# Numerička matematika

## 11. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

# Sadržaj predavanja

# 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 $\ell_1$ i $\ell_2$, 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

$$
\begin{aligned}
w_1^{NC} &= \int_0^1 x^{-1/2}\,\ell_1(x)\,dx = \int_0^1 (x^{-1/2} - x^{1/2})\,dx \\
&= \left(2x^{1/2} - \frac{2}{3}x^{3/2}\right)\Big|_0^1 = \frac{4}{3}, \\
w_2^{NC} &= \int_0^1 x^{-1/2}\,\ell_2(x)\,dx = \int_0^1 x^{1/2}\,dx = \frac{2}{3}x^{3/2}\Big|_0^1 = \frac{2}{3}.
\end{aligned}
$$

Ovaj pristup ima smisla samo kad se polinomi $\ell_1$ i $\ell_2$ 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 težine $w$ 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:

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

# Gaussova formula

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

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

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

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

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

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

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).

# 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 integracijske 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 $\ell_k$ odgovarajući polinom Lagrangeove baze na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$, za $k = 1, \ldots, n$.

Budući da je $\ell_k$ 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

- $\ell_k$, 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 $\omega_h$ za Hermiteovu interpolaciju je

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

gdje je $\omega_n$ 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 $\xi$ vrijedi i jača ocjena $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$, gdje je

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

ali nam to neće trebati za Gaussovu integraciju.

# Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Integracijom Hermiteovog interpolacijskog polinoma

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

dobivamo "novu" integracijsku formulu oblika

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

gdje je

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

za $k = 1, \ldots, n$. Naime, $f_k$ i $f_k'$ su brojevi i ne ovise o $x$.

# Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

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

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

Dobivamo sljedeće formule za težine u integracijskoj formuli $I'_n$

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

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

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 $\eta$ 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 kojeg 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

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

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

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

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 $I_n'$

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

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

Ove polinome možemo izraziti preko polinoma čvorova $\omega_n$

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

pa je

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

# Gaussove formule kao interpolacijske formule

Kad tu formulu uvrstimo u izraz za težine, dobivamo

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

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

Ako je

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

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

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

# Gaussove formule kao interpolacijske formule

2. smjer (dovoljnost): ortogonalnost $\Longrightarrow$ svi $w_k' = 0$.

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

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

Odavde odmah slijedi i

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

■

# Gaussove formule kao interpolacijske formule

Prema očekivanju, dobivamo isti zaključak kao i ranije.

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

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

Pripadni polinom čvorova $\omega_n$ 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 kojeg 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 $\omega_n$ 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 Gaussove formule).

Ako koristimo $p_n$ za kojeg 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

$$
\begin{aligned}
w_k &= \int_a^b w(x)\,[1 - 2(x - x_k)\ell_k'(x_k)]\,\ell_k^2(x)\,dx, \\
w_k' &= \int_a^b w(x)\,(x - x_k)\,\ell_k^2(x)\,dx, \qquad k = 1, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

U izrazu za $w_k$ iskoristimo relaciju za $w_k'$.

# Pozitivnost težina u Gaussovim formulama

Težine $w_k$ onda možemo napisati u obliku

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

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.

■

# 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.

# 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

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

# Svojstva matrice $Z_n$

Znamo da su stupci $\widetilde{z}_k$ međusobno ortogonalni, tj. vrijedi

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

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

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

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

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

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

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

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 $n$.

Prostori $\mathcal{P}_k$ s produktom $\langle\ ,\ \rangle_{G_n}$ su unitarni prostori, za $k < n$.

