

Numerička matematika

11. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.pmf.unizg.hr/~singer`

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Numerička integracija (nastavak):
 - Richardsonova ekstrapolacija i Rombergov algoritam.
 - Primjeri za Rombergov algoritam.
 - Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti.
 - Gauss–Christoffel formule.
 - Gauss–Radau formule.
 - Gauss–Lobatto formule.
 - Primjer za težinske Newton–Cotesove i Gaussove formule.
 - Osnovna svojstva Gaussovih formula.
 - Konvergencija Gaussovih formula, simetrija.
 - Gaussove formule i Hermiteova interpolacija.
 - Računanje čvorova i težina Gaussovih formula.

Informacije

Konzultacije:

- samo za NM: utorak u 15 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

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Tamo su kompletna predavanja iz prošlih 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

Rombergov algoritam

Općenito o Rombergovom algoritmu

Pri izvodu Rombergovog algoritma koristimo se sljedećim principima:

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

Ponovljena primjena ovog principa zove se Richardsonova ekstrapolacija.

Za početak, treba objasniti

- što je to asimptotski razvoj.

Asimptotski razvoj

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

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

red smo aproksimirali **konačnom** parcijalnom sumom

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog niza

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

gdje su koeficijenti

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

a ostatak je

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

Ovdje su B_{2i} Bernoullijevi brojevi,

$$B_i = -\int_0^1 B_i(x) dx, \quad i \geq 1,$$

Euler–MacLaurinova formula

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

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

Dokaz je u klasičnim udžebnicima numeričke analize. ■

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

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

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

Eliminacija člana greške

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

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

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

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

Ideja: Ako je funkcija f dovoljno glatka,

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

Time smo dobili **novi** integracijski niz $I_2^{(1)}, I_4^{(1)}, I_8^{(1)}, \dots$

Njegova je greška

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

Sličan argument kao i prije možemo upotrijebiti i dalje.

Eliminirajmo **prvi** član pogreške iz $I_n^{(1)}$ i $I_{n/2}^{(1)}$,

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

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

Tada je

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

Izvod Rombergovog algoritma

odnosno

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

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

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

Induktivno, nastavljanjem postupka, dobivamo Richardsonovu ekstrapolaciju

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

Izvod Rombergovog algoritma

Pritom je greška jednaka

$$\begin{aligned} E_n^{(k)} &= I - I_n^{(k)} = \frac{d_{2k+2}^{(k)}}{n^{2k+2}} + \dots \\ &= \beta_k (b - a) h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi), \quad a \leq \xi \leq b. \end{aligned}$$

Sada možemo složiti Rombergovu tablicu

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

Poredak računanja

Poredak računanja u tablici je sljedeći:

$$\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ 2 & 3 & & \\ 4 & 5 & 6 & \cdot \\ 7 & 8 & 9 & \dots \end{array}$$

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

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

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

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

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

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

Primjeri za Rombergov algoritam

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

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

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

$$\int_0^1 e^x dx, \quad \int_0^1 x^{3/2} dx, \quad \int_0^1 \sqrt{x} dx$$

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

Eksponencijalna funkcija

Eksponencijalna funkcija ima **beskonačno** mnogo **neprekidnih** derivacija na $[0, 1]$, pa bi se računanje integrala moralo ponašati po predviđanju.

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

$$I_5 = 1.71828182845904524$$

$$I = e - 1 = 1.71828182845904524$$

$$I - I_5 = 0.$$

Eksponecijalna funkcija

Omjeri pogrešaka u stupcima su

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

pa uz malo “kreativnog vida” vidimo da su omjeri prema predviđanju 4, 16, 64, 256, 1024, ...

Eksponencijalna funkcija

Eksponenti omjera pogrešaka su

0	1.0000					
1	1.9823	1.0000				
2	1.9955	3.9682	1.0000			
3	1.9989	3.9920	5.9650	1.0000		
4	1.9997	3.9980	5.9912	7.9642	1.0000	
5	1.9999	3.9995	5.9978	7.9910	9.9666	1.0000

pa ponovno čitamo da su eksponenti omjera pogrešaka
2, 4, 6, 8, 10, ...

Funkcija $x^{3/2}$

Funkcija $f(x) = x^{3/2}$ ima **neograničenu drugu** derivaciju u 0,

- pa bi “**zanimljivo ponašanje**” moralo početi već u **drugom** stupcu Rombergove tablice, jer
- za **trapez** je funkcija **dovoljno glatka** za ocjenu pogreške.

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

$$I_{15} = 0.400000000000004512$$

$$I = 2/5 = 0.400000000000000000$$

$$I - I_{15} = -0.000000000000004512.$$

Primijetite da je broj intervala poprilično **velik!**

Funkcija $x^{3/2}$

Što je s omjerima pogrešaka?

0	1.0000					
1	3.7346	1.0000				
2	3.8154	5.4847	1.0000			
3	3.8721	5.5912	5.6484	1.0000		
4	3.9112	5.6331	5.6559	5.6566	1.0000	
⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	
15	3.9981	5.6569	5.6569	1.0000

Nakon prvog stupca omjeri pogrešaka su se **stabilizirali**.

Funkcija $x^{3/2}$

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

0	1.0000					
1	1.9010	1.0000				
2	1.9318	2.4554	1.0000			
3	1.9531	2.4832	2.4978	1.0000		
4	1.9676	2.4939	2.4998	2.4999	1.0000	
⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	
15	1.9993	2.5000	2.5000	1.0000

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

Funkcija \sqrt{x}

Situacija s funkcijom $f(x) = \sqrt{x}$ mora biti još **gora**, jer ona ima **neograničenu** **prvu** derivaciju u **0**.

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

$$I_{15} = 0.66666665510837633$$

$$I = 2/3 = 0.66666666666666666667$$

$$I - I_{15} = 0.00000001155829033.$$

Funkcija \sqrt{x}

Omjeri pogrešaka u tablici su:

0	1.0000						
1	2.6408	1.0000					
2	2.6990	2.8200	1.0000				
3	2.7393	2.8267	2.8281	1.0000			
4	2.7667	2.8281	2.8284	2.8284	1.0000		
⋮	⋮	⋮			⋮	⋮	
15	2.8271	2.8284	2.8284	1.0000

Funkcija \sqrt{x}

Pripadni eksponenti su

0	1.0000						
1	1.4010	1.0000					
2	1.4324	1.4957	1.0000				
3	1.4538	1.4991	1.4998	1.0000			
4	1.4681	1.4998	1.5000	1.5000	1.0000		
⋮	⋮	⋮			⋮	⋮	
15	1.4993	1.5000	1.5000	1.0000

Produljena trapezna formula još uvijek konvergira, ali konvergencija više nije $O(h^2)$, već samo $O(h^{3/2})$.

