Numerička matematika
12. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.pmf.unizg.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 jednadžbi:
  - Općenito o iterativnim metodama.
  - Brzina konvergencije i pojam reda konvergencije.
  - Metoda raspolavljanja — bisekcije.

Informacije — dodatna nastava (predavanja)

Dodatna nastava za zainteresirane — sljedeći tjedan:

- ponedjeljak, 20. 5., od 9:15 do 10 sati, ovdje u (101),
- tik ispred predavanja.

Tema:

- Računanje Gaussovih integracijskih formula.

Informacije

Konzultacije (službeno):

- samo za NM: ponedjeljak u 13 sati (iza predavanja),
- 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 — kolokviji, rok za zadaće

Numerička matematika je u kolokvijskom razredu A2.

- Drugi kolokvij: ponedjeljak, 27. 5. 2013., u 12 sati.
- Popravni kolokvij: ponedjeljak, 10. 6. 2013., u 12 sati.

Uputa: "izbjegnite" popravni — obavite to ranije!

Rok za predaju zadaća je

- dan drugog kolokvija, do početka kolokvija.

Aplikacija se tada "zatvara za javnost" — bodovi su konačni.

Informacije

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Tamo su kompletna predavanja od prošlih 5 godina, 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 dva demonstratora:

- Mario Berljafa
  - termini: utorak, 9–10 i petak, 12–13.
  - e–mail: `mberljaf@student.math.hr`
- Marin Bužančić
  - termin: utorak, 16–18.
  - e–mail: `buzancic@student.math.hr`

Demosi lijepo mole da im se najavite mailom bar dan ranije!

- Sastanak za demonstrature je pred oglasnom pločom (bar zasad).

Gaussove integracijske formule

Gaussove integracijske formule — ponavljanje

Gaussova integracijska ili kvadraturna 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

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

Čvorovi Gaussovih integracijskih formula

U nastavku, detaljnije analiziramo neka bitna svojstava 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 $[a, b]$,

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

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 $j = 1, \ldots, n$, polinomi Lagrangeove baze na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$ (stupanj od ℓ_j je $n - 1$).

Za polinom ℓ_j u čvoru x_k vrijedi

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

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

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

Pozitivnost težina u Gaussovim formulama

Onda je očito da vrijedi

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

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

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

zbog pozitivnosti podintegralne funkcije na desnoj strani.

Time je dokazana pozitivnost težina w_k u Gaussovim 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 Gaussovim formulama),
- jer egzaktno integriraju polinome ℓ_k^2, za $k = 1, \ldots, n$.

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

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

Iz dokaza pozitivnosti težina odmah dobivamo i “proširenu” relaciju

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

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

Konvergencija Gaussovih formula

Tvrdnja. Ako je $[a, b]$ konačni interval, tada Gaussove formule konvergiraju za bilo koju neprekidnu funkciju f, tj. za svaku funkciju $f \in C[a, b]$ vrijedi

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

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

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

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

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

Konvergencija Gaussovih formula

Zbog polinomnog stupnja egzaktnosti $d = 2n - 1$, odmah vidimo da je $E_n(\hat{p}_{2n-1}) = 0$. Zatim, redom, dobivamo

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

Konvergencija Gaussovih formula

Sad iskoristimo da su težinski koeficijenti w_k pozitivni u Gaussovim formulama. Zato je $|w_k| = w_k$, odakle slijedi

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

Na kraju, uočimo još da je (egzaktna integracija konstante 1)

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

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

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

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

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

zbog egzaktne integracije konstante 1. Međutim, apsolutne vrijednosti težina neograničeno rastu, kad n raste, tako da

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

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 $x_1, \ldots, x_n$.