# Gauss–Legendreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Legendreove formule (težina je $w(x) = 1$).

Čvorovi integracije su nultočke Legendreovih polinoma $P_n$.
Za njih vrijedi tzv. Rodriguesova formula

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

Za $P_n$ je

$$\gamma_n = \frac{2}{2n+1}, \quad A_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} = \frac{1}{2^n}\binom{2n}{n}, \quad n \geq 0.$$

# Gauss–Legendreove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

# Gauss–Laguerreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Laguerreove formule.

Čvorovi integracije su nultočke Laguerreovih polinoma $\widetilde{L}_n$.
Za njih vrijedi Rodriguesova formula

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

Za $\widetilde{L}_n$ je

$$\gamma_n = (n!)^2, \quad A_n = (-1)^n, \quad n \geq 0.$$

# Gauss–Laguerreove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

# Gauss–Hermiteove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Hermiteove formule.

Čvorovi integracije su nultočke Hermiteovih polinoma $H_n$.
Za njih vrijedi Rodriguesova formula

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

Za $H_n$ je

$$\gamma_n = 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad A_n = 2^n, \quad n \geq 0.$$

# Gauss–Hermiteove formule

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

# Gauss–Čebiševljeve formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Čebiševljeve formule.

Čvorovi integracije su nultočke Čebiševljevih polinoma prve vrste $T_n$. Za njih vrijedi Rodriguesova formula

$$T_n(x) = \frac{(-1)^n \sqrt{\pi}\, \sqrt{1-x^2}}{2^{n+1}\, \Gamma(n+\frac{1}{2})} \frac{d^n}{dx^n}\left((1-x^2)^{n-1/2}\right), \quad n \geq 0.$$

Za $T_n$ je

$$\gamma_0 = \pi, \;\; A_0 = 1, \qquad \gamma_n = \frac{\pi}{2}, \;\; A_n = 2^{n-1}, \;\; n \geq 1.$$

# Gauss–Čebiševljeve formule

Za $x = \cos\varphi$, znamo da je $T_n(\cos\varphi) = \cos(n\varphi)$, pa se čvorovi integracije lako računaju — vrijedi formula

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

Sve težine u Gaussovoj formuli su jednake i vrijedi

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

# Gauss–Čebiševljeve formule druge vrste

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Čebiševljeve formule druge vrste.

Čvorovi integracije su nultočke Čebiševljevih polinoma druge vrste $U_n$. Za njih vrijedi Rodriguesova formula

$$U_n(x) = \frac{(-1)^n (n+1)\sqrt{\pi}}{2^{n+1}\,\Gamma(n+\frac{3}{2})\,\sqrt{1-x^2}} \frac{d^n}{dx^n}\big((1-x^2)^{n+1/2}\big), \quad n \geq 0.$$

Za $U_n$ je

$$\gamma_n = \frac{\pi}{2}, \quad A_n = 2^n, \quad n \geq 0.$$

# Gauss–Čebiševljeve formule druge vrste

Za $x = \cos\varphi$, znamo da je $U_n(\cos\varphi) = \sin((n+1)\varphi)\,/\,\sin(\varphi)$, pa se čvorovi integracije lako računaju — vrijedi formula

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

Težine u Gaussovoj formuli se, također, lako računaju i vrijedi

$$w_k = \frac{\pi}{n+1}\,\sin^2\left(\frac{k\pi}{n+1}\right), \quad k = 1, \ldots, n.$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

## Numerička integracija

# 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 relativnu točnost aritmetike računala u kojoj radimo — recimo, u tipu `double`.

# Sustav jednadžbi iz uvjeta egzaktne integracije

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

- Možemo izabrati bilo koju bazu u tom prostoru $\mathcal{P}_{2n-1}$
- i napisati sustav od $2n$ jednadžbi s $2n$ nepoznanica,

iz uvjeta egzaktne integracije na toj bazi.

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

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

Međutim, to je loš pristup!

# Sustav jednadžbi iz uvjeta egzaktne integracije

Što ne valja? Ključni problem je nelinearnost ovog sustava.

- Ovisnost o nepoznanicama $x_k$ je nelinearna.

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

Drugi problem je moguća

- loša uvjetovanost izabrane baze prostora polinoma.

Potencijalni popravak:

- uzeti bazu pripadnih ortogonalnih polinoma $p_n$.

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

Dakle, nema puno smisla!

# Parametri Gaussovih formula

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

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

Međutim, čak i tad imamo “problem”:

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

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

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

# Ortogonalni polinomi i tročlana rekurzija

Algoritam se bazira na pripadnim ortogonalnim polinomima i

- tročlanoj rekurziji za te polinome.