Zadaci

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

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

Provjerite što se događa u Rombergovom algoritmu **nakon** ove supstitucije.

Ako u posljednjem integralu promijenimo **granice** integracije

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

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

Druge oznake

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

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

Sama tablica ima oblik

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

Još malo o Rombergovoj tablici

Tvrdnja. Drugi stupac Rombergove tablice odgovara produljenoj **Simpsonovoj** formuli — redom, s $2, 4, 8, 16, \dots$ podintervala.

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

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

Iz **trapezних formula** za n i $n/2$ podintervala,

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

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

Još malo o Rombergovoj tablici

uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

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

što je **Simpsonova formula** s n podintervala.

Zadatak

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

Na sreću, odgovor je **ne**!

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

$$I_{10} = 2.74680153389003183$$

$$I = 2.74680153389003172$$

$$I - I_{10} = -0.0000000000000000011.$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

Podintegralna funkcija je **relativno brzo oscilirajuća** i ima **17** “grba”.

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

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Rombergova tablica:

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

Rezultat (sa svim znamenkama):

$$I_7 = 0.03744821953512704$$

$$I = 0.03744822190397537$$

$$I - I_7 = 0.00000000236884834.$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

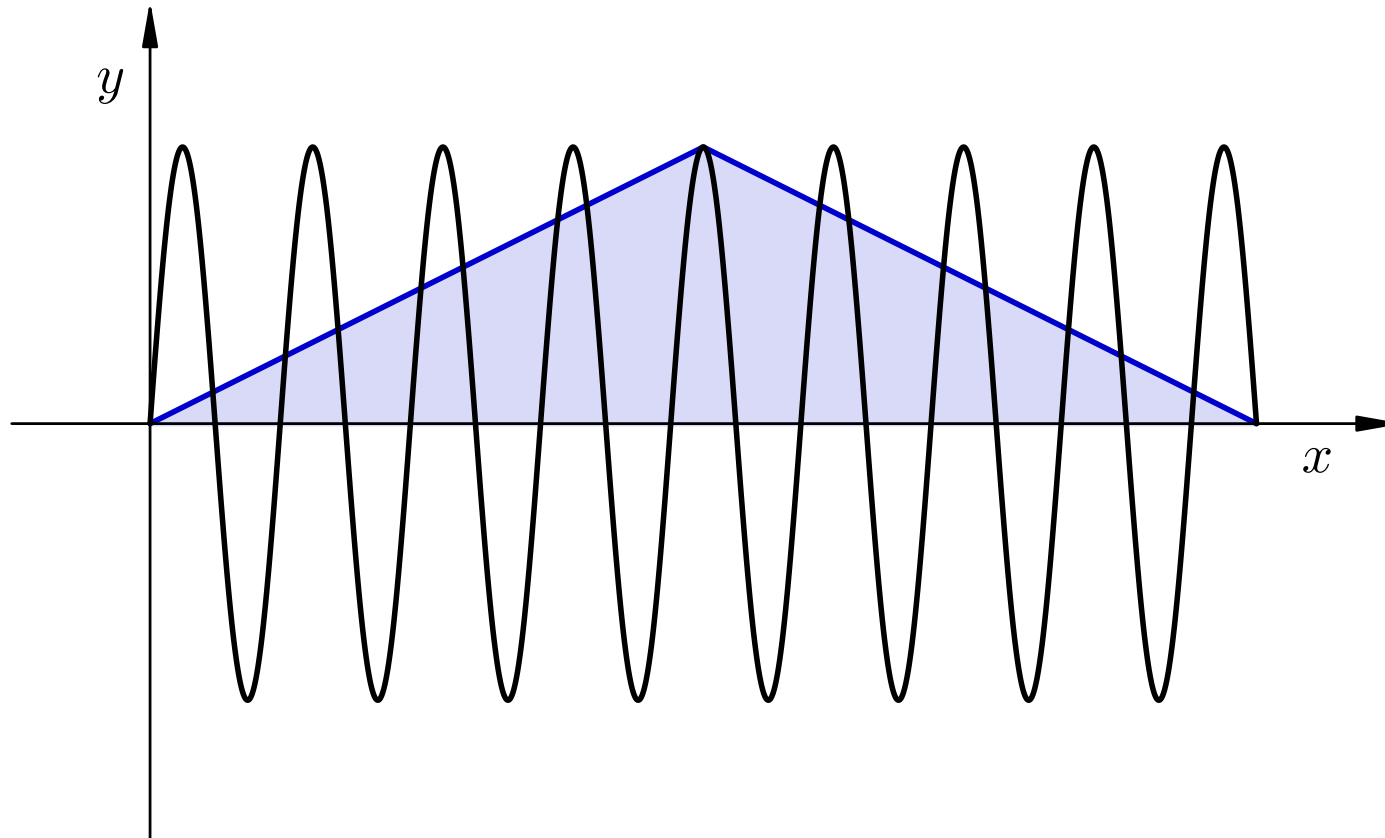
Što je razlog **stabilizacije** oko **jedne**, pa oko **druge** vrijednosti?

