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

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

Precizna definicija asimptotskog niza

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

gdje su koeficijenti

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

a ostatak je

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

Ovdje su B_{2i} Bernoullijevi brojevi,

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

Euler–MacLaurinova formula

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

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

Dokaz je u klasičnim udžebnicima numeričke analize. ∎

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

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

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

Eliminacija člana greške

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

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

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

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

Ideja: Ako je funkcija f dovoljno glatka,

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

Sličan argument kao i prije možemo upotrijebiti i dalje.

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

odnosno

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

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

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

Induktivno, nastavljanjem postupka, dobivamo Richardsonovu ekstrapolaciju

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

Izvod Rombergovog algoritma

Pritom je greška jednaka

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

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

Sada možemo složiti Rombergovu tablicu

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

Poredak računanja

Poredak računanja u tablici je sljedeći:

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

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

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

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

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

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

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

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

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

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

$$
\begin{aligned}
I_5 &= 1.7182818284590452 \\
I &= e - 1 = 1.7182818284590452 \\
I - I_5 &= 0.
\end{aligned}
$$

Eksponencijalna funkcija

Omjeri pogrešaka u stupcima su

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

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

Eksponencijalna funkcija

Eksponenti omjera pogrešaka su

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

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

Funkcija $x^{3/2}$

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

$$\begin{aligned} I_{15} &= 0.4000000000004512 \\ I &= 2/5 = 0.4000000000000000 \\ I - I_{15} &= -0.0000000000004512. \end{aligned}$$

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		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	3.9981	5.6569	$\cdots$		$\cdots$	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.

$$
\begin{array}{r|ccccccc}
0 & 1.0000 & & & & & & \\
1 & 1.9010 & 1.0000 & & & & & \\
2 & 1.9318 & 2.4554 & 1.0000 & & & & \\
3 & 1.9531 & 2.4832 & 2.4978 & 1.0000 & & & \\
4 & 1.9676 & 2.4939 & 2.4998 & 2.4999 & 1.0000 & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & \ddots & \\
15 & 1.9993 & 2.5000 & \cdots & & \cdots & 2.5000 & 1.0000
\end{array}
$$

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

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

Funkcija $\sqrt{x}$

Omjeri pogrešaka u tablici su:

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

Funkcija $\sqrt{x}$

Pripadni eksponenti su

0	1.0000						
1	1.4010	1.0000					
2	1.4324	1.4957	1.0000				
3	1.4538	1.4991	1.4998	1.0000			
4	1.4681	1.4998	1.5000	1.5000	1.0000		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	1.4993	1.5000	$\cdots$		$\cdots$	1.5000	1.0000

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

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

Još malo o Rombergovoj tablici

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

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

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

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

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

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

Još malo o Rombergovoj tablici

uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

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

što je Simpsonova formula s n podintervala.

Zadatak

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

Na sreću, odgovor je ne!

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

$$\begin{aligned} I_{10} &= 2.7468015338900318 3 \\ I &= 2.7468015338900317 2 \\ I - I_{10} &= -0.0000000000000001 1. \end{aligned}$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

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

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

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Rombergova tablica:

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

Rezultat (sa svim znamenkama):

$$I_7 = 0.03744821953512704$$
$$I = 0.03744822190397537$$

$$I - I_7 = 0.00000000236884834.$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