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 $x_1, \ldots, x_n$,
- 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 $x_1, \ldots, x_n$,

- 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 $x_1, \ldots, x_n$ 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:

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

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

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

Hermiteova interpolacija — ponavljanje

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

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

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

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

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

Hermiteova interpolacija — ponavljanje

Polinome Hermiteove baze možemo eksplicitno izraziti u obliku

$$h_{k,0}(x) = [1 - 2(x - x_k)\ell_k'(x_k)]\,\ell_k^2(x)$$

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

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

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 $x_1, \ldots, x_n$ međusobno različite, onda su polinomi

- ℓ_k, za $k = 1, \ldots, n$, — baza u prostoru $\mathcal{P}_{n-1}$,
- $h_{k,0}$, $h_{k,1}$, za $k = 1, \ldots, n$, — 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

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

Dakle, greška e_h ima dvostruke nultočke u točkama $x_1, \ldots, x_n$.

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 $x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ 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 $x_1, \ldots, x_n$.

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

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

ali nam to neće trebati za Gaussovu integraciju.

Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Integracijom Hermiteovog interpolacijskog polinoma

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

dobivamo "novu" integracijsku formulu oblika

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

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 $k = 1, \ldots, n$. 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 $k = 1, \ldots, n$.

Integracijske formule s derivacijama u čvorovima

Ovakve integracijske formule

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

"sliče" 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 $x_1, \ldots, x_n$,

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

Greška formule I_n' s derivacijama u čvorovima

Greška $E_n'(f)$ integracijske formule $I_n'(f)$ je

$$E_n'(f) = \int\limits_a^b w(x)\big(f(x) - h_{2n-1}(x)\big)\,dx = \int\limits_a^b w(x)e_h(x)\,dx,$$

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

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

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 $x_1, \ldots, x_n$, 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 Gaussovim 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 $k = 1, \ldots, n$, dobili bismo

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

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

$$w_k' = 0, \quad k = 1, \ldots, n,$$

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

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

Dokaz. Koristimo eksplicitni izraz za težine u formuli I_n'

$$w_k' = \int_a^b w(x)\,(x - x_k)\,\ell_k^2(x)\,dx, \qquad k = 1, \ldots, n,$$

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

Ove polinome možemo izraziti preko polinoma čvorova ω_n

$$\ell_k(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_k)\,\omega_n'(x_k)}, \qquad k = 1, \ldots, n,$$

pa je

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

Kad tu formulu uvrstimo u izraz za težine, dobivamo

$$w'_k = \frac{1}{\omega'_n(x_k)} \int\limits_a^b w(x)\, \omega_n(x)\, \ell_k(x)\, dx, \qquad k = 1, \ldots, n,$$

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

Ako je

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

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

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

2. smjer (dovoljnost): ortogonalnost $\Longrightarrow$ 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

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

Odavde odmah slijedi i

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

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 $[a, b]$

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

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 $A_n = 1$.

Tvdnja 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 Gaussovim formulama

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

- pozitivnost težina w_k u Gaussovim integracijskim formulama.

Za težine u formuli I_n' vrijedi

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

$$w_k' = \int_a^b w(x)\,(x - x_k)\,\ell_k^2(x)\, dx, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

U izrazu za w_k iskoristimo relaciju za w_k'.

Pozitivnost težina u Gaussovim formulama

Težine w_k onda možemo napisati u obliku

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

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

U Gaussovim formulama je $w_k' = 0$, pa izlazi poznata formula

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

zbog pozitivnosti podintegralne funkcije na desnoj strani. ■

Računanje čvorova i težina u Gaussovim 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 $k = 1, \ldots, n$.

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 jednadžbi 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 $2n$ jednadžbi s $2n$ nepoznanica,

iz uvjeta egzaktne integracije na toj bazi.

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

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

Međutim, to je loš pristup!

Sustav jednadžbi 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 polinoma).

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:

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

Uočite "pomak" u rekurziji — rekurzija starta od nule!

Rekurzija za monične ortogonalne polinome

Rekurzija je

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

Po definiciji, prva dva polinoma su

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

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

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

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

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 $x_1, \ldots, x_n$ 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

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

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

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

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

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

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

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 $e_n = (0, \ldots, 0, 1)^T$ 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 $x_1, \ldots, x_n$.