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

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

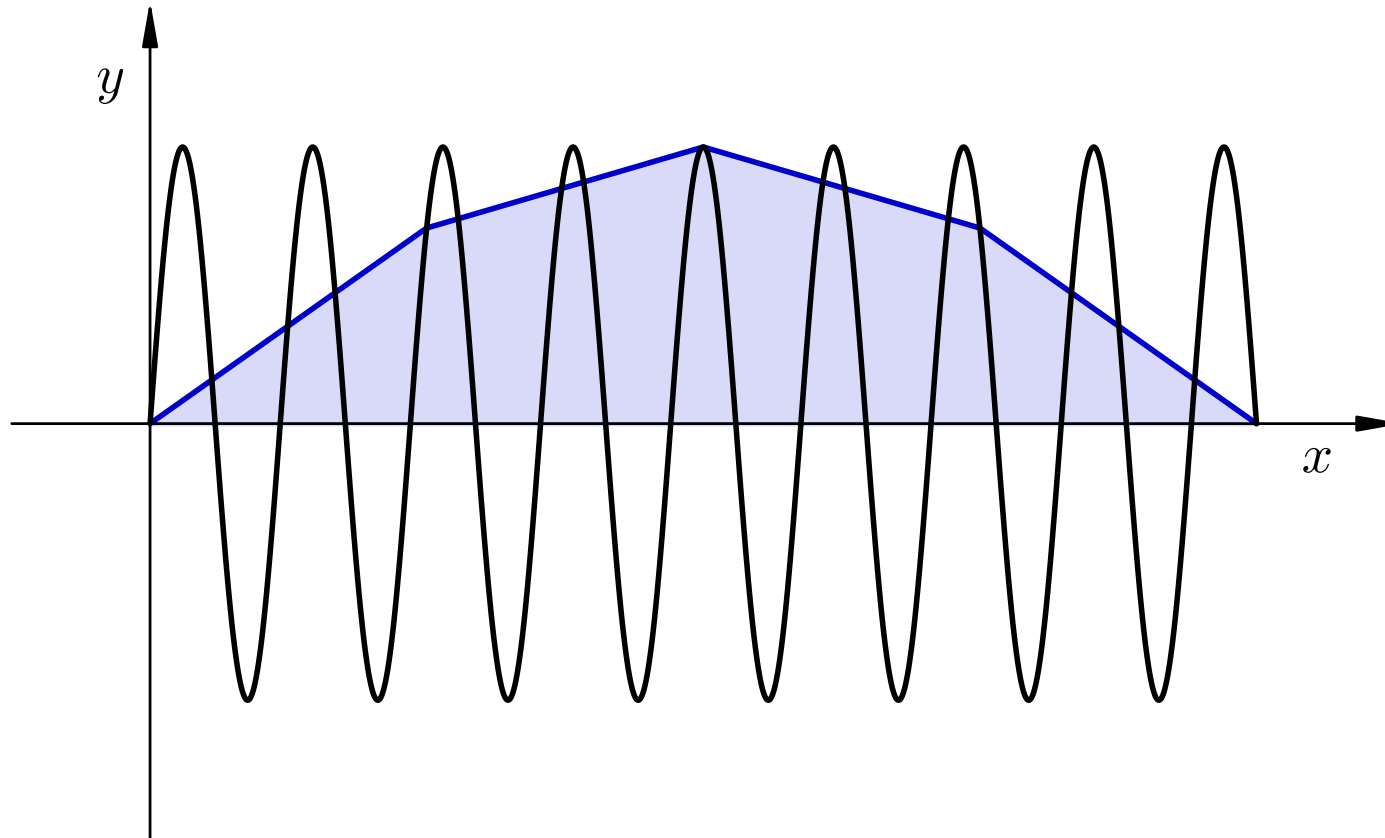
- stavili smo **skoro** jednu točku po grbi
- i trapezna formula je počela “**prepoznavati oblik**” podintegralne funkcije.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



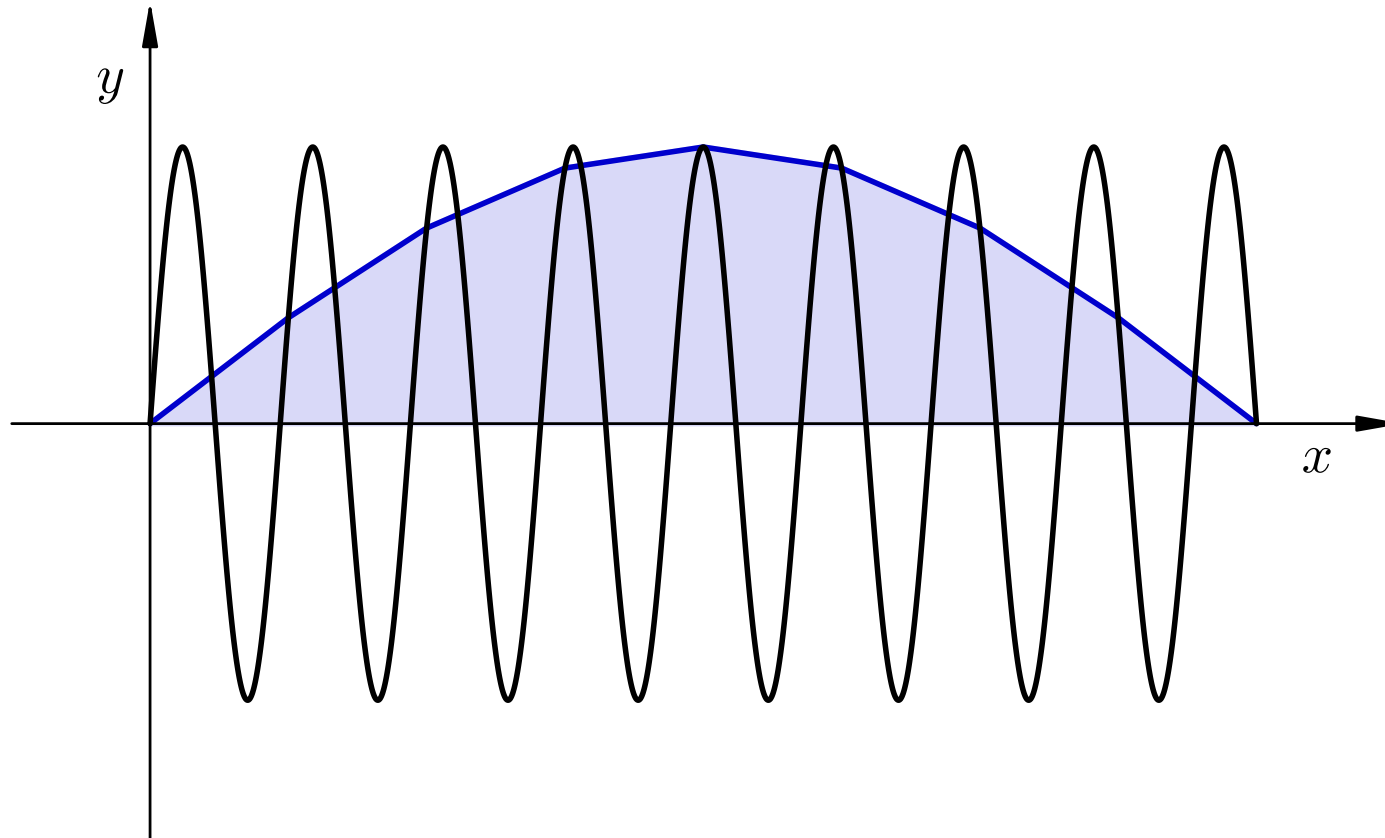
Produljena trapezna formula s 2 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



