrix} .$$

Uvedimo oznake

$$T_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & 1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-2} & 1 \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix} , \quad z(x) = \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{bmatrix} .$$

Matrični zapis rekurzije za ortogonalne polinome

Onda dobivamo “skraćeni” matrični zapis

$$T_n z(x) + p_n(x) e_n = x z(x),$$

gdje je $e_n = (0, \dots, 0, 1)^T$ zadnji vektor standardne baze u \mathbb{R}^n .
Dodatno još, zbog $p_0(x) = 1$, uvijek vrijedi $z(x) \neq 0$.

Sad ide ključna primjedba:

- ako je x_k nultočka polinoma p_n , onda je x_k svojstvena vrijednost matrice T_n , a $z(x_k)$ je pripadni svojstveni vektor.

Vrijedi i obrat:

- ako je x svojstvena vrijednost matrice T_n , onda je x nultočka polinoma p_n .

Čvorovi kao svojstvene vrijednosti

Dakle, sve **svojstvene vrijednosti** matrice T_n su upravo sve **nultočke** polinoma p_n , tj. svi **čvorovi** integracije x_1, \dots, x_n .

Zaključak: za računanje **čvorova** možemo koristiti algoritme

- za računanje **svojstvenih vrijednosti** tridijagonalne (općenito, **nesimetrične**) matrice T_n .

Međutim, to se u praksi nikad **ne radi** tako,

- preko **nesimetrične** matrice T_n .

Razlog: postoji i **puno bolji** pristup!

- Matrica T_n se **uvijek** može **simetrizirati** u tzv. **Jacobijevu** matricu J_n .

Simetrizacija matrice — Jacobijeva matrica J_n

Tvrdnja. Matrica T_n je dijagonalno slična simetričnoj matrici

$$J_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \sqrt{\beta_{n-2}} & \alpha_{n-2} & \sqrt{\beta_{n-1}} \\ & & & \sqrt{\beta_{n-1}} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix}$$

koju zovemo **Jacobijeva** matrica. Ovdje je **bitno** da je $\beta_k > 0$.

Preciznije, vrijedi $D_n^{-1}T_nD_n = J_n$, pri čemu je

$$D_n = d_0 D'_n = d_0 \cdot \text{diag}(1, \sqrt{\beta_1}, \sqrt{\beta_1\beta_2}, \dots, \sqrt{\beta_1 \cdots \beta_{n-1}}),$$

a $d_0 \neq 0$ je proizvoljan skalar (d_0 se **skrati** u izrazu za J_n).

Čvorovi kao svojstvene vrijednosti matrice J_n

Slične matrice T_n i J_n imaju iste svojstvene vrijednosti.

Zaključak: čvorove možemo izračunati kao

- svojstvene vrijednosti simetrične tridijagonalne matrice J_n .

Prednosti ovog pristupa:

- Simetrična matrica J_n ima realne svojstvene vrijednosti,
- pripadni svojstveni vektori su ortogonalni,
- iz njih se lako računaju težine (Golub–Welsch algoritam).

Dodatno, za simetrične tridijagonalne matrice postoje

- vrlo efikasni i točni algoritmi za svojstveni problem.

Simetrizacija matrice i rekurzija

Simetrizaciji matrice T_n u **Jacobijevu** matricu J_n odgovara

● **simetrizacija** rekurzije za pripadne **ortogonalne** polinome.

Iz **moničnih** polinoma p_k , supstitucijom

$$\tilde{p}_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta_1 \cdots \beta_k}} p_k(x), \quad k = 1, 2, \dots,$$

prelazimo na **ortogonalne** polinome \tilde{p}_k koji više **nisu monični**, ali zadovoljavaju **simetriziranu** rekurziju

$$\sqrt{\beta_{k+1}} \tilde{p}_{k+1}(x) = (x - \alpha_k) \tilde{p}_k(x) - \sqrt{\beta_k} \tilde{p}_{k-1}(x),$$

za $k = 0, 1, \dots$. Start je, kao i prije, $\tilde{p}_{-1}(x) = 0$ i $\tilde{p}_0(x) = 1$.

Ovoj rekurziji odgovara **Jacobijeva** matrica J_n .

Svojstveni vektori Jacobijeve matrice J_n

Ortogonalni polinomi p_n i \tilde{p}_n , naravno, imaju iste nultočke, a to su ujedno i svojstvene vrijednosti matrice J_n .

Za bilo koju nultočku x_k polinoma \tilde{p}_n , iz matičnog zapisa rekurzije slijedi

$$J_n \tilde{z}_k = x_k \tilde{z}_k,$$

gdje je

$$\tilde{z}_k := \tilde{z}(x_k) = \begin{bmatrix} \tilde{p}_0(x_k) \\ \tilde{p}_1(x_k) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-1}(x_k) \end{bmatrix}$$

svojstveni vektor matrice J_n koji pripada svojstvenoj vrijednosti x_k , za $k = 1, \dots, n$.

Diskretna ortogonalnost ortogonalnih polinoma

Znamo da su sve svojstvene vrijednosti x_k međusobno različite (to su nultočke ortogonalnog polinoma \tilde{p}_n). Onda su

- pripadni svojstveni potprostori jednodimenzionalni,
- i još moraju biti ortogonalni, jer je J_n simetrična matrica!