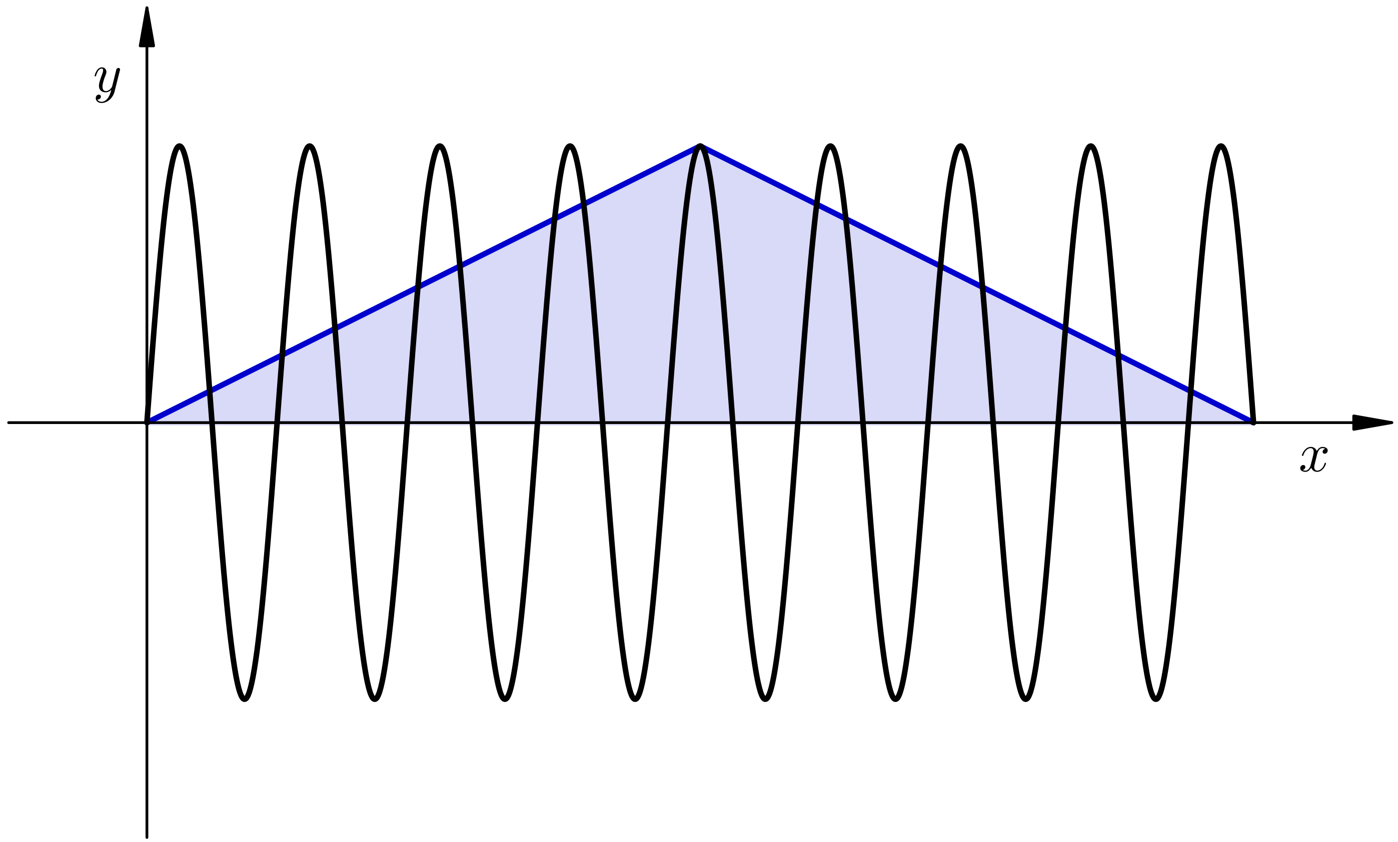
Što je razlog stabilizacije oko jedne, pa oko druge vrijednosti?