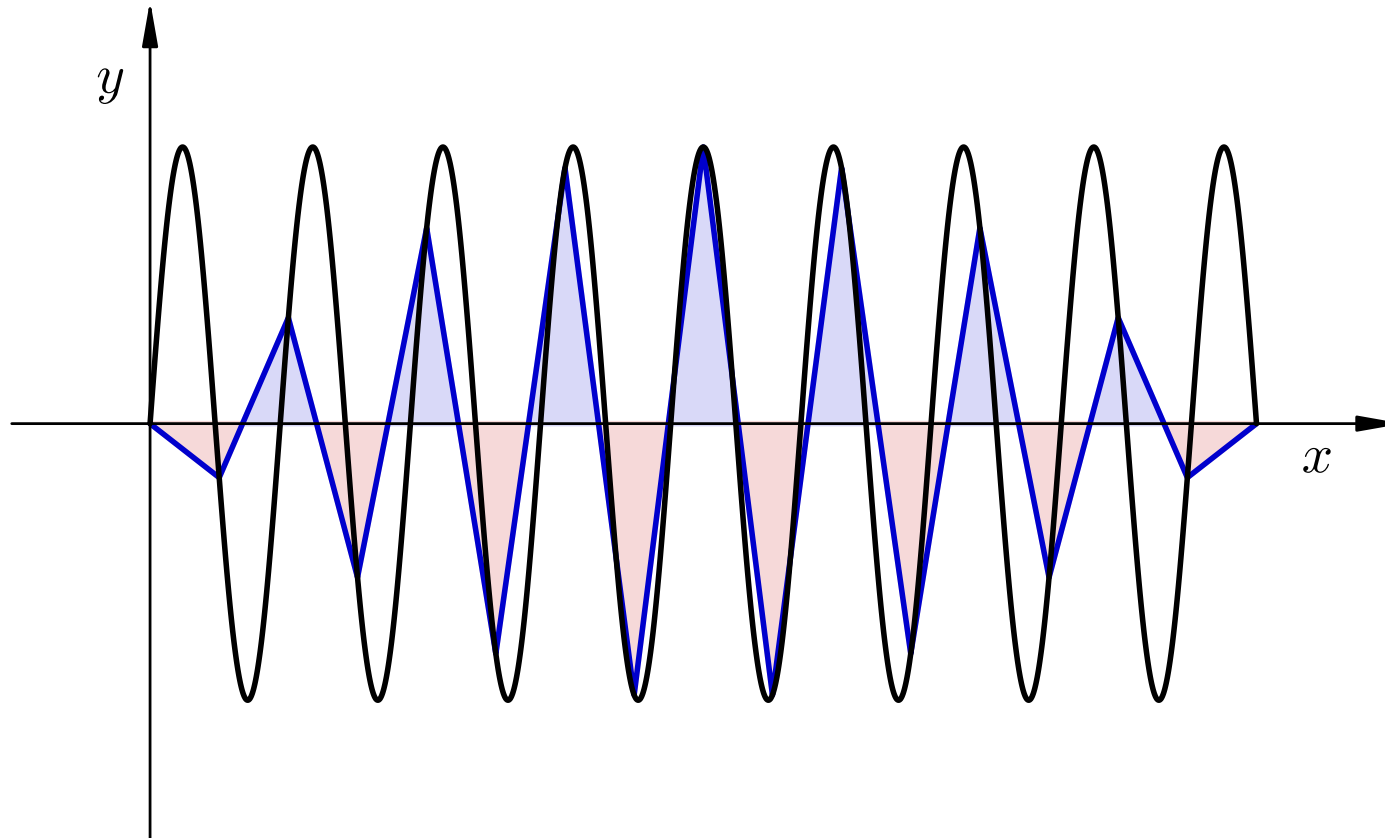
Produljena trapezna formula s 4 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula s 8 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula sa **16** podintervala.

Zadatak

Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

Opres, ako u Rombergovom algoritmu

🚫 ne zahtijevate stavljanje dovoljnog broja podintervala, dobiveni rezultat bit će pogrešan!

Trapez može biti brži od Romberga

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

U ovom primjeru događa se zanimljiv fenomen:

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

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

Trapez može biti brži od Romberga

Početni dio Rombergove tablice:

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

Crveno označeni brojevi imaju sve znamenke točne.

Rombergov algoritam daje netočniju aproksimaciju

$$I_5 = 0.56515914375273593.$$

Trapez može biti brži od Romberga

Sporost Rombergovog algoritma posljedica je činjenice da

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

Stvarno, za produljenu **trapeznu** formulu **ne vrijedi** isti razvoj pogreške (puno je **točnija** — zbog periodičnosti funkcije f , za koeficijente u **Euler–MacLaurin**ovoj formuli vrijedi $d_{2i} = 0$)!

Rješenje problema:

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

Teorija integracijskih formula — nastavak

Težinske integracijske formule — sažetak

Do sada smo radili **integracijske** formule oblika

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

(ispuštamo gornje indekse m) u kojima su

- **čvorovi** integracije x_0, \dots, x_m bili unaprijed **zadani/fiksni**,
- a **težinske** koeficijente w_0, \dots, w_m određivali smo iz uvjeta **egzaktnosti** na vektorskom prostoru **polinoma** \mathcal{P}_d što **većeg** stupnja d (tzv. **Newton–Cotesove** formule).

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

Indeks ili red m formule = “očekivani” stupanj egzaktnosti.

Težinske integracijske formule — sažetak

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

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

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

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

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

Iz tradicionalnih razloga, zbog veze s

- **ortogonalnim** polinomima i njihovim **nultočkama**,
- takve formule se malo **drugačije** označavaju!

Promjena oznaka za integracijske formule

Promjene u oznakama su:

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

Težinska integracijska ili kvadratura formula onda ima sljedeći oblik:

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

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

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

Težinska funkcija u integracijskoj formuli

Pretpostavljamo da je **težinska** funkcija w

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

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

- funkcija f **polinom**, neovisno o stupnju.

To postizemo **zahtjevom** da svi **momenti** težinske funkcije w

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

postoje (kao integrali) i da su **konačni**.

Takve težinske funkcije w zovemo **polinomno** dopustivima.

Nadalje pretpostavljamo da je w takva!

Interpolacijske težinske kvadrature formule

Uz ove pretpostavke i oznake,

• za bilo kojih n različitih čvorova x_1, \dots, x_n ,
težinska integracijska ili kvadratura formula

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

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

• ako i samo ako je interpolacijska,
tj. dobivena je kao

• egzaktni integral interpolacijskog polinoma funkcije f u
čvorovima x_1, \dots, x_n .

Težine u interpolacijskim formulama

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

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

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

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

Uočite: Jedina šansa za to je

- “pažljiviji” izbor čvorova integracije x_k .

Naime, čim je $d \geq n - 1$,

težine w_k su nužno određene prethodnom formulom, pa njih više ne možemo “birati”.

Odgovor je potvrđan i relativno jednostavan!

Za formulaciju rezultata definiramo tzv. polinom čvorova

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Teorem. Neka je ℓ zadani cijeli broj, takav da je $0 \leq \ell \leq n$.

Težinska integracijska formula

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

ima **polinomni** stupanj egzaktnosti $d = n - 1 + \ell$, **ako i samo ako** je formula **interpolacijska i**, dodatno, vrijedi

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

● Preostaje pokazati da je $d = n - 1 + \ell$ **ekvivalentno** relaciji **ortogonalnosti** za polinom ω_n .