To znači da su svojstveni vektori \tilde{z}_k međusobno ortogonalni. Uz oznaku $\langle \cdot, \cdot \rangle_n$ za “obični” skalarni produkt u \mathbb{R}^n , vrijedi

$$\langle \tilde{z}_j, \tilde{z}_k \rangle_n = 0, \quad \text{za } j \neq k.$$

Kad se ova relacija raspiše, dobivamo

- diskretnu ortogonalnost polinoma $\tilde{p}_0, \tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}$
 - u nultočkama prvog sljedećeg ortogonalnog polinoma \tilde{p}_n ,
- i to vrijedi za svaki $n \in \mathbb{N}$.

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

Svojstveni vektori \tilde{z}_k matrice J_n

● nisu normirani, tj. vrijedi $\|\tilde{z}_k\| \neq 1$,
već su skalirani tako da im je prva komponenta jednaka 1

$$\tilde{z}_{k,1} = \tilde{p}_0(x_k) = 1, \quad k = 1, \dots, n.$$

Ako želimo ortonormiranu bazu svojstvenih vektora, možemo ih normirati,

$$v_k := \frac{\tilde{z}_k}{\|\tilde{z}_k\|}, \quad k = 1, \dots, n,$$

i onda vrijedi

$$\langle v_j, v_k \rangle_n = \delta_{jk}.$$

Dakle, v_1, \dots, v_n je ortonormirana baza svojstvenih vektora matrice J_n .

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

Za **prve** komponente vektora v_k **ortonormirane** baze onda vrijedi

$$v_{k,1} = \frac{1}{\|\tilde{z}_k\|}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Ako **znamo** v_k , odavde dobivamo **norme** $\|\tilde{z}_k\|$.

Ova veza je **korisna** u praksi:

- 🔴 Ako numerički **računamo** **svojstvene vektore** matrice J_n ,
- 🔴 uvijek, kao rezultat, dobivamo **ortonormiranu** bazu v_1, \dots, v_n .

Razlog: **Dijagonalizacija simetrične** matrice J_n radi se **ortogonalnim** transformacijama (sličnosti = kongruencije)!

Računanje težina Gaussovih formula

Za računanje težina w_k u Gaussovima koristimo

- ortogonalnost polinoma $\tilde{p}_0, \dots, \tilde{p}_{n-1}$,
- i uvjete egzaktnosti integracije tih istih polinoma.

Za bilo koji ortogonalni polinom \tilde{p}_k , iz relacije ortogonalnosti na konstantu $\tilde{p}_0(x) = 1$, dobivamo da je

$$\langle \tilde{p}_k, \tilde{p}_0 \rangle = \int_a^b w(x) \tilde{p}_k(x) dx = \begin{cases} \beta_0, & \text{za } k = 0, \\ 0, & \text{za } k > 0. \end{cases}$$

Iz uvjeta egzaktnosti integracije polinoma \tilde{p}_k , za $k \leq n - 1$, slijedi

$$\sum_{j=1}^n w_j \tilde{p}_k(x_j) = \langle \tilde{p}_k, \tilde{p}_0 \rangle = \beta_0 \cdot \delta_{k,0}, \quad k = 0, \dots, n - 1.$$

Računanje težina Gaussovih formula

Ovaj **linearni sustav** za težine w_1, \dots, w_n možemo zapisati u vektorskoj notaciji, preko **svojstvenih vektora** \tilde{z}_j , u obliku

$$\sum_{j=1}^n w_j \tilde{z}_j = \beta_0 e_1,$$

gdje je e_1 **prvi** vektor standardne baze u \mathbb{R}^n .

Ovu relaciju **skalarno** pomnožimo s vektorom \tilde{z}_k . Izlazi

$$\sum_{j=1}^n w_j \langle \tilde{z}_j, \tilde{z}_k \rangle_n = \beta_0 \cdot \tilde{z}_{k,1} = \beta_0.$$

Sad iskoristimo **ortogonalnost** svojstvenih vektora

$$\langle \tilde{z}_j, \tilde{z}_k \rangle_n = \|\tilde{z}_k\|^2 \cdot \delta_{jk}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Računanje težina Gaussovih formula

Dobivamo da je

$$w_k \|\tilde{z}_k\|^2 = \beta_0, \quad k = 1, \dots, n.$$

Na kraju, u **ortonormiranoj** bazi je $v_{k,1} = 1/\|\tilde{z}_k\|$.

Time smo pokazali da za **težine** vrijedi

$$w_k = \frac{\beta_0}{\|\tilde{z}_k\|^2} = \beta_0 v_{k,1}^2, \quad k = 1, \dots, n.$$

Ovaj postupak za računanje parametara **Gaussovih** integracijskih formula zove se **Golub–Welsch** algoritam.

Složenost cijelog postupka

Složenost:

- $O(n^3)$ — ako za matricu J_n računamo svojstvene vrijednosti x_k i (ortonormirane) svojstvene vektore v_1, \dots, v_n ,
- $O(n^2)$ — ako računamo samo svojstvene vrijednosti x_k , a elemente $\tilde{p}_j(x_k)$ svojstvenih vektora $\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_n$ računamo na kraju, po rekurziji.

Za jednu klasu posebnih Gaussovih formula postoji još brži algoritam. Složenost je linearna, tj. $O(n)$, što je optimalno.