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 $D_n^{-1} T_n D_n = J_n$, pri čemu je

$$D_n = d_0 D_n' = d_0 \cdot \mathrm{diag}(1, \sqrt{\beta_1}, \sqrt{\beta_1 \beta_2}, \ldots, \sqrt{\beta_1 \cdots \beta_{n-1}}),$$

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

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

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

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

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

Ovoj rekurziji odgovara Jacobijeva matrica J_n.

Svojstveni vektori Jacobijeve matrice J_n

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

Za bilo koju nultočku x_k polinoma $\widetilde{p}_n$, iz matričnog zapisa rekurzije slijedi

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

gdje je

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

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

Diskretna ortogonalnost ortogonalnih polinoma

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

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

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

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

Kad se ova relacija raspiše, dobivamo

- diskretnu ortogonalnost polinoma $\widetilde{p}_0, \widetilde{p}_1, \ldots, \widetilde{p}_{n-1}$
- u nultočkama prvog sljedećeg ortogonalnog polinoma $\widetilde{p}_n$,

i to vrijedi za svaki $n \in \mathbb{N}$.

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

Svojstveni vektori $\widetilde{z}_k$ matrice J_n

- nisu normirani, tj. vrijedi $\|\widetilde{z}_k\| \neq 1$,

već su skalirani tako da im je prva komponenta jednaka 1

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

Ako želimo ortonormiranu bazu svojstvenih vektora, možemo ih normirati,

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

i onda vrijedi

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

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

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

Za prve komponente vektora v_k ortonormirane baze onda vrijedi

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

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

Ova veza je korisna u praksi:

- Ako numerički računamo svojstvene vektore matrice J_n,
- uvijek, kao rezultat, dobivamo ortonormiranu bazu $v_1, \ldots, v_n$.

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

Računanje težina Gaussovih formula

Za računanje težina w_k u Gaussovim formulama koristimo

- ortogonalnost polinoma $\widetilde{p}_0, \ldots, \widetilde{p}_{n-1}$,
- i uvjete egzaktne integracije tih istih polinoma.

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

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

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

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

Računanje težina Gaussovih formula

Ovaj linearni sustav za težine $w_1, \ldots, w_n$ možemo zapisati u vektorskoj notaciji, preko svojstvenih vektora $\widetilde{z}_j$, u obliku

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

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

Ovu relaciju skalarno pomnožimo s vektorom $\widetilde{z}_k$. Izlazi

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

Sad iskoristimo ortogonalnost svojstvenih vektora

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

Računanje težina Gaussovih formula

Dobivamo da je

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

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

Time smo pokazali da za težine vrijedi

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

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 $v_1, \ldots, v_n$,
- $O(n^2)$ — ako računamo samo svojstvene vrijednosti x_k, a elemente $\widetilde{p}_j(x_k)$ svojstvenih vektora $\widetilde{z}_1, \ldots, \widetilde{z}_n$ 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 jednadžbe 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 Legendreovih polinoma P_n definiranih tzv. 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

$$
\begin{aligned}
w_k &= \frac{2(1-x_k^2)}{[nP_{n-1}(x_k)]^2} = \frac{2(1-x_k^2)}{[(n+1)P_{n+1}(x_k)]^2} \\
&= \frac{2}{nP_n'(x_k)\,P_{n-1}(x_k)} = -\frac{2}{(n+1)P_n'(x_k)\,P_{n+1}(x_k)} \\
&= \frac{2}{(1-x_k^2)\,[P_n'(x_k)]^2}, \qquad k = 1, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

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 Laguerreovih polinoma $\widetilde{L}_n$ definiranih Rodriguesovom formulom