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

Već smo pokazali da ovi polinomi zadovoljavaju tročlanu homogenu rekurziju oblika

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

Izveli smo i formule za koeficijente $a_k$, $b_k$ i $c_k$ u ovoj rekurziji.

Proširenje. Uz dogovor $p_{-1}(x) = 0$, rekurzija vrijedi i za $k = 0$, s proizvoljnim $c_0$, a koeficijente $a_0$ i $b_0$ izračunamo iz $p_0$ i $p_1$.

# Monični ortogonalni polinomi

Izvod algoritma za nalaženje parametara Gaussovih formula obično kreće od ortogonalnih polinoma $p_k$

- s vodećim koeficijentom $A_k = 1$.

Ovi polinomi zovu se monični ortogonalni polinomi.

Monični ortogonalni polinomi zadovoljavaju

- još jednostavniju tročlanu rekurziju (jer je $a_k = 1$),

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!
Veza ovih koeficijenata s ranijim: $a_k = 1$, $\alpha_k = -b_k$, $\beta_k = c_k$.

# 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 (v. ranije)

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

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

# Rekurzija za monične ortogonalne polinome

Standardno se još definira da je

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

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

Pretpostavimo sad da su

- svi potrebni koeficijenti $\alpha_k$ i $\beta_k$ 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

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

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 integracije 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, jer je iz teorema o tročlanoj rekurziji za ortogonalne polinome

$$\beta_i = \frac{\gamma_i}{\gamma_{i-1}} \;\Rightarrow\; \sqrt{\beta_0\cdots\beta_k} = \sqrt{\gamma_k} \;\Rightarrow\; \|\widetilde{p}_k\| = \frac{\|p_k\|}{\sqrt{\gamma_k}} = 1,$$

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 $\widetilde{p}_0(x) = 1/\sqrt{\beta_0}$.

# Svojstveni vektori Jacobijeve matrice $J_n$

Prethodnoj rekurziji odgovara Jacobijeva matrica $J_n$.

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 $k = 1, \ldots, n$. Vektore $\widetilde{z}_k$ smo već spominjali!

# Ortogonalnost svojstvenih vektora (još jednom)

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

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

Napomena. Ovu ortogonalnost vektora $\widetilde{z}_k$ dokazali smo ranije,

- kod Christoffel–Darbouxovog identiteta.

Tamo su vektori $\widetilde{z}_k$ bili stupci (neke) matrice $Z_n$, a sad vidimo da je $Z_n$ = matrica svojstvenih vektora Jacobijeve matrice $J_n$.

# 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

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

Ako želimo ortonormiranu bazu svojstvenih vektora, možemo ih normirati,

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

i onda vrijedi

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

Dakle, $v_1, \ldots, v_n$ je ortonormirana baza svojstvenih vektora matrice $J_n$ u prostoru $\mathbb{R}^n$ (v. matricu $V_n$ kod diskretne ortog.).

# 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 $\beta_0$.

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.

# Općenito o iterativnim metodama

Neka je zadana nelinearna funkcija

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

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

$$f(x) = 0.$$

Takve točke $x$ zovu se

- rješenja ili korijeni pripadne jednadžbe,
- ili nultočke funkcije $f$.

U pravilu, pretpostavljamo da je

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

# Neprekidnost funkcije $f$

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

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

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

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

Ako je $f$ neprekidna funkcija na $[a, b]$

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

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

# Izoliranost nultočaka

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

- takav da je $\alpha$ jedina nultočka od $f$ unutar tog kruga.

U protivnom, kažemo da je nultočka neizolirana. ■

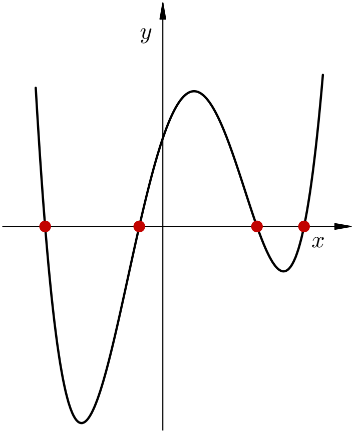
Kod neizoliranih nultočaka postoji problem konvergencije metoda za nalaženje nultočaka (lokalna nejedinstvenost).