- Polinomi p_n zadovoljavaju poseban oblik diferencijalne jednačbe drugog reda. Vrijedi za sve klasične formule.
- Autori su Glaser, Liu i Rokhlin, a članak je iz 2007. g.

Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula

Gauss–Legendreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

zovu se **Gauss–Legendreove** formule.

• Težinska funkcija je $w(x) = 1$ na intervalu $[-1, 1]$.

Čvorovi integracije su **nultočke** polinoma P_n definiranih Rodriguesovom formulom

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n, \quad n \geq 0.$$

Gauss–Legendreove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

$$\begin{aligned}w_k &= \frac{2(1 - x_k^2)}{[nP_{n-1}(x_k)]^2} = \frac{2(1 - x_k^2)}{[(n+1)P_{n+1}(x_k)]^2} \\ &= \frac{2}{nP'_n(x_k)P_{n-1}(x_k)} = -\frac{2}{(n+1)P'_n(x_k)P_{n+1}(x_k)} \\ &= \frac{2}{(1 - x_k^2)[P'_n(x_k)]^2}, \quad k = 1, \dots, n.\end{aligned}$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1).$$

Gauss–Laguerreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

zovu se **Gauss–Laguerreove** formule.

• Težinska funkcija je $w(x) = e^{-x}$ na intervalu $[0, \infty)$.

Čvorovi integracije su **nultočke** polinoma \tilde{L}_n definiranih Rodriguesovom formulom

$$\tilde{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}), \quad n \geq 0.$$

Gauss–Laguerreove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

$$\begin{aligned}w_k &= \frac{[(n-1)!]^2 x_k}{[n\tilde{L}_{n-1}(x_k)]^2} = \frac{(n!)^2 x_k}{[\tilde{L}_{n+1}(x_k)]^2} \\ &= -\frac{[(n-1)!]^2}{\tilde{L}'_n(x_k)\tilde{L}_{n-1}(x_k)} = \frac{(n!)^2}{\tilde{L}'_n(x_k)\tilde{L}_{n+1}(x_k)} \\ &= \frac{(n!)^2}{x_k[\tilde{L}'_n(x_k)]^2}, \quad k = 1, \dots, n.\end{aligned}$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

$$E_n(f) = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in (0, \infty).$$

Gauss–Hermiteove formule

Gaussove integracijske formule oblika

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

zovu se **Gauss–Hermiteove** formule.

- Težinska funkcija je $w(x) = e^{-x^2}$ na intervalu $(-\infty, \infty) = \mathbb{R}$.

Čvorovi integracije su **nultočke** polinoma H_n definiranih Rodriguesovom formulom

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}), \quad n \geq 0.$$

Gauss–Hermiteove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

$$\begin{aligned}w_k &= \frac{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}{n[H_{n-1}(x_k)]^2} = \frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{[H_{n+1}(x_k)]^2} \\ &= \frac{2^n(n-1)! \sqrt{\pi}}{H'_n(x_k) H_{n-1}(x_k)} = -\frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{H'_n(x_k) H_{n+1}(x_k)} \\ &= \frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_k)]^2}, \quad k = 1, \dots, n.\end{aligned}$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

$$E_n(f) = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in (-\infty, \infty).$$

Gauss–Čebiševljeve formule

Gaussove integracijske formule oblika

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

zovu se Gauss–Čebiševljeve formule.

● Težinska funkcija je $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ na intervalu $[-1, 1]$.

Čvorovi integracije su nultočke Čebiševljevih polinoma $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$. Za nultočke vrijedi formula

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k-1)\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \dots, n.$$

Gauss–Čebiševljeve formule

Sve težine u Gaussovoj formuli su jednake

$$w_k = \frac{\pi}{n}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

$$E_n(f) = \frac{\pi}{2^{2n-1}(2n)!} f^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1).$$

Rješavanje nelinearnih jednadžbi

Općenito o iterativnim metodama

Neka je zadana **nelinearna funkcija**

$$f : I \rightarrow \mathbb{R},$$

gdje je I neki interval. Tražimo sve one $x \in I$ za koje je

$$f(x) = 0.$$

Takve točke x zovu se

- **rješenja** ili **korijeni** pripadne jednačbe,
- ili **nultočke** funkcije f .

U pravilu, pretpostavljamo da je

- f **neprekidna** na I i
- da su joj nultočke **izolirane**.

Neprekidnost funkcije f

Neprekidnost funkcije f obično se koristi pri određivanju intervala gdje se nalazi nultočka. Naime, ako je

$$f(a) \cdot f(b) < 0$$

na nekom intervalu $[a, b]$, to znači da funkcija je promijenila znak na $[a, b]$. To se može dogoditi na dva načina:

- ili f ima nultočku na $[a, b]$,
- ili f ima prekid na $[a, b]$.

Ako je

- f neprekidna na $[a, b]$,
- i vrijedi $f(a) \cdot f(b) < 0$,

onda f sigurno ima nultočku na $[a, b]$.

Izoliranost nultočka

Definicija. (Izolirana nultočka) Za nultočku x_k ćemo reći da je **izolirana** ako postoji krug nekog **pozitivnog** radijusa oko x_k

• takav da je x_k **jedina** nultočka **unutar** tog kruga.

U protivnom, kažemo da je nultočka **neizolirana**. ■

Kod **neizoliranih** nultočaka postoji problem **konvergencije** algoritama za nalaženje nultočaka.