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

Neka je $p \in \mathcal{P}_{\ell-1}$ **bilo koji** polinom stupnja najviše $\ell - 1$.

Za **produkt** $f = \omega_n p$ onda vrijedi $\omega_n p \in \mathcal{P}_{n+\ell-1}$.

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

Onda je

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

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

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

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

Egzaktnom integracijom dobivamo

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

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

🔴 **prvi** integral na **desnoj** strani je **nula**.

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Dobivamo da je

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

No, zbog $r \in \mathcal{P}_{n-1}$ i pretpostavke da je formula **interpolacijska**,
• formula I_n **egzaktno** integrira polinom r .

Zato je

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

Kad “**spojimo**” zadnje **tri** relacije, izlazi

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

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

O granicama za stupanj egzaktnosti

Nekoliko komentara na prethodni rezultat.

Relacija ortogonalnosti

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

omogućava povećanje stupnja egzaktnosti formule za ℓ ,

- s $d = n - 1$,
- na $d = n - 1 + \ell$.

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

Naime, relacija ortogonalnosti postavlja

- točno ℓ dodatnih uvjeta na čvorove x_1, \dots, x_n .

O granicama za stupanj egzaktnosti

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

S druge strane, zbog **nenegativnosti** težinske funkcije w , **mora** biti $\ell \leq n$. **Opravdanje:**

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

Dakle, $\ell = n$ je **maksimalno** povećanje stupnja egzaktnosti koje se može postići, a

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

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

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

• Gaussove ili Gauss–Christoffelove formule.

Relacija **ortogonalnosti** iz prethodnog teorema, za $\ell = n$, glasi

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

Drugim riječima, polinom čvorova ω_n (stupnja n)

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

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

Čvorovi u Gaussovima formulama

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

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

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

Zato se formule najvišeg stupnja egzaktnosti obično zovu

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

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

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

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

Težine u Gaussovima formulama

Za težine w_k znamo da vrijedi

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

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

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

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

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

Težine u Gaussovima formulama

Dobivamo izraz za težine w_k preko ortogonalnih polinoma p_n

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

Prema autoru ove formule, težine w_k u Gaussovima formulama ponekad se zovu i Christoffelovi brojevi.

Navedeni integral se može eksplicitno izračunati! O tome, kao i o ostalim svojstvima Gaussovih formula — malo kasnije.

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

● visoki, ali ne i maksimalni stupanj egzaktnosti, tj. $l < n$.

Integracijske formule s fiksnim rubovima

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

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

unaprijed **zadamo** $n - \ell$ čvorova integracije u $[a, b]$, a

- **preostalih** ℓ čvorova određujemo tako da dobijemo **maksimalni** mogući stupanj egzaktnosti $d = n - 1 + \ell$.

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

- **jedan** ili **oba ruba** intervala integracije $[a, b]$,
s tim da **zadani** rubni čvor mora biti **konačan**.

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

Neka je **lijevi** rub intervala — točka a , konačna

• i **zadana** kao čvor integracije $x_1 = a$.

Preostalih $\ell = n - 1$ čvorova određujemo tako da

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

Ove integracijske formule zovu se **Gauss–Radau** formule.

Prema prethodnom teoremu, pripadni polinom **čvorova**

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

mora zadovoljavati relaciju **ortogonalnosti** za $\ell = n - 1$

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

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

To možemo zapisati i ovako

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

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

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

Tako dobivamo “**novu**” težinsku funkciju

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

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

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

Relacija ortogonalnosti sada ima oblik

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

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

Slično ranijem, odavde dobivamo sljedeći **zaključak**:

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

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

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

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

Neka su **oba** ruba intervala — točke a i b , konačne

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

Preostala $\ell = n - 2$ čvora određujemo tako da

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

Ove integracijske formule zovu se **Gauss–Lobatto** formule.

Na potpuno isti način se dokazuje da

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

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

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

Primjer za težinske formule

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f .

Primjer. Napravimo usporedbu

- zatvorene Newton–Cotesove formule i
- Gaussove formule

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

Težinska funkcija w ima singularitet u lijevom rubu $a = 0$, ali je integrabilna na $[0, 1]$ — njezin integral je $\mu_0 = 2$.

Tražene integracijske formule glase:

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

Težinska Newton–Cotesova formula

Za Newton–Cotesovu formulu, težine w_1^{NC} i w_2^{NC} možemo izračunati iz eksplicitne formule

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

Lagrangeova baza ℓ_1 i ℓ_2 , za zadane čvorove $x_1 = 0$ i $x_2 = 1$, jednaka je

$$\ell_1(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x - 1}{0 - 1} = 1 - x,$$

$$\ell_2(x) = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x - 0}{1 - 0} = x,$$

Težinska Newton–Cotesova formula

pa imamo

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

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

Ovaj pristup ima smisla **samo** kad se polinomi ℓ_1 i ℓ_2 **lako** računaju, tj. **samo** kad su čvorovi “jednostavni”, poput 0 i 1.

Težinska Newton–Cotesova formula

Obično je puno lakše iskoristiti da Newton–Cotesova formula egzaktno integrira “jednostavnu” bazu prostora polinoma \mathcal{P}_1 .

Uvrštavanjem $f(x) = 1$, dobivamo jednadžbu

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

a uvrštavanjem $f(x) = x$, dobivamo jednadžbu

$$w_1^{NC} \cdot 0 + w_2^{NC} \cdot 1 = \int_0^1 x^{-1/2} x dx = \frac{2}{3}.$$

Odmah izlazi

$$w_2^{NC} = \frac{2}{3}, \quad w_1^{NC} = 2 - w_2^{NC} = \frac{4}{3}.$$

Težinska Newton–Cotesova formula

Tražena zatvorena Newton–Cotesova formula glasi:

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

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

Uočite da **korijenski** singularitet u **nuli** uzrokuje da

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

Gaussova formula

Gaussovu formulu najlakše je odrediti preko **ortogonalnih** polinoma. Treba nam **monični** (vodeći koeficijent $A_2 = 1$) **ortogonalni** polinom p_2 , stupnja 2, s težinom $x^{-1/2}$ na $[0, 1]$

$$p_2(x) = x^2 + a_1x + a_0.$$

Taj polinom mora biti **ortogonalan** na polinome **nižeg** stupnja.