- 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,

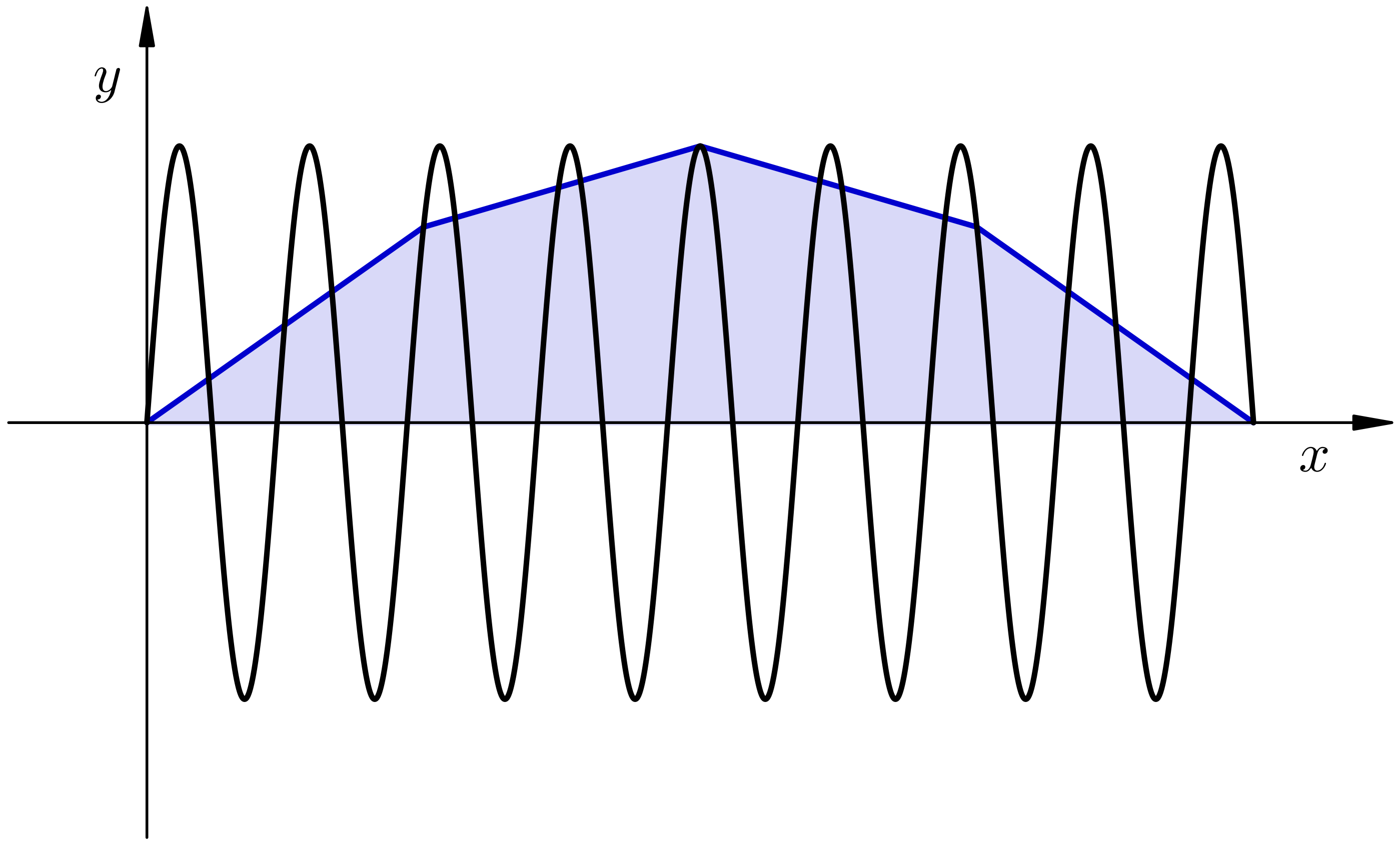
- stavili smo skoro jednu točku po grbi
- i trapezna formula je počela "prepoznavati oblik" podintegralne funkcije.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