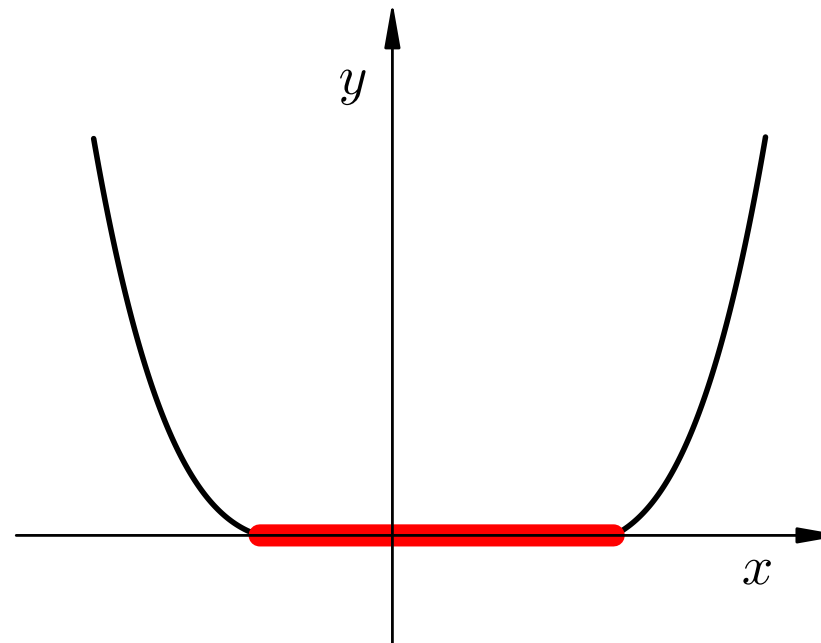
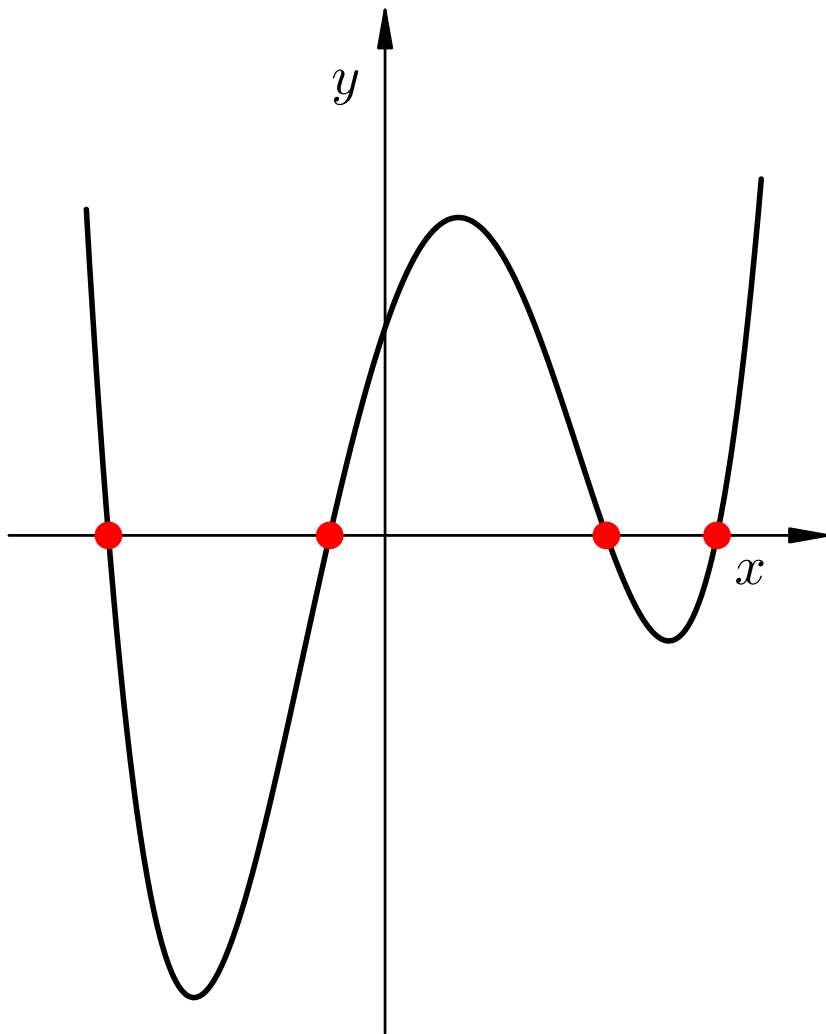
Odsad nadalje, pretpostavljano da f ima samo **izolirane** nultočke.

Na sljedećoj stranici su primjeri funkcije s

• **izoliranim** nultočkama (lijevo),

• **neizoliranim** nultočkama (desno).

Izoliranost nultočka



Računanje nultočke na zadanu točnost

Traženje nultočki na zadanu točnost sastoji se od **dvije** faze:

1. Izolacije **jedne** ili **više** nultočki, tj. nalaženje intervala I unutar kojeg se nalazi **barem jedna** nultočka. Ovo je **teži** dio posla i obavlja se na temelju **analize toka** funkcije.
2. **Iterativno** nalaženje nultočke na traženu **točnost**.