☛ Za polinom $q_0(x) = 1$, iz $\langle p_2, q_0 \rangle = 0$, dobivamo:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^1 x^{-1/2} p_2(x) dx = \int_0^1 (x^{3/2} + a_1x^{1/2} + a_0x^{-1/2}) dx \\ &= \left(\frac{2}{5}x^{5/2} + \frac{2}{3}a_1x^{3/2} + 2a_0x^{1/2} \right) \Big|_0^1 = \frac{2}{5} + \frac{2}{3}a_1 + 2a_0, \end{aligned}$$

Gaussova formula

• Za polinom $q_1(x) = x$, iz $\langle p_2, q_1 \rangle = 0$, dobivamo:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^1 x^{-1/2} x p_2(x) dx = \int_0^1 (x^{5/2} + a_1 x^{3/2} + a_0 x^{1/2}) dx \\ &= \left(\frac{2}{7} x^{7/2} + \frac{2}{5} a_1 x^{5/2} + \frac{2}{3} a_0 x^{3/2} \right) \Big|_0^1 = \frac{2}{7} + \frac{2}{5} a_1 + \frac{2}{3} a_0. \end{aligned}$$

Sustav jednažbi za koeficijente **moničnog** polinoma p_2 je:

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

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

Gaussova formula

Rješenje tog sustava je

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

pa je ortogonalni polinom p_2

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

Čvorovi za Gaussovu integracijsku formulu su nultočke polinoma p_2 :

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

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

Gaussova formula

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

Međutim, kad imamo čvorove x_1 i x_2 , puno je lakše iskoristiti da Gaussova formula egzaktno integrira bazu polinoma iz \mathcal{P}_1 .

• Za stupanj 0, stavimo $f(x) = 1$, i dobivamo jednadžbu

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

• Za stupanj 1, stavimo $f(x) = x$, i dobivamo jednadžbu

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

Gaussova formula

Kad uvrstimo **poznate** čvorove x_1, x_2 , rješenje dobivenog linearnog sustava od dvije jednačbe za **težine** w_1^G, w_2^G je

$$w_1^G = 1 + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{5}{6}} \approx 1.30429030972509228525,$$

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

Sada je težina

🔴 w_1^G približno 1.87476 puta **veća** od težine w_2^G .

Gaussova formula

Tražena Gaussova formula glasi:

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

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

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 (ℓ_k preko p_n i x_k)

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

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. ■

Težine Gaussovih integracijskih formula

Integral u formuli za težine w_k može se eksplicitno **izračunati**.

Teorem (Izrazi za težine). U **Gaussovoj** integracijskoj formuli reda n , za težine w_k vrijede sljedeće dvije relacije

$$w_k = \frac{a_{n-1} \gamma_{n-1}}{p_{n-1}(x_k) p'_n(x_k)} = \frac{-a_n \gamma_n}{p_{n+1}(x_k) p'_n(x_k)}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Dokaz. Treba izračunati integrale za težine

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

Zbog člana $p_n(x)/(x - x_k)$, koristimo **Christoffel–Darbouxov** identitet u x i $y = x_k$, za $n - 1$ (ili za n), a zatim integriramo.

Težine Gaussovih integracijskih formula

Fiksiramo indeks k (tj. čvor x_k) i izlučimo broj $p'_n(x_k)$, pa je

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

Integral računamo iz **Christoffel–Darbouxovog** identiteta za $n - 1$. Indeks sumacije je j , zbog fiksnog k za x_k .

$$\sum_{j=0}^{n-1} \frac{p_j(x)p_j(y)}{\gamma_j} = \frac{p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)}{a_{n-1}\gamma_{n-1}(x - y)}.$$

Uvrstimo $y = x_k$ i iskoristimo da je $p_n(x_k) = 0$, pa dobijemo

$$\sum_{j=0}^{n-1} \frac{p_j(x)p_j(x_k)}{\gamma_j} = \frac{p_n(x)p_{n-1}(x_k)}{a_{n-1}\gamma_{n-1}(x - x_k)}.$$

Težine Gaussovih integracijskih formula

Pomnožimo obje strane s $w(x) p_0(x)$ i **integriramo** na $[a, b]$.

Izlazi

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{p_j(x_k)}{\gamma_j} \int_a^b w(x) p_j(x) p_0(x) dx \\ = \frac{p_{n-1}(x_k)}{a_{n-1} \gamma_{n-1}} \int_a^b w(x) p_0(x) \frac{p_n(x)}{x - x_k} dx. \end{aligned}$$

Zbog **ortogonalnosti** polinoma p_j i p_0 , na **lijevoj** strani ostaje samo član za $j = 0$, a pripadni integral je $\|p_0\|^2 = \gamma_0$, tj.

$$\frac{p_0(x_k)}{\gamma_0} \cdot \gamma_0 = \frac{p_{n-1}(x_k)}{a_{n-1} \gamma_{n-1}} \int_a^b w(x) p_0(x) \frac{p_n(x)}{x - x_k} dx.$$

Težine Gaussovih integracijskih formula

Na kraju, znamo da je $p_0(x) = c \neq 0$, pa **skratimo** i tu **konstantu**, tako da na lijevoj strani ostaje 1. Onda je

$$\int_a^b w(x) \frac{p_n(x)}{x - x_k} dx = \frac{a_{n-1} \gamma_{n-1}}{p_{n-1}(x_k)}.$$

Kad ovo uvrstimo u izraz za w_k s početka dokaza, dobijemo **prvu** formulu iz tvrdnje

$$w_k = \frac{1}{p'_n(x_k)} \int_a^b w(x) \frac{p_n(x)}{x - x_k} dx = \frac{a_{n-1} \gamma_{n-1}}{p_{n-1}(x_k) p'_n(x_k)}.$$

Druga formula izlazi iz **Christoffel–Darbouxovog** identiteta za n , ili **tročlane** rekurzije u x_k , pa je $p_{n+1}(x_k) = -c_n p_{n-1}(x_k)$. ■

Težine Gaussovih integracijskih formula

Teorem. U Gaussovoj integracijskoj formuli reda n , za težine vrijedi

$$w_k = \frac{1}{\|\tilde{z}_k\|_2^2} > 0, \quad k = 1, \dots, n,$$

gdje je \tilde{z}_k vektor vrijednosti ortonormiranih polinoma u čvoru x_k

$$\tilde{z}_k := \tilde{z}(x_k) = \left[\frac{p_0(x_k)}{\|p_0\|}, \dots, \frac{p_{n-1}(x_k)}{\|p_{n-1}\|} \right]^T \in \mathbb{R}^n.$$

Dokaz. Iz Christoffel–Darbouxovog identiteta (za $n - 1$) u jednoj točki x_k , dobivamo

$$\|\tilde{z}_k\|_2^2 = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(p_j(x_k))^2}{\gamma_j} = \frac{p'_n(x_k)p_{n-1}(x_k) - p'_{n-1}(x_k)p_n(x_k)}{a_{n-1}\gamma_{n-1}}.$$

Težine Gaussovih formula — pozitivnost

Zbog $p_n(x_k) = 0$, iz prve formule u prošlom teoremu, slijedi

$$\|\tilde{z}_k\|_2^2 = \frac{p_n'(x_k)p_{n-1}(x_k)}{a_{n-1}\gamma_{n-1}} = \frac{1}{w_k}.$$

Nađimo prvu komponentu vektora \tilde{z}_k . Neka je $p_0(x) = c \neq 0$. Onda je

$$\|p_0\|_2^2 = \int_a^b w(x) p_0^2(x) dx = c^2 \int_a^b w(x) dx = c^2 \mu_0,$$

pa je

$$\tilde{z}_{k,1} = p_0(x_k) / \|p_0\| = 1 / \sqrt{\mu_0} > 0.$$

Iz $\|\tilde{z}_k\|_2^2 > 0$ odmah slijedi $w_k > 0$ u Gaussovim formulama. ■

U nastavku, dajemo još jedan dokaz pozitivnosti, zato jer se može lako generalizirati i na neke druge integracijske formule.