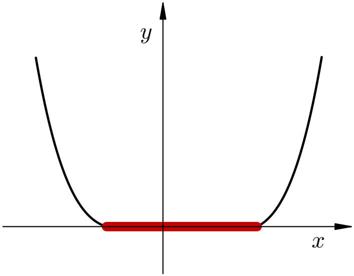
Odsad nadalje, pretpostavljamo da $f$ ima samo izolirane nultočke.

Na sljedećoj stranici su primjeri funkcije s

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

# Izoliranost nultočaka



# Računanje nultočke na zadanu točnost

Traženje nultočki na zadanu točnost sastoji se od dvije faze:

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

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

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

Uobičajeno:

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

# Brzina ili red konvergencije

Definirajmo sada brzinu konvergencije nekog niza "iteracija". Te iteracije mogu, ali ne moraju biti iteracije za računanje nultočke funkcije.

Definicija. Niz iteracija $(x_n, n \in \mathbb{N}_0)$ konvergira prema točki $\alpha$

- s redom konvergencije $p$, gdje je $p \geq 1$,

ako je $p$ najveći realni broj, za kojeg postoji konstanta $c > 0$, tako da vrijedi

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

Ako je $p = 1$, kažemo da niz konvergira linearno prema $\alpha$.

U tom slučaju, mora biti $c < 1$ (za konvergenciju niza), i obično se $c$ naziva faktor linearne konvergencije.

# Linearna konvergencija

U nekim slučajevima, prethodna definicija nije zgodna za linearne iterativne algoritme.

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

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

Katkad će biti mnogo lakše pokazati ovu relaciju, nego onu iz definicije. I u ovom slučaju, kažemo da niz iteracija konvergira linearno s faktorom $c$. Zbog $c^n \to 0$, niz zaista konvergira.

Iz očitih razloga, ovakvu linearnu konvergenciju još zovemo i

- geometrijska konvergencija s faktorom $c$.

Numerička integracija

- Primjer za težinske formule
- Gaussove formule i Hermiteova interpolacija
- Diskretna ortogonalnost i Gaussove integracijske formule
- Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula
- Računanje čvorova i težina u Gaussovim formulama

Rješavanje nelinearnih jednadžbi

- Metoda bisekcije (raspolavljanja)
- Regula falsi (metoda pogrešnog položaja)

# Uvodno o metodi raspolavljanja

Najjednostavnija metoda nalaženja nultočaka funkcije je metoda bisekcije ili raspolavljanja.

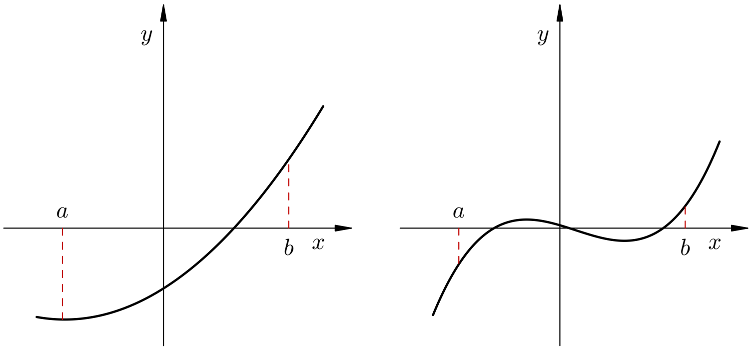
- Osnovna ili startna pretpostavka za početak algoritma raspolavljanja je neprekidnost funkcije $f$ na intervalu $[a, b]$, s tim da u rubovima intervala vrijedi

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

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

- točno jednu nultočku unutar $[a, b]$ (lijevo),
- više nultočaka unutar $[a, b]$ — točnije, neparan broj njih, brojeći kratnost (desno).