Postoji **mnogo metoda** za nalaženje nultočaka nelinearnih funkcija na zadanu točnost. One se bitno razlikuju po tome


- imamo li **sigurnu** konvergenciju ili **ne**,
- i po **brzini** konvergencije (kad konvergiraju).

Uobičajeno:

- **brze** metode **nemaju** sigurnu konvergenciju,
- dok je **sporije** metode **imaju**.


Brzina konvergencije

Definirajmo sada **brzinu konvergencije** niza iteracija. Te iteracije **moгу**, ali **ne moraju** biti iteracije za računanje nultočke funkcije.

Definicija. Niz iteracija $(x_n, n \in \mathbb{N}_0)$ **konvergira** prema točki α  s **redom konvergencije** $p, p \geq 1$, ako je p **najveći** broj takav da vrijedi

$$|\alpha - x_n| \leq c |\alpha - x_{n-1}|^p, \quad n \in \mathbb{N}$$

za neki $c > 0$.

Ako je $p = 1$, kažemo da niz konvergira **linearno** prema α . U tom je slučaju **nužno** da je $c < 1$ i obično se c naziva **faktor linearne konvergencije**. 

Brzina konvergencije

Prethodna definicija, katkad, nije zgodna za linearne iterativne algoritme.

Ako u prethodnoj formuli upotrijebimo indukciju za $p = 1$, $c < 1$, onda dobivamo da je

$$|\alpha - x_n| \leq c^n |\alpha - x_0|, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Katkad će biti mnogo lakše pokazati ovu relaciju, nego onu iz definicije. I u ovom slučaju reći ćemo da niz iteracija konvergira linearno s faktorom c .

Metoda bisekcije (raspolavljanja)

Uvodno o metodi raspolavljanja

Najjednostavnija metoda nalaženja nultočka funkcije je **metoda bisekcije** ili **raspolavljanja**.

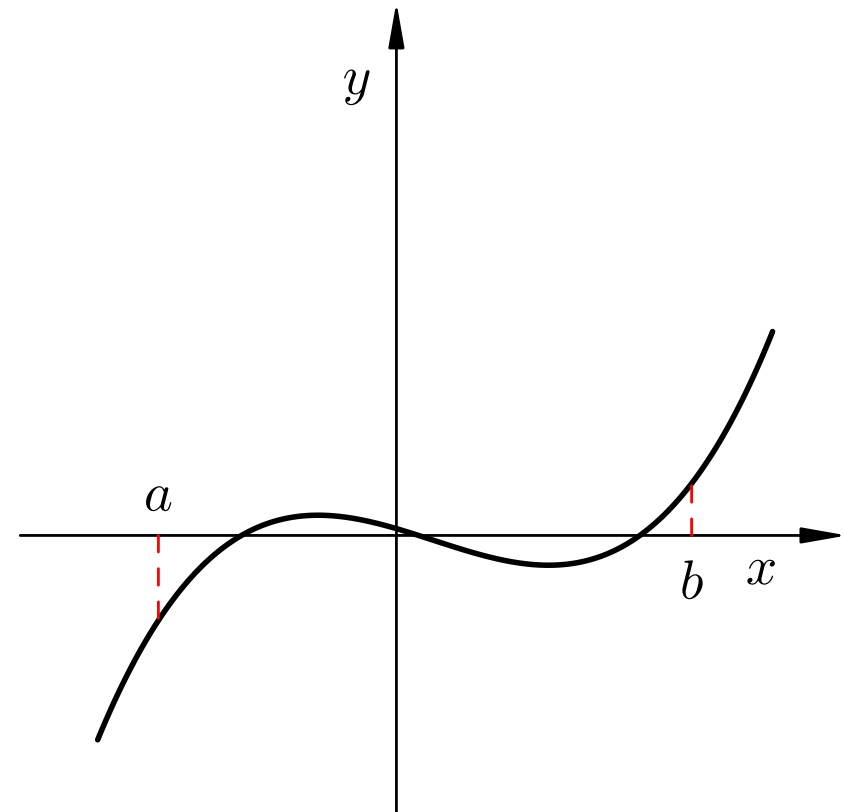
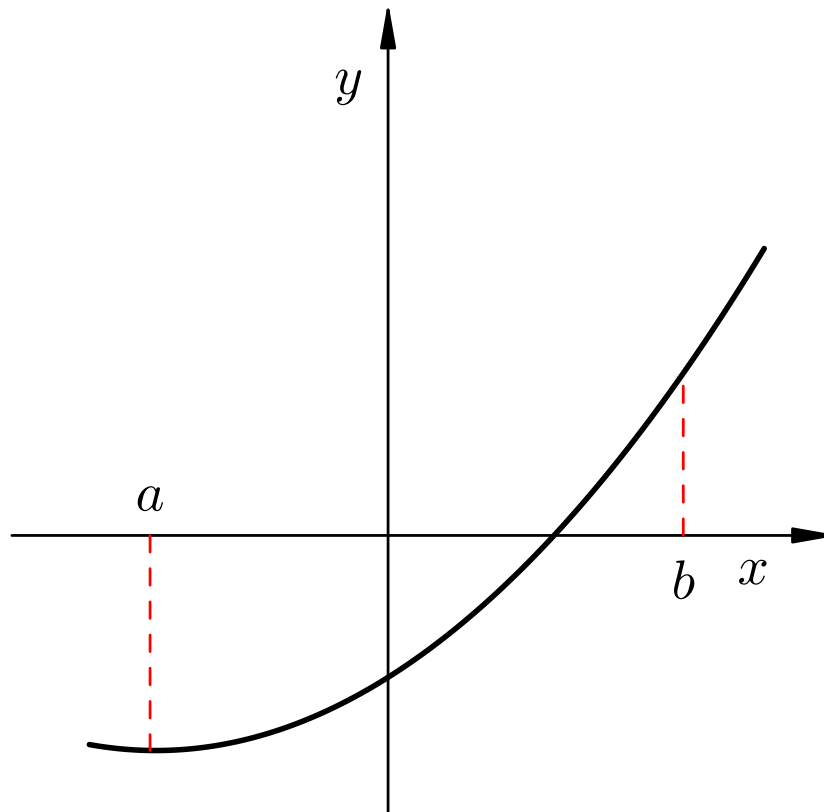
- Osnovna pretpostavka za početak algoritma raspolavljanja je **neprekidnost** funkcije f na intervalu $[a, b]$, s tim da u **rubovima** intervala vrijedi