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** svih 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 **Gausovim** formulama),
- jer **egzaktno** integriraju polinome ℓ_k^2 , za $k = 1, \dots, n$.

Na primjer,

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

Napomena. Može se pokazati i da su težine u **Gauss–Lobatto** formulama, također, **pozitivne**.

Međutim, dokaz je nešto **složeniji** — ide preko polinoma **kardinalne** baze za pripadnu interpolaciju: rubni čvorovi a i b su **jednostruki**, a ostali čvorovi x_2, \dots, x_{n-2} su **dvostruki**.

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 Gaussove formule konvergiraju za bilo koju neprekidnu funkciju f , tj. za svaku funkciju $f \in C[a, b]$ vrijedi

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

Dokaz se temelji na Weierstrassovom teoremu o uniformnoj aproksimaciji 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

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

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

Konvergenција Gaussovih formula

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

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

Konvergenција Gaussovih formula

Sad iskoristimo da su težinski koeficijenti w_k pozitivni 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

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

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 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**.

Simetrija u Gaussovima integracijskim formulama

Pretpostavimo da je **težinska** funkcija w

● **simetrična** na intervalu integracije $[a, b]$.

Za **konačni** interval $[a, b]$, to znači da je w **parna** oko **polovišta** intervala

$$x_0 := \frac{a + b}{2},$$

tj. vrijedi

$$w(x_0 + h) = w(x_0 - h), \quad \text{za} \quad |h| \leq \frac{b - a}{2}.$$

Za **cijeli** \mathbb{R} , to znači da je w **parna** oko **neke** točke $x_0 \in \mathbb{R}$,

$$w(x_0 + h) = w(x_0 - h), \quad \text{za} \quad h \in \mathbb{R}.$$

Onda su pripadni **ortogonalni** polinomi simetrični (**par–nepar**) i **Gaussove** integracijske formule su, također, **simetrične**.

Simetrija u Gaussovim integracijskim formulama

Preciznije, ortogonalni polinomi p_n su parni ili neparni oko x_0 , ovisno o parnosti od n , tj. za svaki $h \in \mathbb{R}$ vrijedi

$$p_n(x_0 + h) = \begin{cases} p_n(x_0 - h), & n \text{ paran,} \\ -p_n(x_0 - h), & n \text{ neparan.} \end{cases}$$

U Gaussovoj integracijskoj formuli reda n ,

- čvorovi x_k su simetrični obzirom na x_0 ,
- a težine w_k za simetrični par čvorova su jednake.

Ako čvorove poredamo uzlazno, $x_1 < \dots < x_n$, onda vrijedi

$$\frac{x_k + x_{n+1-k}}{2} = x_0, \quad w_k = w_{n+1-k}, \quad k = 1, \dots, n.$$

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

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

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

gdje je ℓ_k odgovarajući polinom **Lagrangeove** baze na mreži čvorova x_1, \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 neka je e_h greška Hermiteovog interpolacijskog polinoma h_{2n-1} za funkciju f na mreži čvorova x_1, \dots, x_n . Onda je

$$e_h(x) = f(x) - h_{2n-1}(x) = \omega_n^2(x) f[x_1, x_1, x_2, x_2, \dots, x_n, x_n, x].$$

Ako $f^{(2n)}$ postoji na $[a, b]$, onda 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

- **egzakt**ni 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} ,

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

gdje je

$$g(x) = f[x_1, x_1, x_2, x_2, \dots, x_n, x_n, x].$$

Funkcija g je korektno definirana na $[a, b]$, čim f'' postoji u čvorovima. Ako je f još i neprekidna na $[a, b]$, onda je i funkcija g neprekidna na $[a, b]$.

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

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

$$E'_n(f) = \int_a^b w(x) e_h(x) dx = \int_a^b w(x) \omega_n^2(x) g(x) dx.$$

Nadalje, 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. Izlazi

$$E'_n(f) = g(\eta) \int_a^b w(x) \omega_n^2(x) dx,$$

za neki η iz $[a, b]$. Ovo vrijedi uz vrlo blage pretpostavke na f !

Greška formule I'_n s derivacijama u čvorovima

Ako $f^{(2n)}$ postoji na $[a, b]$, onda 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 oba 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 $k = 1, \dots, n$, 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 $f^{(2n)}$ postoji na $[a, b]$, 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 reda n

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

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” odgovarajuće **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 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:

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

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 desnoj 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

$$\tilde{p}_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta_0 \beta_1 \cdots \beta_k}} p_k(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

prelazimo na **ortogonalne** polinome \tilde{p}_k koji **nisu monični**, nego **normirani** ($\|\tilde{p}_k\| = 1$), i 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, ovdje, $\tilde{p}_{-1}(x) = 0$ i $\tilde{p}_0(x) = 1/\sqrt{\beta_0}$.

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

- ortonormiranih 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 , općenito,

● nisu normirani, tj. vrijedi $\|\tilde{z}_k\| \neq 1$,

već su skalirani tako da im je prva komponenta jednaka

$$\tilde{z}_{k,1} = \tilde{p}_0(x_k) = \frac{1}{\sqrt{\mu_0}} = \frac{1}{\sqrt{\beta_0}}, \quad k = 1, \dots, n.$$

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

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

Dakle, v_1, \dots, v_n je ortonormirana baza svojstvenih vektora matrice J_n u prostoru \mathbb{R}^n .

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

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

$$v_{k,1} = \frac{\tilde{z}_{k,1}}{\|\tilde{z}_k\|} = \frac{1}{\sqrt{\beta_0} \|\tilde{z}_k\|}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Ako **znamo** v_k , odavde dobivamo **norme**

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

Ova veza je **korisna** u praksi. Naime,

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

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

Računanje težina Gaussovih formula

Iz ranijeg teorema o težinama, znamo da je

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

Kad uvrstimo izraz za $\|\tilde{z}_k\|$ u izračunatoj ortonormiranoj bazi, $\|\tilde{z}_k\| = 1/(\sqrt{\beta_0} v_{k,1})$, dobivamo da za težine vrijedi

$$w_k = \beta_0 v_{k,1}^2, \quad k = 1, \dots, n.$$

Težine su kvadrati prvih komponenti normiranih svojstvenih vektora matrice J_n , pomnoženi s β_0 .