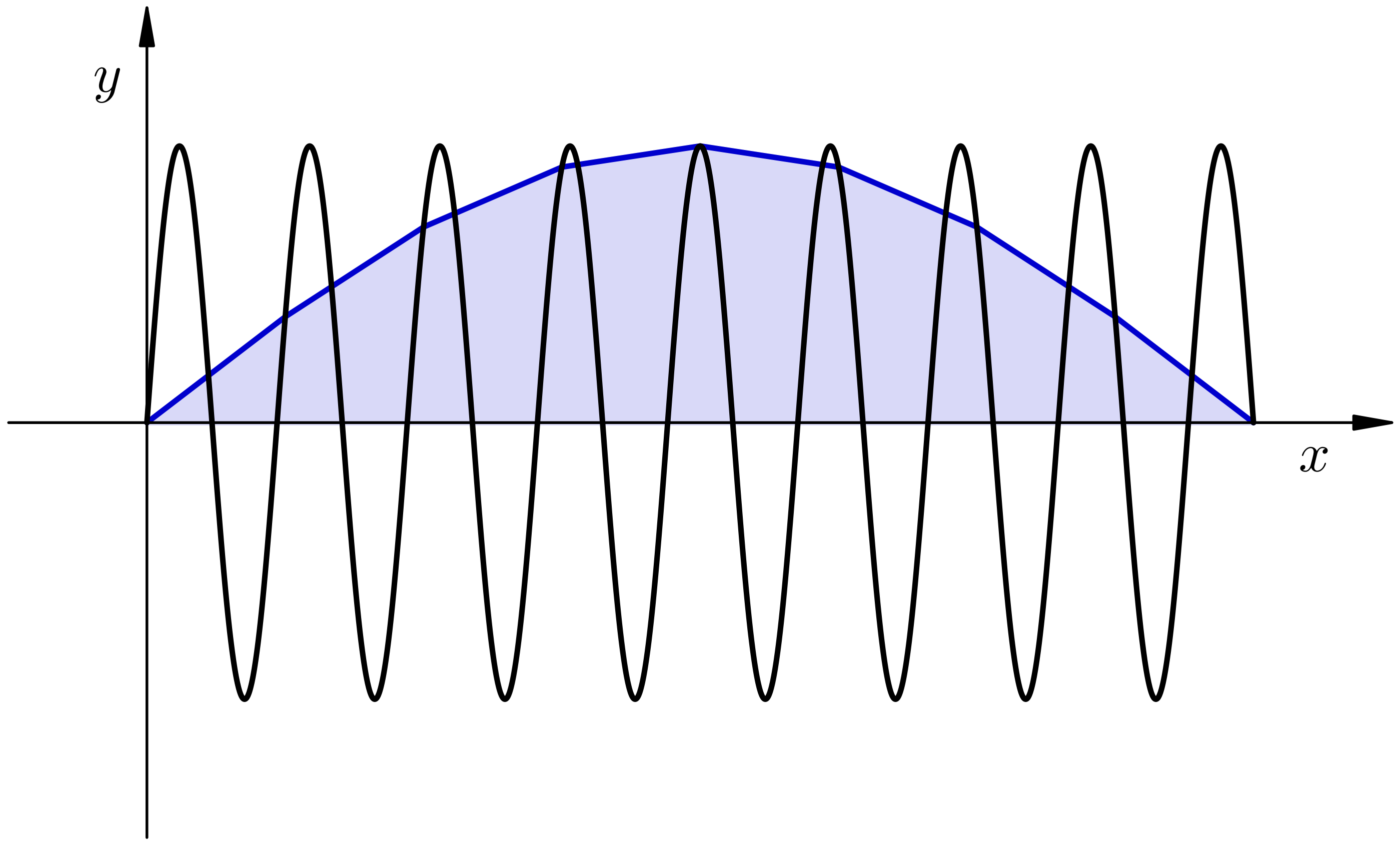
Produljena trapezna formula s 2 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