$$f(a) \cdot f(b) < 0.$$

To znači da f ima na $[a, b]$ **barem jednu** nultoku. Međutim, f može imati i **više** nultočaka unutra $[a, b]$. Na sljedećoj stranici su primjeri kad

- f ima **tačno jednu** nultoku (lijevo).
- **više nultočaka**, točnije, **neparan** broj njih, brojeći kratnost (desno).

Uvodno o metodi raspolavljanja



Uvodno o metodi raspolavljanja

Ako je

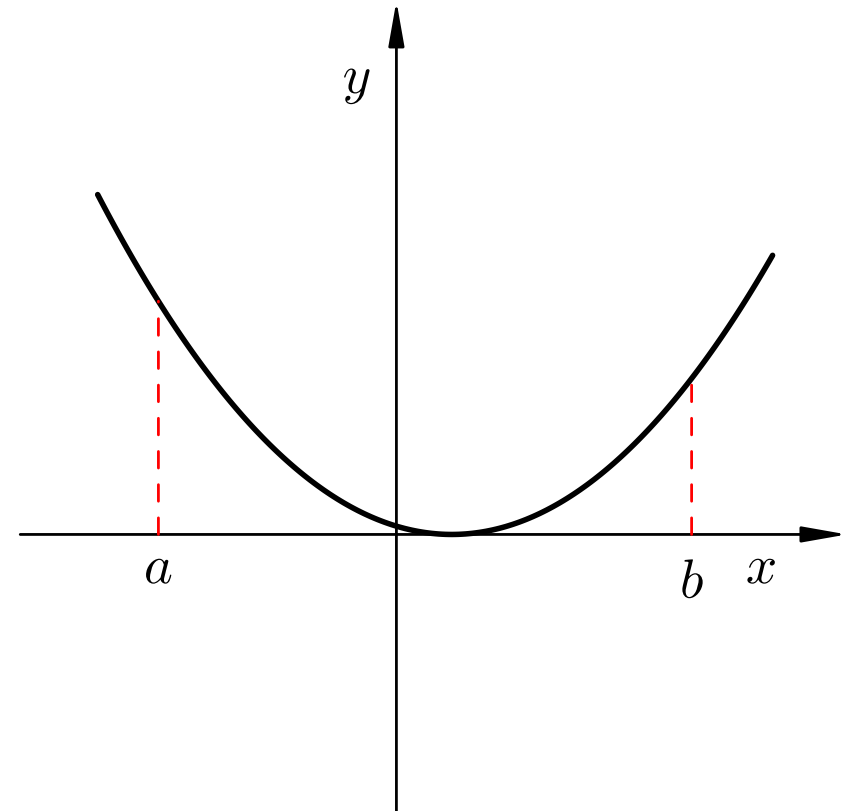
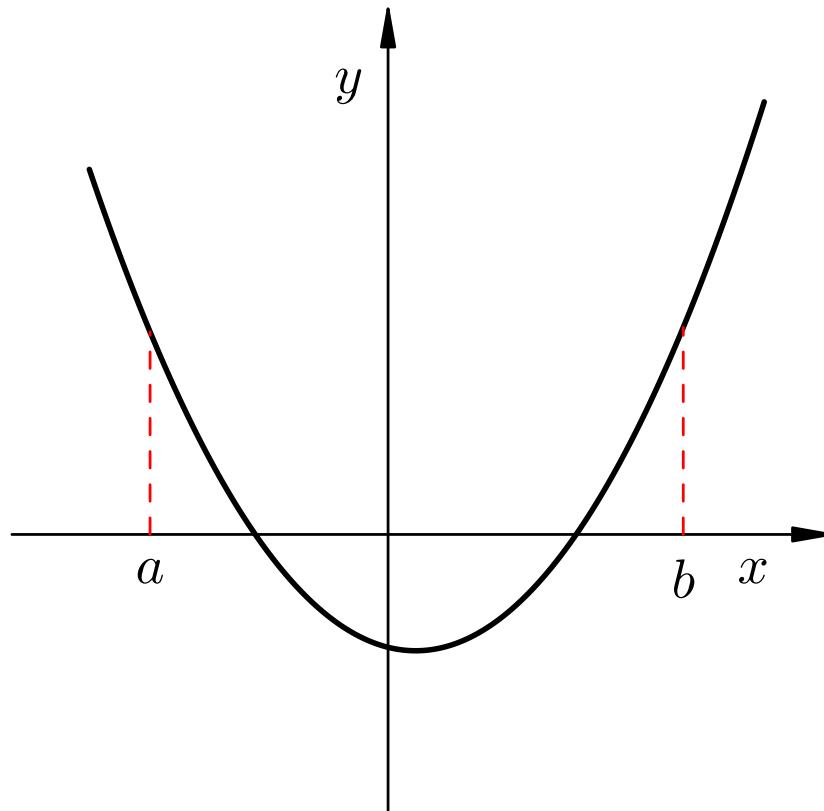
$$f(a) \cdot f(b) > 0,$$