# Uvodno o metodi raspolavljanja



# Uvodno o metodi raspolavljanja

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

Na kraju, ako je

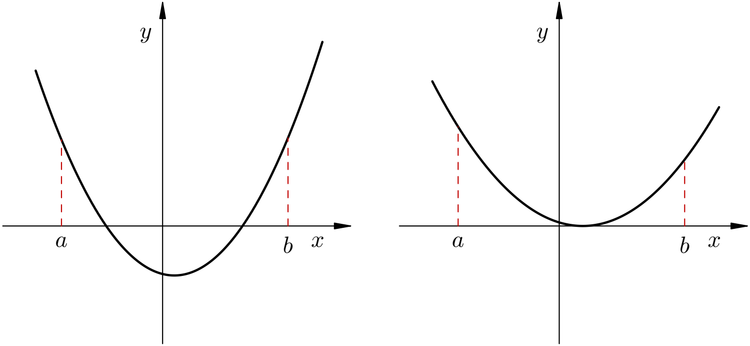
$$f(a) \cdot f(b) > 0,$$

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

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

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

# Uvodno o metodi raspolavljanja



# Uvodno o metodi raspolavljanja

Zaključak.

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

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

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

# Algoritam

Označimo s $\alpha$ pravu nultočku funkcije (nju tražimo), a zatim s

- $a_0 := a$,
- $b_0 := b$ i
- $x_0 :=$ polovište intervala $[a_0, b_0]$, tj.

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

Ideja metode: U $n$-tom koraku algoritma, počev od intervala $[a_{n-1}, b_{n-1}]$ koji sigurno sadrži neku nultočku $\alpha$,

- konstruiramo interval $[a_n, b_n]$ kojemu je
- duljina = polovina duljine prethodnog intervala,
- ali tako da je nultočka $\alpha$ ostala unutar intervala $[a_n, b_n]$.

# Algoritam

Konstrukcija intervala $[a_n, b_n]$ sastoji se u raspolavljanju intervala $[a_{n-1}, b_{n-1}]$ točkom $x_{n-1}$, na sljedeći način:

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

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

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

# Algoritam

Objasnimo posljednju činjenicu. Množenjem lijevih strana nejednakosti

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

dobivamo

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

pa mora biti

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

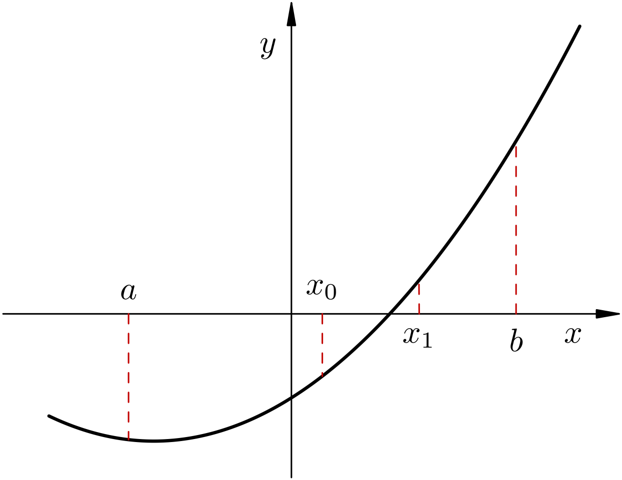
Dakle, nultočka se onda mora nalaziti u intervalu $[x_{n-1}, b_{n-1}]$.

Za svaki korak metode raspolavljanja, očito, vrijedi zaključak

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

# Metoda raspolavljanja — grafički

Grafički, metoda raspolavljanja izgleda ovako



# Algoritam

Metoda raspolavljanja — za zadanu (apsolutnu) točnost $\varepsilon$:

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

Pedantni algoritam "čuva" i stare vrijednosti funkcije.

# Konvergencija i zaustavljanje algoritma

Tvrdnja. Ako vrijede startne pretpostavke na funkciju $f$ za metodu raspolavljanja, dobiveni niz $x_n$ konvergira prema nekoj nultočki $\alpha$ iz intervala $[a, b]$.