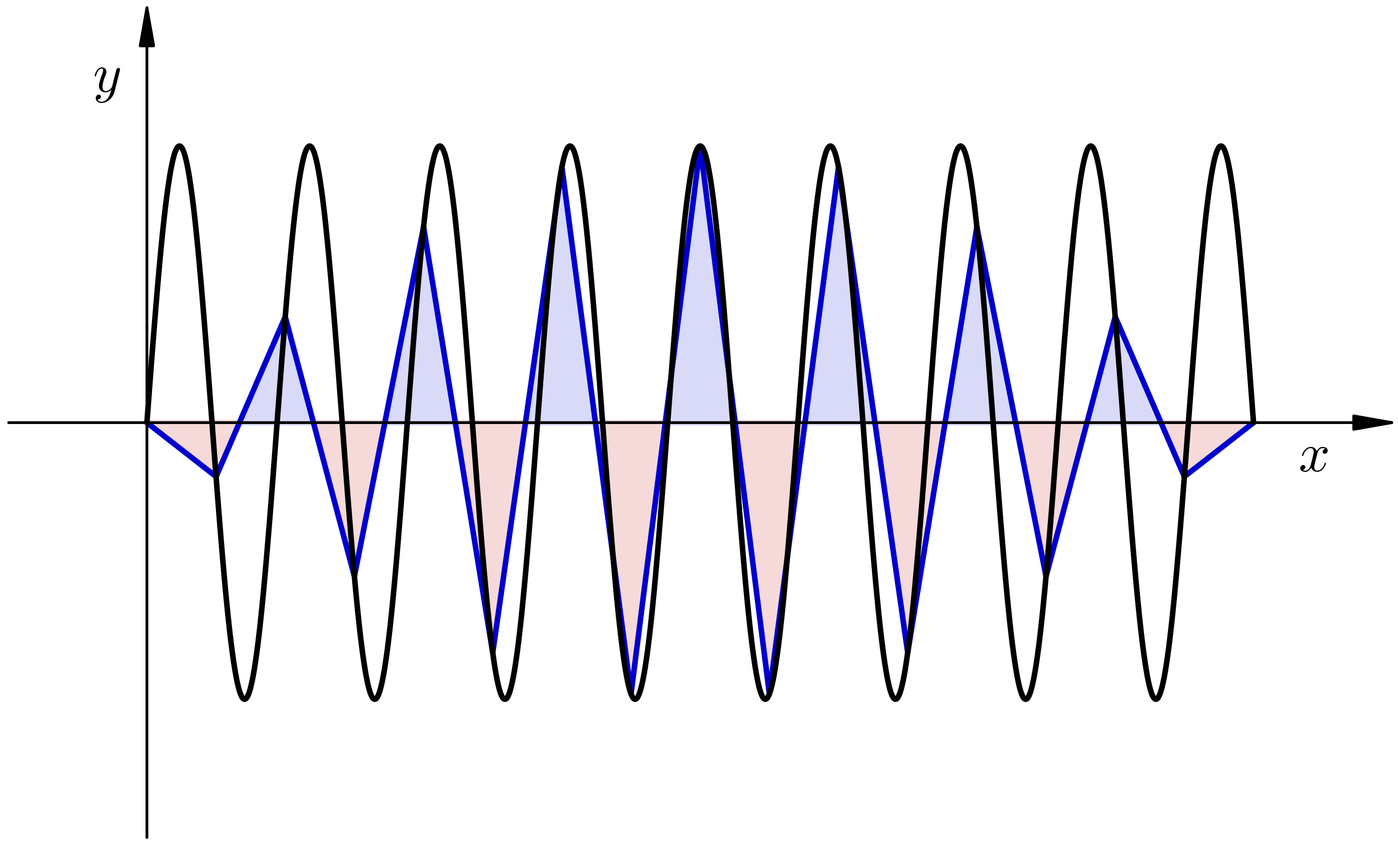
Produljena trapezna formula s 4 podintervala.

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}.

Oprez, ako u Rombergovom algoritmu

- ne zahtijevate stavljanje dovoljnog broja podintervala,

dobiveni rezultat bit će pogrešan!

Trapez može biti brži od Romberga

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

U ovom primjeru događa se zanimljiv fenomen:

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

Razlog: "Dobro" ponašanje produljene trapezne formule za periodičke funkcije!

Trapez može biti brži od Romberga

Početni dio Rombergove tablice:

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

Crveno označeni brojevi imaju sve znamenke točne.

Rombergov algoritam daje netočniju aproksimaciju

$$I_5 = 0.56515914375273593.$$

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–MacLaurinovoj 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 $x_0, \ldots, x_m$ bili unaprijed zadani/fiksni,
- a težinske koeficijente $w_0, \ldots, w_m$ 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 kvadraturna formula onda ima sljedeći oblik:

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

- 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 postižemo zahtjevom da svi momenti težinske funkcije w

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

postoje (kao integrali) i da su konačni.

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

Interpolacijske težinske kvadraturne formule

Uz ove pretpostavke i oznake,

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

težinska integracijska ili kvadraturna formula

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

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 $x_1, \ldots, x_n$.

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

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

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

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

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

Teorem. Neka je ℓ zadani cijeli broj, takav da je $0 \le \ell \le n$. Težinska integracijska formula

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

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,

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

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

Onda je

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

za svaki $p \in \mathcal{P}_{\ell-1}$, 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

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

Kad "spojimo" zadnje tri relacije, izlazi

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

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

O granicama za stupanj egzaktnosti

Nekoliko komentara na prethodni rezultat.

Relacija ortogonalnosti

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

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 $x_1, \ldots, x_n$.

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

- Gaussove ili Gauss–Christoffelove formule.

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

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

Drugim riječima, polinom čvorova ω_n (stupnja n)

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

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

Čvorovi u Gaussovim formulama

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

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

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

Zato se formule najvišeg stupnja egzaktnosti obično zovu

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

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

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

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

Težine u Gaussovim formulama

Za težine w_k znamo da vrijedi

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

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

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

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

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

Težine u Gaussovim formulama

Dobivamo izraz za težine w_k preko ortogonalnih polinoma p_n

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

Prema autoru ove formule, težine w_k u Gaussovim 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. $\ell < n$.