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

Gauss–Laguerreove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

$$w_k = \frac{[(n-1)!]^2 x_k}{[n\widetilde{L}_{n-1}(x_k)]^2} = \frac{(n!)^2 x_k}{[\widetilde{L}_{n+1}(x_k)]^2}$$

$$= -\frac{[(n-1)!]^2}{\widetilde{L}_n'(x_k)\,\widetilde{L}_{n-1}(x_k)} = \frac{(n!)^2}{\widetilde{L}_n'(x_k)\,\widetilde{L}_{n+1}(x_k)}$$

$$= \frac{(n!)^2}{x_k[\widetilde{L}_n'(x_k)]^2}, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

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 Hermiteovih 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

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

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

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

Gauss–Čebiševljeve formule

Sve težine u Gaussovoj formuli su jednake

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

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

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

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

$$f(x) = 0.$$

Takve točke x zovu se

- rješenja ili korijeni pripadne jednadžbe,
- 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 funkcija na $[a, b]$

- i u rubovima vrijedi $f(a) \cdot f(b) < 0$,

onda f sigurno ima nultočku na $[a, b]$ — čak unutar (a, b).

Izoliranost nultočaka

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

- takav da je α jedina nultočka od f unutar tog kruga.

U protivnom, kažemo da je nultočka neizolirana. ■

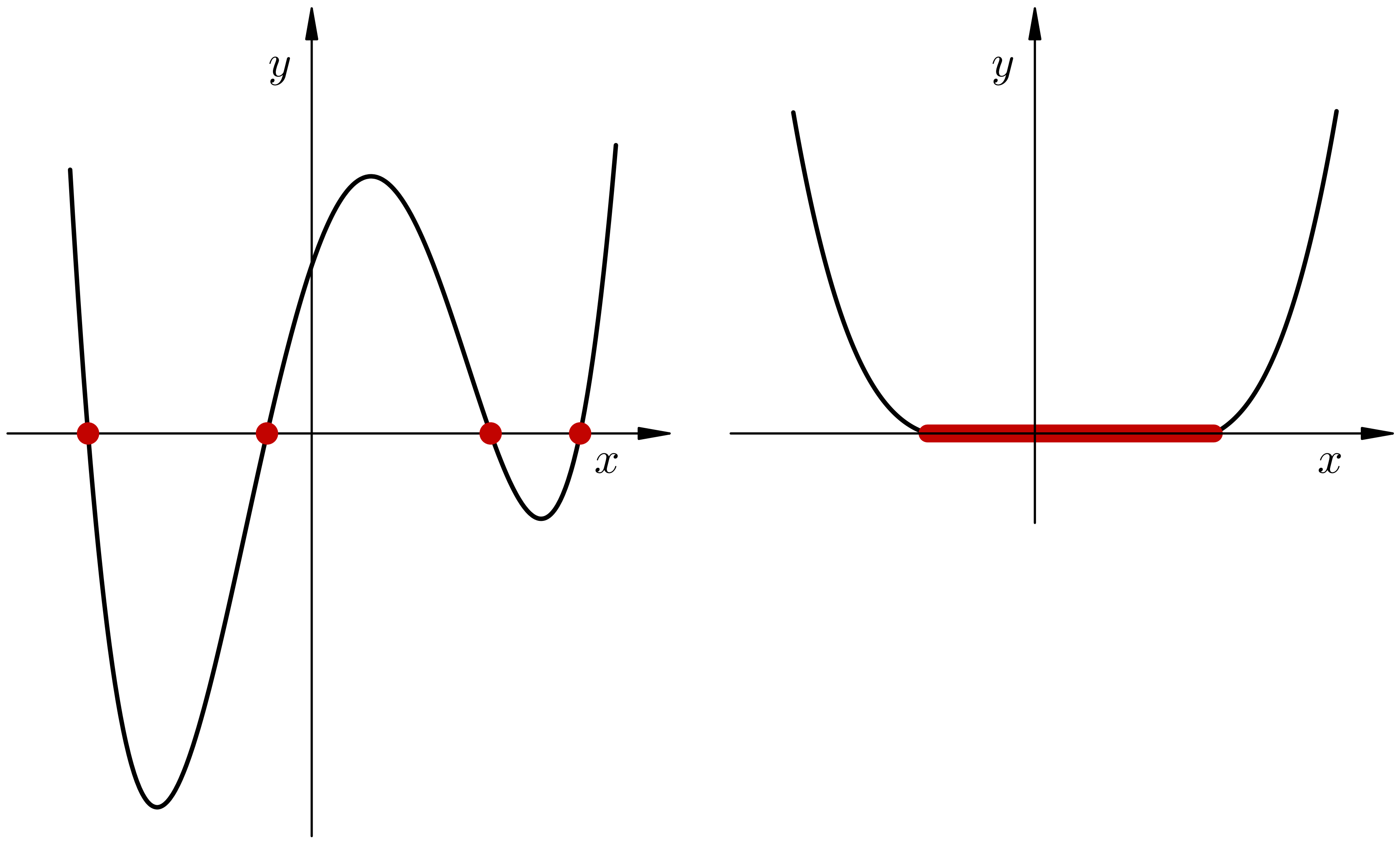
Kod neizoliranih nultočaka postoji problem konvergencije metoda za nalaženje nultočaka (lokalna nejedinstvenost).