Ovo je tzv. Golub–Welsch algoritam za računanje parametara Gaussovih integracijskih formula, a objavljen je 1969. g.

Složenost cijelog postupka

Složenost:

- $O(n^3)$ — ako za matricu J_n računamo svojstvene vrijednosti x_1, \dots, x_n 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 posebni oblik diferencijalne jednačbe drugog reda. Vrijedi za sve klasične formule.
- Autori su Glaser, Liu i Rokhlin, a članak je iz 2007. g.

Diskretna ortogonalnost i Gaussove integracijske formule

Matrica kod Gaussove formule reda n

Neka su x_k čvorovi, a w_k težine u Gaussovoj integracijskoj formuli reda n , s težinskom funkcijom w na intervalu $[a, b]$.

Toj formuli pridružimo matricu Z_n , reda n , zadanu stupcima

$$Z_n := [\tilde{z}_1 \ \dots \ \tilde{z}_n],$$

gdje je $\tilde{z}_k =$ vektor vrijednosti pripadnih ortonormiranih polinoma u čvoru x_k

$$\tilde{z}_k := \tilde{z}(x_k) = \left[\frac{p_0(x_k)}{\|p_0\|}, \dots, \frac{p_{n-1}(x_k)}{\|p_{n-1}\|} \right]^T \in \mathbb{R}^n.$$

Matricu Z_n smo već spominjali

- kod Christoffel–Darbouxovog identiteta,
- kao matricu svojstvenih vektora Jacobijeve matrice J_n .

Elementi matrice Z_n

Elementi matrice Z_n su (**redove** brojimo od **0** do **$n - 1$**):

$$[Z_n]_{jk} = \frac{p_j(x_k)}{\|p_j\|}, \quad j = 0, \dots, n - 1, \quad k = 1, \dots, n,$$

ili

$$Z_n = \begin{bmatrix} \frac{p_0(x_1)}{\|p_0\|} & \frac{p_0(x_2)}{\|p_0\|} & \dots & \frac{p_0(x_n)}{\|p_0\|} \\ \frac{p_1(x_1)}{\|p_1\|} & \frac{p_1(x_2)}{\|p_1\|} & \dots & \frac{p_1(x_n)}{\|p_1\|} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{p_{n-1}(x_1)}{\|p_{n-1}\|} & \frac{p_{n-1}(x_2)}{\|p_{n-1}\|} & \dots & \frac{p_{n-1}(x_n)}{\|p_{n-1}\|} \end{bmatrix} \cdot$$

Svojstva matrice Z_n

Znamo da su stupci \tilde{z}_k međusobno **ortogonalni**

$$\langle \tilde{z}_k, \tilde{z}_l \rangle_n = 0, \quad \text{za } k \neq l,$$

gdje $\langle \cdot, \cdot \rangle_n$ označava “obični” skalarni produkt u \mathbb{R}^n .

Nadalje, za **Euklidske** norme stupaca \tilde{z}_k vrijedi

$$\|\tilde{z}_k\|_2^2 = \frac{1}{w_k}, \quad \text{odnosno,} \quad \|\tilde{z}_k\|_2 = \frac{1}{\sqrt{w_k}}.$$

Definiramo **dijagonalnu** matricu D_n na sljedeći način

$$D_n := \text{diag}(\sqrt{w_1}, \sqrt{w_2}, \dots, \sqrt{w_n}).$$

Njezini elementi su **inverzi** normi stupaca matrice Z_n .

Ortogonalna matrica V_n

Zatim definiramo produkt

$$V_n := Z_n D_n = Z_n \cdot \text{diag}(\sqrt{w_1}, \sqrt{w_2}, \dots, \sqrt{w_n}).$$

Stupci matrice V_n su vektori v_k oblika

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

odakle odmah slijedi da su ti stupci **ortonormirani**, tj. vrijedi

$$\langle v_k, v_\ell \rangle_n = 0, \quad \text{za } k \neq \ell, \quad \|v_k\|_2 = 1.$$

Drugim riječima, V_n je **ortogonalna** matrica ($V_n^* V_n = I_n$).

No, onda matrica V_n mora imati i **ortonormirane retke**.

- To su relacije tzv. **diskretne ortogonalnosti** ortogonalnih polinoma p_0, \dots, p_{n-1} u **nultočkama** polinoma p_n .

Ortogonalnost redaka = diskretna ortogonalnost

Elementi matrice V_n su (redove brojimo od 0 do $n - 1$):

$$[V_n]_{jk} = \sqrt{w_k} \frac{p_j(x_k)}{\|p_j\|}, \quad j = 0, \dots, n - 1, \quad k = 1, \dots, n.$$

Za skalarni produkt i -tog i j -tog retka dobivamo

$$\sum_{k=1}^n [V_n]_{ik} \cdot [V_n]_{jk} = \sum_{k=1}^n \sqrt{w_k} \frac{p_i(x_k)}{\|p_i\|} \cdot \sqrt{w_k} \frac{p_j(x_k)}{\|p_j\|} = \delta_{ij}.$$

Kad sredimo ovaj izraz i uvažimo $\delta_{ij} = 0$ za $i \neq j$, izlazi

$$\sum_{k=1}^n w_k p_i(x_k) p_j(x_k) = \|p_i\| \cdot \|p_j\| \cdot \delta_{ij} = \|p_j\|^2 \cdot \delta_{ij}.$$

Diskretna ortogonalnost vrijedi za sve parove indeksa $i, j < n$.

Diskretna ort. = egzaktnost Gaussove formule

Polinomi p_i i p_j pripadaju sustavu **ortogonalnih** polinoma, tj. $\langle p_i, p_j \rangle = \|p_j\|^2 \cdot \delta_{ij}$, pa za desnu stranu vrijedi

$$\sum_{k=1}^n w_k p_i(x_k) p_j(x_k) = \langle p_i, p_j \rangle = \int_a^b w(x) p_i(x) p_j(x) dx,$$

gdje su x_k **nultočke** polinoma p_n , uz $n > i, j$.

Uočite da **produkt** polinoma $p_i \cdot p_j$ ima stupanj $i + j \leq 2n - 2$.

Prethodna formula **diskretne ortogonalnosti** je, zapravo,

- zapis **egzaktne** integracije **produkta** $p_i \cdot p_j$
- **Gaussovom** integracijskom formulom reda n (uz $n > i, j$).

Isto vrijedi i za $i < j = n$, zbog $p_n(x_k) = 0$.