Integracijske formule s fiksnim rubovima

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

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

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 $\ell = n - 1$

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

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

To možemo zapisati i ovako

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

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

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

Tako dobivamo "novu" težinsku funkciju

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

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

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

Relacija ortogonalnosti sada ima oblik

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

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

Slično ranijem, odavde dobivamo sljedeći zaključak:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Primjer za težinske formule

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Primjer. Napravimo usporedbu

- zatvorene Newton–Cotesove formule i
- Gaussove formule

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

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

$$w_1^{NC} = \int\limits_0^1 x^{-1/2}\,\ell_1(x)\,dx = \int\limits_0^1 (x^{-1/2} - x^{1/2})\,dx$$

$$= \left(2x^{1/2} - \frac{2}{3}x^{3/2}\right)\Big|_0^1 = \frac{4}{3},$$

$$w_2^{NC} = \int\limits_0^1 x^{-1/2}\,\ell_2(x)\,dx = \int\limits_0^1 x^{1/2}\,dx = \frac{2}{3}x^{3/2}\Big|_0^1 = \frac{2}{3}.$$

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 $[0, 1]$

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

Taj polinom mora biti ortogonalan na polinome nižeg stupnja.

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

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

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

Gaussova formula

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

$$0 = \int\limits_0^1 x^{-1/2}\, x\, p_2(x)\, dx = \int\limits_0^1 (x^{5/2} + a_1 x^{3/2} + a_0 x^{1/2})\, dx$$

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

Sustav jednadžbi 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 jednadžbe 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:

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

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

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Usporedimo prethodne dvije formule na integralu

$$I = \int_0^1 x^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx = 2C(1) \approx 1.5597868007536456589 5,$$

pri čemu C označava tzv. Fresnelov kosinusni integral.
Aproksimacije po obje formule, za $f(x) = \cos(\pi x/2)$, su

$$I_{NC} = \frac{4}{3} \approx 1.3333333333333333333,$$

$$I_G \approx 1.5575895595933938688 2,$$

a pripadne greške su

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

što pokazuje da je Gaussova formula puno bolja (> 100 puta).

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 (ℓ_k preko p_n i x_k)

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

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. ∎

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

$$w_k = \frac{a_{n-1}\gamma_{n-1}}{p_{n-1}(x_k)\, p_n'(x_k)} = \frac{-a_n\gamma_n}{p_{n+1}(x_k)\, p_n'(x_k)}, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Dokaz. Treba izračunati integrale za težine

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

Zbog člana $p_n(x)/(x - x_k)$, koristimo Christoffel–Darbouxov identitet u x i $y = x_k$, za n (ili za $n+1$), 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, tj. suma na lijevoj strani ide do $n-1$,

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

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

$$\sum_{j=0}^{n-1} \frac{p_j(x_k)}{\gamma_j} \int_a^b w(x)\,p_j(x) p_0(x)\,dx$$

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

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 izlazi iz Christoffel–Darbouxovog identiteta za $n+1$, 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

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

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

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

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

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

Težine Gaussovih formula — pozitivnost

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

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

Nađimo prvu komponentu vektora $\widetilde{z}_k$. 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

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

Iz $\|\widetilde{z}_k\|_2^2 > 0$ 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 $j = 1, \ldots, n$, 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 svih 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.

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 $x_2, \ldots, x_{n-2}$ su dvostruki.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

Simetrija u Gaussovim 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, $x_1 < \cdots < x_n$, onda vrijedi

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

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 $x_1, \ldots, x_n$.

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

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

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

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

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

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

gdje je

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

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

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

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

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

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

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

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 $x_1, \ldots, x_n$, 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 $k = 1, \ldots, n$, 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

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

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

Ako je

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

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

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

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

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

Odavde odmah slijedi i

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

■

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 $[a, b]$

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

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 $A_n = 1$.

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 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 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 desnoj 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

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

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

Ovoj rekurziji odgovara Jacobijeva matrica J_n.

Svojstveni vektori Jacobijeve matrice J_n

Ortogonalni polinomi p_n i $\widetilde{p}_n$, 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

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

Digresija. Iz ovih relacija dobivamo i diskretnu ortogonalnost

- ortonormiranih 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 $n \in \mathbb{N}$. (Više o tome — malo kasnije.)