Dokaz. Nultočku $\alpha$ smo našli sa zadanom točnošću $\varepsilon$ ako je

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

Kako ćemo znati da je to ispunjeno, ako ne znamo $\alpha$?

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

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

- pa je dovoljno zahtijevati

$$b_n - x_n \leq \varepsilon \quad \text{ili} \quad x_n - a_n \leq \varepsilon.$$

# Ocjena greške

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

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

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

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

■

Ova relacija podsjeća na linearnu konvergenciju s $c = 1/2$, ali se zdesna ne pojavljuje $|\alpha - x_0|$. Ipak, desna strana sugerira da će konvergencija biti dosta spora (jedan bit po iteraciji).

# Ocjena greške i broj koraka

Relacija

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

omogućava da se unaprijed odredi koliko je koraka (iteracija) raspolavljanja potrebno za postizanje zadane točnosti $\varepsilon$.

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

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

Množenjem prethodne jednadžbe s $2^{n+1}$ i dijeljenjem s $\varepsilon$, dobivamo

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

# Ocjena greške i broj koraka

Zatim, logaritmiranje (u bilo kojoj bazi) daje

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

odnosno,

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

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

Po Teoremu srednje vrijednosti za funkciju $f$ oko $\alpha$, imamo

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

pri čemu je $\xi$ između $x_n$ i $\alpha$.

# Dinamička ocjena greške

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

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

Znamo da su $\alpha$ i $x_n$ iz $[a, b]$, odakle slijedi i $\xi \in [a, b]$. Onda $|f'(\xi)|$ ocijenimo odozdo, preko cijelog intervala $[a, b]$,

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

Ako je $m_1 > 0$, odnosno, ako $f'$ ima fiksni predznak na $[a, b]$, onda izlazi ocjena

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

# Dinamička ocjena greške

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

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

odnosno, da vrijedi

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

Ovaj uvjet možemo provjeriti u svakoj iteraciji.

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

Napomena. Pretpostavka $m_1 > 0$ znači da $f'$ nema nultočku na $[a, b]$, tj. da je $f$ monotona na $[a, b]$ ($\Rightarrow \alpha$ je jedinstvena).

# Uvodno o metodi pogrešnog položaja

Znamo da metoda raspolavljanja ima

- sigurnu konvergenciju, ali je vrlo spora.

Regula falsi ili metoda pogrešnog položaja je prirodan pokušaj ubrzavanja metode raspolavljanja. I ova metoda ima

- sigurnu konvergenciju,

uz iste pretpostavke kao u metodi raspolavljanja.

Pretpostavimo da je funkcija $f : [a, b] \to \mathbb{R}$

- neprekidna na intervalu $[a, b]$
- i da u rubovima intervala vrijedi “promjena znaka”

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

# Ideja i skica algoritma

Ideja metode: Aproksimirajmo funkciju $f$ pravcem koji prolazi točkama $(a, f(a))$ i $(b, f(b))$.

Traženu nultočku $\alpha$ tada možemo aproksimirati

- nultočkom tog pravca — označimo ju s $x_0$.

Uočite da pravac sigurno siječe os $x$, zbog $f(a) \cdot f(b) < 0$.

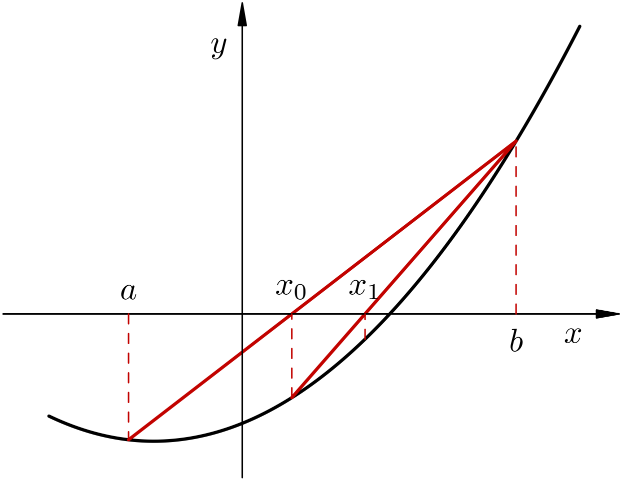
Nakon toga,

- pomaknemo ili točku $a$, ili točku $b$ — u točku $x_0$,
- ali tako da je nultočka ostala unutar novodobivenog intervala (test predznaka, kao kod raspolavljanja).