to **ne mora** značiti da **f nema** nultočku unutar $[a, b]$.

Na primjer, moglo se dogoditi da smo **loše separirali** nultočke i da **f** ima unutar intervala $[a, b]$

- **paran** broj nultočaka (slika lijevo),
- ili nultočku **parnog** reda (slika desno).

Uvodno o metodi raspolavljanja



Uvodno o metodi raspolavljanja

Zaključak.

- Boljom separacijom nultočaka na lijevoj slici lako ćemo postići da je $f(a) \cdot f(b) < 0$.
- Nultočke parnog reda **nemoguće** je **direktno** naći metodom bisekcije.

Kad ćemo govoriti o nultočkama **višeg** reda, onda ćemo pokazati kako treba **modificirati** funkciju tako da i metodom bisekcije možemo naći **višestruku** nultočku.

- Umjesto f , treba raditi s funkcijom f/f' .

Algoritam

Označimo s α pravu nultočku funkcije, a zatim s

• $a_0 := a,$

• $b_0 := b$ i

• $x_0 :=$ polovište intervala $[a_0, b_0]$, tj.

$$x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2}.$$

Ideja metode: u n -tom koraku algoritma

• konstruiramo interval $[a_n, b_n]$ kojemu je

• duljina = polovina duljine prethodnog intervala,

• ali tako da je nultočka ostala unutar intervala $[a_n, b_n]$.

Algoritam

Konstrukcija intervala $[a_n, b_n]$ sastoji se u **raspolavljanju** intervala $[a_{n-1}, b_{n-1}]$ točkom x_{n-1} i to tako da je

$$a_n = x_{n-1}, \quad b_n = b_{n-1} \quad \text{ako je} \quad f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) > 0,$$

$$a_n = a_{n-1}, \quad b_n = x_{n-1} \quad \text{ako je} \quad f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) < 0.$$

Uočimo da je **dovoljno** ispitivati koji predznak imamo za $f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1})$. Imamo **tri** mogućnosti:

- $f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) = 0$, znači da je nultočka **upravo** x_{n-1} .
- $f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) < 0$ znači da je **barem jedna** nultočka **unutar** $[a_{n-1}, x_{n-1}]$.
- $f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) > 0$ znači da je **barem jedna** nultočka **unutar** $[x_{n-1}, b_{n-1}]$.

Algoritam

Objasnimo posljednju činjenicu. Množenjem lijevih strana nejednakosti

$$f(a_{n-1}) \cdot f(b_{n-1}) < 0$$

$$f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) > 0$$

dobivamo

$$f(a_{n-1})^2 \cdot f(x_{n-1}) \cdot f(b_{n-1}) < 0,$$

pa mora biti

$$f(x_{n-1}) \cdot f(b_{n-1}) < 0.$$

Konvergenција i zaustavljanje algoritma

Tvrđnja. Ako vrijede startne pretpostavke za metodu raspolavljanja, ona će **konvergirati** prema **nekoj** nultočki iz intervala $[a, b]$.

Nultočku smo našli sa zadanom **točnošću** ε ako je

$$|\alpha - x_n| \leq \varepsilon.$$

Kako ćemo znati da je to **ispunjeno**, ako **ne znamo** α ?

- Budući da je x_n **polovište** intervala $[a_n, b_n]$ i $\alpha \in [a_n, b_n]$, onda je