Ortonormirana baza svojstvenih vektora

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

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

već su skalirani tako da im je prva komponenta jednaka

$$\widetilde{z}_{k,1} = \widetilde{p}_0(x_k) = \frac{1}{\sqrt{\mu_0}} = \frac{1}{\sqrt{\beta_0}}, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Ako želimo ortonormiranu bazu svojstvenih vektora, možemo ih normirati,

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

i onda vrijedi

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

Dakle, $v_1, \ldots, v_n$ 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

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

Ako znamo v_k, odavde dobivamo norme

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

Ova veza je korisna u praksi. Naime,

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

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

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

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

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

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 $x_1, \ldots, x_n$ 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 posebni oblik diferencijalne jednadžbe 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

$$Z_n := [\, \widetilde{z}_1 \ \ldots \ \widetilde{z}_n \,],$$

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

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

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 $n-1$):

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

ili

$$Z_n = \begin{bmatrix} \dfrac{p_0(x_1)}{\|p_0\|} & \dfrac{p_0(x_2)}{\|p_0\|} & \cdots & \dfrac{p_0(x_n)}{\|p_0\|} \\[2ex] \dfrac{p_1(x_1)}{\|p_1\|} & \dfrac{p_1(x_2)}{\|p_1\|} & \cdots & \dfrac{p_1(x_n)}{\|p_1\|} \\[2ex] \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\[2ex] \dfrac{p_{n-1}(x_1)}{\|p_{n-1}\|} & \dfrac{p_{n-1}(x_2)}{\|p_{n-1}\|} & \cdots & \dfrac{p_{n-1}(x_n)}{\|p_{n-1}\|} \end{bmatrix}.$$

Svojstva matrice Z_n

Znamo da su stupci $\widetilde{z}_k$ međusobno ortogonalni

$$\langle \widetilde{z}_k, \widetilde{z}_\ell \rangle_n = 0, \quad \text{za} \quad k \neq \ell,$$

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

Nadalje, za Euklidske norme stupaca $\widetilde{z}_k$ vrijedi

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

Definiramo dijagonalnu matricu D_n na sljedeći način

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

Njezini elementi su inverzi normi stupaca matrice Z_n.

Ortogonalna matrica V_n

Zatim definiramo produkt

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

Stupci matrice V_n su vektori v_k oblika

$$v_k := \sqrt{w_k}\, \widetilde{z}_k, \qquad k = 1, \ldots, n,$$

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

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

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

No, onda V_n mora imati i ortonormirane retke ($V_n V_n^* = I_n$).

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

Ortogonalnost redaka = diskretna ortogonalnost

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

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

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 $p_n(x_k) = 0$.

Diskretni skal. produkti iz Gaussove formule

Gaussova integracijska formula reda n, s čvorovima x_k i težinama w_k, generira diskretni skalarni produkt funkcija f i g

$$\langle f, g \rangle_{G_n} := \sum_{k=1}^{n} w_k \, f(x_k) \, g(x_k).$$

Skalarni produkt je aproksimacija integrala produkta $f \cdot g$ tom Gaussovom formulom.

Na n-dimenzionalnom prostoru $\mathbb{R}^n$, pripadni skalarni produkt vektora y i z je

$$\langle y, z \rangle_{W_n} := z^T \cdot \operatorname{diag}(w_1, \ldots, w_n) \cdot y = \sum_{k=1}^{n} w_k \, y_k \, z_k.$$

Oba skalarna produkta su korektna, jer su težine w_k pozitivne.

Veza između funkcija i vektora

Veza između funkcija i vektora — funkciji f pridružujemo vektor vrijednosti u čvorovima

$$f \mapsto [\,f(x_1), \ldots, f(x_n)\,]^T \in \mathbb{R}^n.$$

Slično vrijedi i za kompleksne funkcije, odnosno, $\mathbb{C}^n$.

Diskretna ortogonalnost: Za integralni skalarni produkt, zadan težinskom funkcijom w na intervalu $[a, b]$, i za svaki $n \in \mathbb{N}$,

- pripadni ortogonalni polinomi $p_0, \ldots, p_{n-1}$
- su ortogonalni i u diskretnom skalarnom produktu generiranom pripadnom Gaussovom integracijskom formulom reda n.