Postupak ponavljamo sve dok nismo postigli željenu točnost.

# Metoda pogrešnog položaja — grafički

Grafički, regula falsi ili metoda pogrešnog položaja izgleda ovako



# Regula falsi — osnovne ideje

Točka $x_0$ dobiva se jednostavno iz jednadžbe pravca, pa je

$$x_0 = b - f(b)\,\frac{b-a}{f(b)-f(a)}.$$

Dakle, osnovne ideje metode su:

- aproksimacija pravcem
- i "zatvaranje" nultočke u određeni — sve manji interval.

Iz slike zaključujemo da je to sasvim dobra ideja,

- za monotone i konveksne (ili konkavne) funkcije.

Nažalost, postoje ozbiljni problemi i s ovom metodom.

- Konvergencija je i dalje linearna, kao kod raspolavljanja.
- Može biti vrlo spora — sporija nego kod raspolavljanja.

# Regula falsi — red konvergencije

Izvedimo red konvergencije metode pogrešnog položaja.

Uz oznaku za prvu podijeljenu razliku

$$f[a, b] = \frac{f(b) - f(a)}{b - a},$$

formula za prvu aproksimaciju $x_0$ glasi

$$x_0 = b - \frac{f(b)}{f[a, b]}.$$

Treba naći izraz za grešku $\alpha - x_0$.

Prethodnu relaciju pomnožimo s $-1$ i dodamo $\alpha$ na obje strane, tako da lijeva strana postane upravo $\alpha - x_0$.

# Regula falsi — red konvergencije

Dobivamo redom

$$
\begin{aligned}
\alpha - x_0 &= \alpha - b + \frac{f(b)}{f[a,b]} = \text{(izlučimo } \alpha - b\text{)} \\
&= (\alpha - b)\left(1 + \frac{f(b)}{(\alpha - b)f[a,b]}\right) = \text{(uvalimo } f(\alpha) = 0\text{)} \\
&= (\alpha - b)\left(1 + \frac{f(b) - f(\alpha)}{(\alpha - b)f[a,b]}\right) = \text{(sredimo u } f[b,\alpha]\text{)} \\
&= (\alpha - b)\left(1 - \frac{f[b,\alpha]}{f[a,b]}\right) = (\alpha - b)\,\frac{f[a,b] - f[b,\alpha]}{f[a,b]} \\
&= -(\alpha - b)\,(\alpha - a)\,\frac{f[a,b,\alpha]}{f[a,b]}.
\end{aligned}
$$

# Regula falsi — red konvergencije

Ako je funkcija $f$ dovoljno glatka, onda

- podijeljene razlike $f[a, b, \alpha]$ i $f[a, b]$ možemo napisati preko derivacija funkcije $f$.

Ako je $f$ klase $C^1[a, b]$, onda po Teoremu srednje vrijednosti imamo

$$f[a, b] = f'(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

Na sličan način, ako je $f$ klase $C^2[a, b]$, onda vrijedi

$$f[a, b, \alpha] = \frac{1}{2} f''(\zeta),$$

gdje se $\zeta$ nalazi između minimuma i maksimuma vrijednosti $a$, $b$ i $\alpha$. Zbog $\alpha \in [a, b]$, to opet daje $\zeta \in [a, b]$.

Sad ove dvije relacije uvrstimo u izraz za grešku.