Odsad nadalje, pretpostavljamo da f ima samo izolirane nultočke.

Na sljedećoj stranici su primjeri funkcije s

- izoliranim nultočkama (lijevo),
- neizoliranim nultočkama (desno).

Izoliranost nultočaka



Računanje nultočke na zadanu točnost

Traženje nultočki na zadanu točnost sastoji se od dvije faze:

1. Izolacija 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 (ako/kad konvergiraju).

Uobičajeno:

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

Brzina konvergencije

Definirajmo sada brzinu konvergencije nekog niza "iteracija". Te iteracije mogu, 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, gdje je $p \geq 1$,

ako je p najveći broj takav da vrijedi

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

za neki $c > 0$.

Ako je $p = 1$, kažemo da niz konvergira linearno prema α. U tom je slučaju nužno da je $c < 1$ (za konvergenciju niza), 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 nultočaka funkcije je metoda bisekcije ili raspolavljanja.

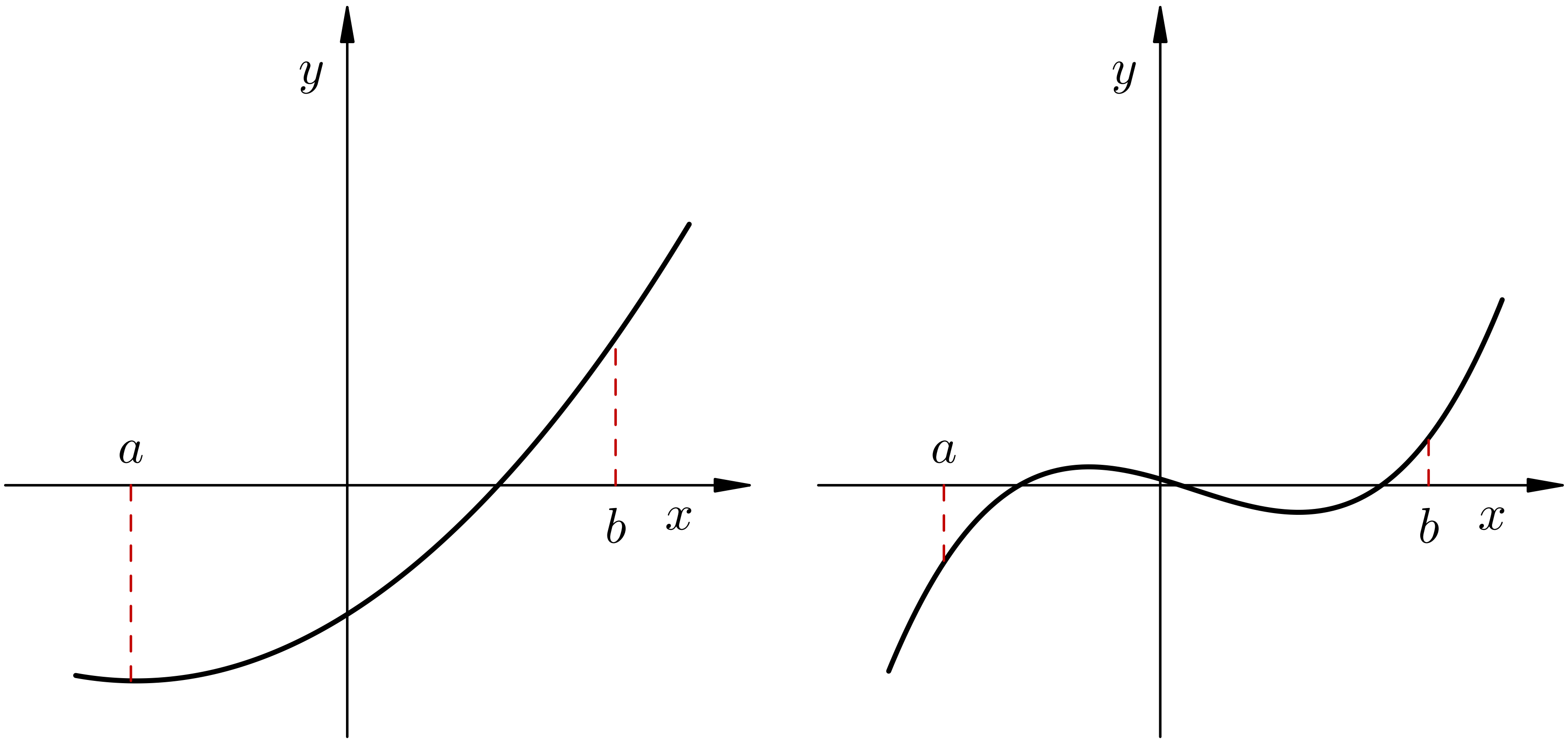
- Osnovna ili startna pretpostavka za početak algoritma raspolavljanja je neprekidnost funkcije f na intervalu $[a, b]$, s tim da u rubovima intervala vrijedi

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

To znači da f ima barem jednu nultočku u intervalu $[a, b]$. Međutim, f može imati i više nultočaka u intervalu $[a, b]$. Na sljedećoj stranici su primjeri kad

- f ima točno jednu nultočku (lijevo),
- više nultočaka, točnije, neparan broj njih, brojeći kratnost (desno).

Uvodno o metodi raspolavljanja



Uvodno o metodi raspolavljanja

Naravno, ako je $f(a) \cdot f(b) = 0$, onda f sigurno ima nultočku u (barem) jednom rubu intervala — a ili b. Provjerom $f(a) = 0$, odnosno, $f(b) = 0$, otkrivamo nultočke u rubovima.

