Numerička matematika

11. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

Numerička integracija

Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti

Gaussove integracijske formule

Primjer za težinske formule

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula

Numerička integracija

Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti

Gaussove integracijske formule

Primjer za težinske formule

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula

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 $w_k^{(n)}$, $x_k^{(n)}$.

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 za funkciju 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 $0 \leq \ell \leq n$. Težinska integracijska formula

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

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

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

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

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

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

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 polinoma čvorova ω_n

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

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, ova 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

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

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

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

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

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

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

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

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

- jedan ili oba ruba intervala integracije $[a, b]$,

s tim da zadani rubni čvor mora biti konačan.

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

Neka je lijevi rub intervala — točka a, konačna

- i zadana kao čvor integracije $x_1 = a$.

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

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

Ove integracijske formule zovu se Gauss–Radau formule.

Prema prethodnom teoremu, pripadni polinom čvorova

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

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

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

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).

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

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

pri čemu je A_n vodeći koeficijent polinoma p_n,

$$a_n = \frac{A_{n+1}}{A_n}, \qquad \gamma_n = \|p_n\|^2 = \langle p_n, p_n \rangle > 0.$$

Dokaz. Treba izračunati integrale za težine

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

Težine Gaussovih integracijskih formula

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. 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

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

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

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

Težine Gaussovih integracijskih formula

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

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

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

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

Druga 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

$$\widetilde{z}_{k,1} = p_0(x_k)/\|p_0\| = 1/\sqrt{\mu_0} > 0 \quad \Rightarrow \quad \|\widetilde{z}_k\|_2 > 0.$$

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.

$\blacksquare$

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 $x_2, \ldots, x_{n-1}$ su dvostruki.

Konvergencija Gaussovih formula

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

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

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 $E_n(\widehat{p}_{2n-1}) = 0$. Zatim, redom, dobivamo

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

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

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

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 $\widehat{p}_{n-1}$.

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,
- za simetrični par čvorova, težine w_k su jednake.

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

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

Numerička integracija

Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti

Gaussove integracijske formule

Primjer za težinske formule

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula

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

$$\begin{aligned}
\ell_1(x) &= \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x - 1}{0 - 1} = 1 - x, \\
\ell_2(x) &= \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x - 0}{1 - 0} = x,
\end{aligned}$$

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 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 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:

$$\begin{aligned} 2a_0 + \frac{2}{3} a_1 &= -\frac{2}{5} \\ \frac{2}{3} a_0 + \frac{2}{5} a_1 &= -\frac{2}{7}. \end{aligned}$$

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

$$w_1^G = 1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}} \approx 1.3042903097250922 8525,$$
$$w_2^G = 1 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}} \approx 0.6957096902749077 1475.$$

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

$$I = \int_0^1 x^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx = 2C(1) \approx 1.5597868007536456895,$$

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

$$I_{NC} = \frac{4}{3} \approx 1.3333333333333333333,$$
$$I_G \approx 1.5575895595933938682,$$

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

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

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

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

gdje je

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

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

Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Težinske koeficijente w_k i w_k' možemo napisati i tako da

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

Dobivamo sljedeće formule za težine u integracijskoj formuli I_n'

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

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 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 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

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

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 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

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

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

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

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

Odavde odmah slijedi i

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

Gaussove formule kao interpolacijske formule

Prema očekivanju, dobivamo isti zaključak kao i ranije.

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

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

Pripadni polinom čvorova ω_n mora biti jednak

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

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

Usput, dobivamo i grešku za Gaussove integracijske formule!

Greška Gaussovih integracijskih formula

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

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

Ako $f^{(2n)}$ 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 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 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.

Numerička integracija

Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti

Gaussove integracijske formule

Primjer za težinske formule

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Pregled klasičnih Gaussovih integracijskih formula

Gauss–Legendreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Legendreove formule (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

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

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

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

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

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

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

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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