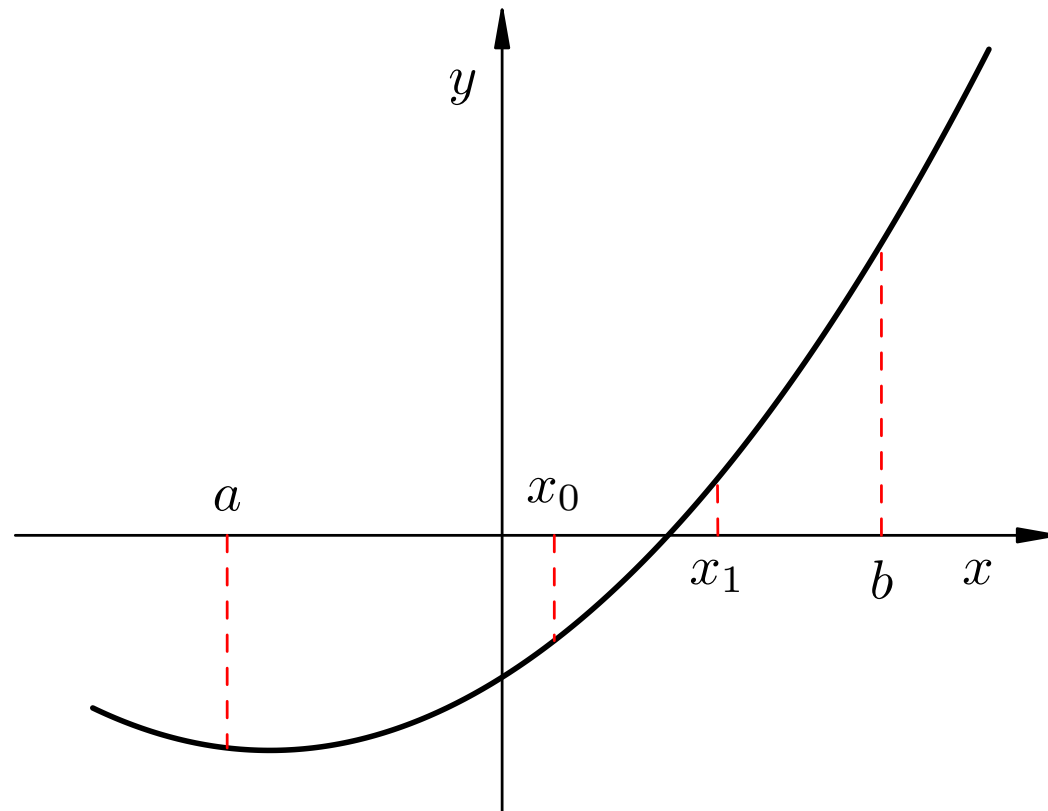
$$|\alpha - x_n| \leq b_n - x_n = \frac{1}{2} (b_n - a_n),$$

- pa je dovoljno zahtijevati

$$b_n - x_n \leq \varepsilon.$$

Metoda raspolavljanja grafički

Grafički, metoda **raspolavljanja** izgleda ovako



Algoritam

Metoda raspolavljanja

```
x := (a + b) / 2;
dok je b - x > epsilon radi {
    ako je f(x) * f(b) < 0.0 tada {
        a := x
    };
    inače {
        b := x;
    };
    x := (a + b) / 2;
};
/* Na kraju je x ≈ alpha. */
```

Ocjena greške

Iz konstrukcije metode, lako se izvodi **pogreška** n -te aproksimacije x_n nultočke α . Vrijedi:

$$\begin{aligned} |\alpha - x_n| &\leq b_n - x_n = \frac{1}{2} (b_n - a_n) = \frac{1}{2^2} (b_{n-1} - a_{n-1}) \\ &= \dots = \frac{1}{2^{n+1}} (b - a). \end{aligned}$$

Nadalje, vrijedi $(b - a)/2 = b - x_0 = x_0 - a$, pa slijedi da je

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{1}{2^n} (b - x_0) = \frac{1}{2^n} (x_0 - a).$$

Ova relacija podsjeća na **linearnu konvergenciju**, ali se zdesna **ne** pojavljuje $|\alpha - x_0|$. Ipak, **desna** strana daje naslutiti da će konvergencija biti **dosta spora**.

Ocjena greške

Relacija

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{1}{2^{n+1}} (b - a)$$

omogućava da se **unaprijed** odredi koliko je **koraka** raspolavljanja potrebno da bismo postigli **točnost** ε .

Da osiguramo $|\alpha - x_n| \leq \varepsilon$, dovoljno je zahtijevati da je

$$\frac{1}{2^{n+1}} (b - a) \leq \varepsilon.$$

Množenjem prethodne jednadžbe s 2^{n+1} i dijeljenjem s ε dobivamo

$$\frac{b - a}{\varepsilon} \leq 2^{n+1},$$

...

Ocjena greške

a zatim logaritmiranje daje

$$\log(b - a) - \log \varepsilon \leq (n + 1) \log 2,$$

odnosno,

$$n \geq \frac{\log(b - a) - \log \varepsilon}{\log 2} - 1, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Ako je funkcija f još i klase $C^1[a, b]$, tj. ako f ima neprekidnu prvu derivaciju, može se dobiti dinamička ocjena greške.

Po Teoremu srednje vrijednosti za funkciju f oko α , imamo

$$f(x_n) = f(\alpha) + f'(\xi)(x_n - \alpha),$$

pri čemu je ξ između x_n i α .

Ocjena greške

Prvo iskoristimo da je α **nultočka**, tj. $f(\alpha) = 0$, a zatim uzmemo apsolutne vrijednosti obje strane. Dobivamo

$$|f(x_n)| = |f'(\xi)| |\alpha - x_n|.$$

Primijetite da je

$$|f'(\xi)| \geq m_1, \quad m_1 = \min_{x \in [a, b]} |f'(x)|.$$

Ako je $m_1 > 0$, uvrštavanjem ove ocjene izlazi

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{|f(x_n)|}{m_1}.$$

Ocjena greške

Drugim riječima, ako želimo da je $|\alpha - x_n| \leq \varepsilon$, dovoljno je zahtijevati da je

$$\frac{|f(x_n)|}{m_1} \leq \varepsilon,$$

odnosno, da vrijedi

$$|f(x_n)| \leq m_1 \varepsilon.$$

Ovaj uvjet možemo provjeriti u **svakoj** iteraciji.