Na kraju, ako je

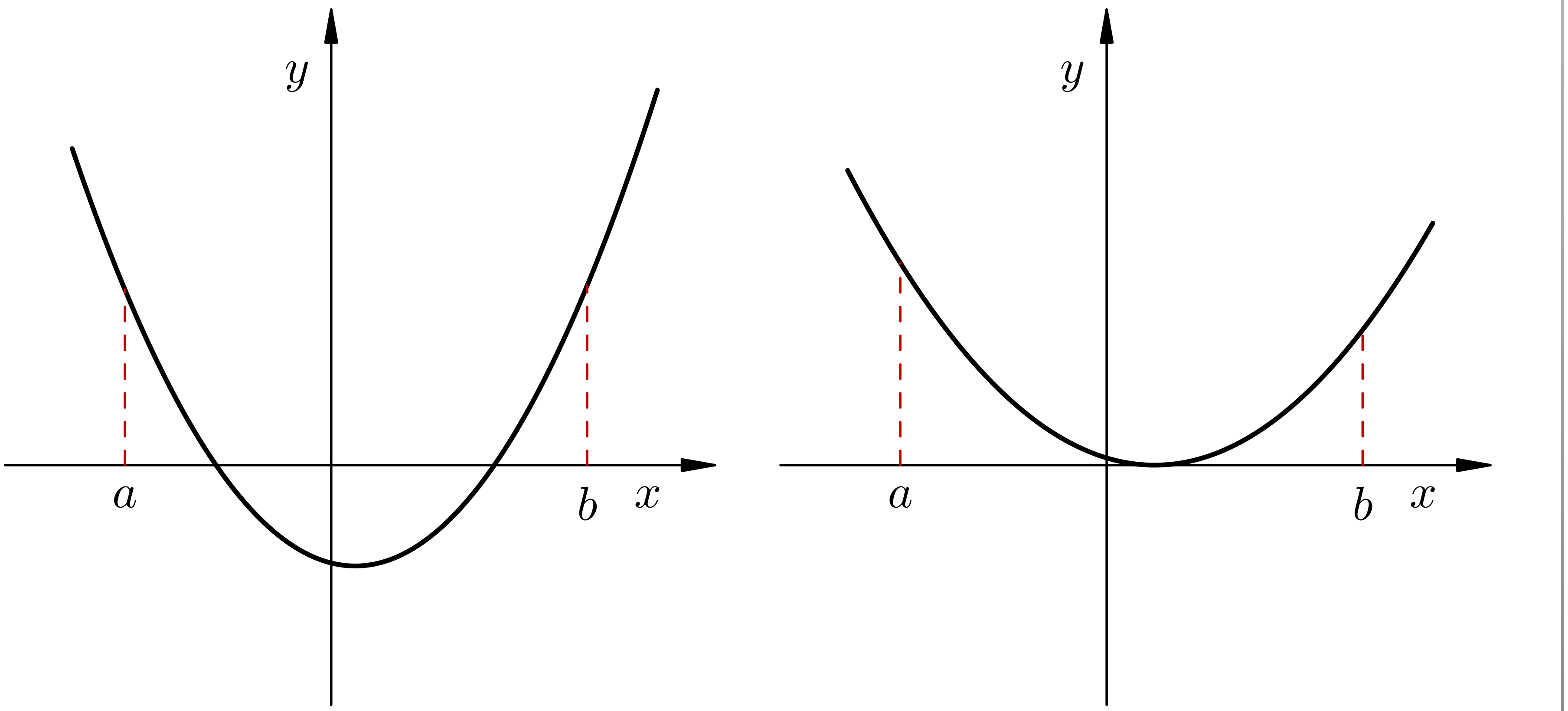
$$f(a) \cdot f(b) > 0,$$

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

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

- 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 (nema promjene predznaka).

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, počev od intervala $[a_{n-1}, b_{n-1}]$ koji sigurno sadrži neku nultočku α,

- konstruiramo interval $[a_n, b_n]$ kojemu je
- duljina $=$ polovina duljine prethodnog intervala,
- ali tako da je nultočka α 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

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

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 $[a_{n-1}, x_{n-1}]$ — lijeva polovina,
- $f(a_{n-1}) \cdot f(x_{n-1}) > 0$ znači da je barem jedna nultočka unutar $[x_{n-1}, b_{n-1}]$ — desna polovina.