# Regula falsi — red konvergencije

Za funkciju $f \in C^2[a, b]$, dobivamo sljedeći izraz za grešku

$$\alpha - x_0 = -(\alpha - b)\,(\alpha - a)\,\frac{f''(\zeta)}{2f'(\xi)}.$$

Uočimo još da, zbog $\alpha \in [a, b]$, vrijedi

$$-(\alpha - b)\,(\alpha - a) = (b - \alpha)\,(\alpha - a) > 0.$$

Da bismo pojednostavnili analizu, pretpostavimo da

- prva derivacija $f'$ i druga derivacija $f''$ imaju konstantan predznak na $[a, b]$ (pozitivne ili negativne).

Onda je $\alpha$ jedina nultočka funkcije $f$ u intervalu $[a, b]$, jer je $f$ monotona.

# Regula falsi — red konvergencije

U nastavku gledamo samo jedan od četiri moguća slučaja za predznake $f'$ i $f''$.

Pretpostavimo da je $f' > 0$ i $f'' > 0$ na $[a, b]$, tj. da je

- $f$ monotono rastuća i konveksna na $[a, b]$.

U tom slučaju,

- spojnica točaka $(a, f(a))$ i $(b, f(b))$ uvijek se nalazi iznad grafa funkcije $f$, kao na prethodnoj slici.

Uvrštavanjem podataka o predznaku prve i druge derivacije u

$$\alpha - x_0 = (b - \alpha)(\alpha - a)\,\frac{f''(\zeta)}{2f'(\xi)},$$

dobivamo da je desna strana veća od $0$, pa je i $\alpha > x_0$.

# Regula falsi — red konvergencije

Što sve slijedi iz $\alpha > x_0$?

Po pretpostavci, funkcija $f$ monotono raste na $[a, b]$, pa je

$$f(a) < f(x_0) < f(\alpha) = 0 < f(b).$$

To znači da treba "pomaknuti" $a$ za sljedeći korak metode, jer $f(a)$ i $f(x_0)$ imaju isti predznak, tj. $\alpha \in [x_0, b]$. Dakle, imamo

- $a_1 := x_0$, a $b$ ostaje fiksan, $b_1 := b$.

Potpuno isto će se dogoditi i u svim narednim koracima. Drugim riječima,

- aproksimacije $x_n$ neprestano ostaju lijevo od nultočke $\alpha$,
- tj. pomiče se lijevi rub intervala, $a_n := x_{n-1}$,
- a desni rub $b$ ostaje fiksan, $b_n := b_{n-1} = \cdots = b$.

# Regula falsi — red konvergencije

U proizvoljnoj iteraciji — kad računamo $x_n$, uz $\alpha \in [a_n, b_n]$, relacija za grešku ima oblik

$$\alpha - x_n = (b_n - \alpha)\,(\alpha - a_n)\,\frac{f''(\zeta_n)}{2f'(\xi_n)}.$$

Kad uvrstimo prethodne zaključke $a_n = x_{n-1}$ i $b_n = b$, izlazi

$$\alpha - x_n = \left((b - \alpha)\,\frac{f''(\zeta_n)}{2f'(\xi_n)}\right)(\alpha - x_{n-1}).$$

Uzimanjem apsolutnih vrijednosti slijeva i zdesna, slijedi da

- u ovom slučaju, regula falsi konvergira linearno.

Zadatak. Dokažite da je apsolutna vrijednost faktora u prvoj (velikoj) zagradi strogo manja od 1 ($\Rightarrow$ konvergencija metode).

# Regula falsi — red konvergencije

Za metodu bisekcije dobili smo sličnu relaciju za grešku, samo je faktor bio $1/2$. Usporedbom izraza za greške, vidimo da

- nije teško konstruirati primjere kad je metoda bisekcije brža no regula falsi.

Probajte naći takav primjer!

Napomena. Sasvim analogno se analiziraju i ostala tri slučaja za predznake $f'$ i $f''$ na $[a, b]$. Na primjer, ako je $f$ konveksna, ali monotono pada, tj. $f'' > 0$ i $f' < 0$,

- aproksimacija $x_n$ je uvijek desno od $\alpha$,
- a uvijek se pomiče desni rub $b$.

U svim slučajevima izlazi da regula falsi konvergira linearno.