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

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

pa mora biti

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

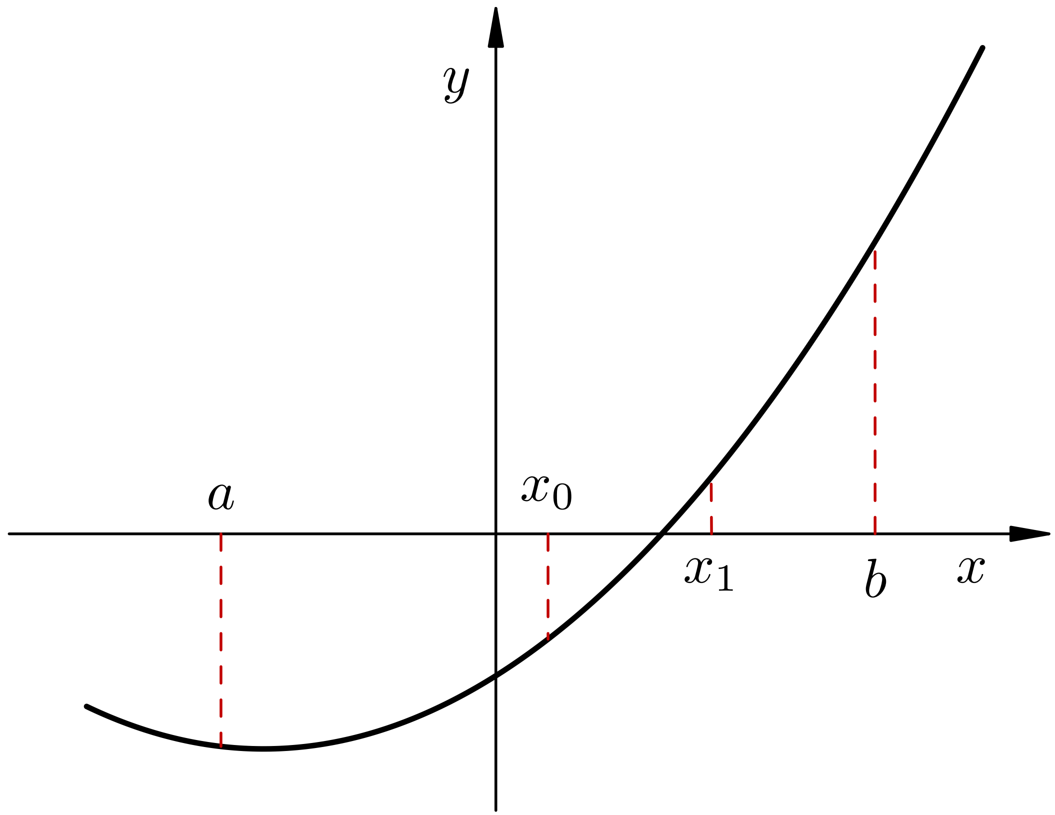
Dakle, nultočka se onda mora nalaziti u intervalu $[x_{n-1}, b_{n-1}]$.

Za svaki korak metode raspolavljanja, očito, vrijedi zaključak

$$\alpha \in [a_{n-1}, b_{n-1}] \Longrightarrow \alpha \in [a_n, b_n].$$

Metoda raspolavljanja — grafički

Grafički, metoda raspolavljanja izgleda ovako



Algoritam

Metoda raspolavljanja — za zadanu točnost ε:

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

Pedantni algoritam "čuva" i stare vrijednosti funkcije.

Konvergencija i zaustavljanje algoritma

Tvrdnja. Ako vrijede startne pretpostavke na f za metodu raspolavljanja, dobiveni niz x_n će konvergirati prema nekoj nultočki α iz intervala $[a, b]$.

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

Ocjena greške

Iz konstrukcije metode raspolavljanja, lako se izvodi ocjena pogreške n-te aproksimacije x_n nultočke α. Vrijedi:

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

$$= \cdots = \frac{1}{2^{n+1}}\,(b - a).$$

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 s $c = 1/2$, ali se zdesna ne pojavljuje $|\alpha - x_0|$. Ipak, desna strana daje naslutiti da će konvergencija biti dosta spora (bit po iteraciji).

Ocjena greške i broj koraka

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 zadanu 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 i broj koraka

a zatim, logaritmiranje daje

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

odnosno,

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

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

Dinamička ocjena greške

Prvo iskoristimo da je α nultočka, tj. da je $f(\alpha) = 0$, 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

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

Dinamička 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.

- Iteracije smijemo "prekinuti" čim je ovaj uvjet ispunjen,
- neovisno o unaprijed izračunatom potrebnom broju iteracija.

Napomena. Pretpostavka $m_1 > 0$ znači da f' nema nultočku na $[a, b]$, tj. da je funkcija f monotona na $[a, b]$.