Numerička integracija:

- Uvod
  - Trapezna formula
  - Simpsonova formula
  - Pravokutna formula
  - Gauss-ova formula
- Newton-Cotesove formule
  - Izvod metode
  - Ocjena pogreške
  - Računanje čvorova i težina
- Integracijske formule s povišenom egzaktnošću
- Rombergov algoritam
  - Eulet-Maclaurinova formula
  - Rombergov algoritam
  - Trapezna formula i periodičke funkcije
- Adaptivne integracijske formule

Numerička integracija

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

Želimo izračunati integral

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx.$$

Za relativno mali skup funkcija f

- takav se integral može egzaktno izračunati,
- pa jedino preostaje približno, numeričko računanje $I(f)$.

Osnovna ideja numeričke integracije je približno računanje integrala $I(f)$, korištenjem:

- vrijednosti funkcije f (eventualno i vrijednosti derivacija) na nekom konačnom skupu točaka ($\approx$ Darboux).

Opća integracijska formula ima oblik

$$I(f) = I_m(f) + E_m(f),$$

pri čemu je

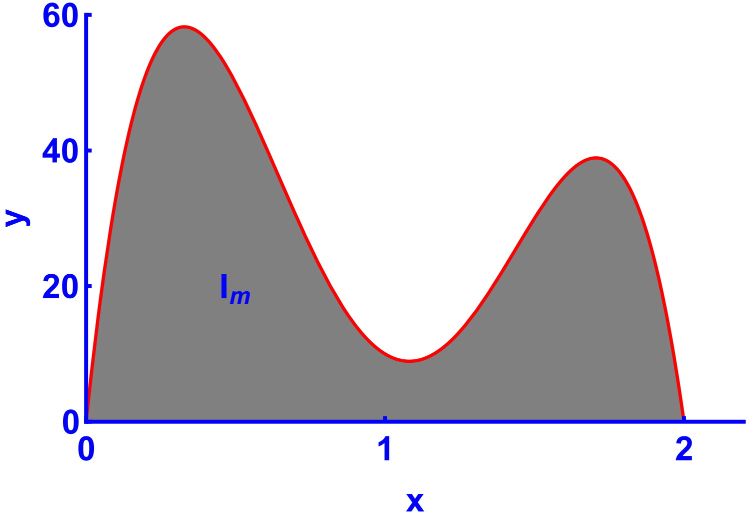
- $m + 1$ = broj korištenih točaka (čvorova integracije),
- $I_m(f)$ = pripadna aproksimacija integrala,
- $E_m(f)$ = pritom napravljena greška.

Ako koristimo samo funkcijske vrijednosti, aproksimacija $I_m(f)$ ima oblik

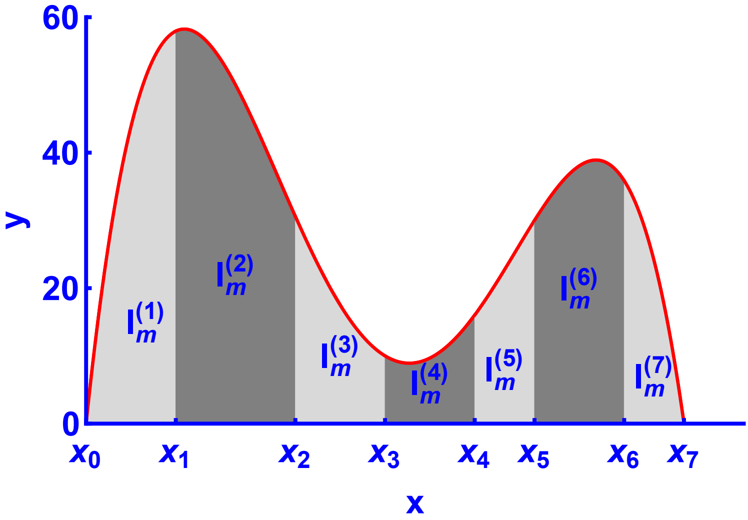
$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f\big(x_k^{(m)}\big),$$

pri čemu je m neki unaprijed zadani broj, $m \in \mathbb{N}_0$.

- $x_k^{(m)}$ - čvorovi integracije
- $w_k^{(m)}$ - težinski koeficijenti (težine)



Integracijske formule ne primjenjuju se na cijelom području integriranja. Složena formula i nestabilno računanje.



Segment podijalimo na više dijelova.
Na svakom podsegmentu primijenimo integracijsku formulu.

Trapezna formula

Odredimo najjednostavniju formula (za $m = 1$):

$$I_1(f) = w_0^{(1)} f(x_0) + w_1^{(1)} f(x_1),$$

Izostavimo indekse:

$$I_1(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

Težinske koeficijente w_0 i w_1 određujemo iz uvjeta da je formula egzaktna na polinomima što višeg stupnja:

$$\int_{x_0}^{x_1} P_k(x)\, dx = w_0 P_k(x_0) + w_1 P_k(x_1), \quad k \geq 0,$$

Dva nepoznata koeficijenta trebaju nam barem dvije jednadžbe.

Uvrštavamo redom $x^0, x^1, \ldots$:

$$
\begin{aligned}
x_1 - x_0 &= \int_{x_0}^{x_1} x^0 \, dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1. \\
\frac{{x_1}^2 - {x_0}^2}{2} &= \int_{x_0}^{x_1} x \, dx = w_0 \cdot x_0 + w_1 \cdot x_1.
\end{aligned}
$$

Sustav jednadžbi s dvije nepoznanice:

$$
\begin{aligned}
w_0 + w_1 &= x_1 - x_0 \\
x_0 \, w_0 + x_1 \, w_1 &= \frac{{x_1}^2 - {x_0}^2}{2}.
\end{aligned}
$$

Rješenje

$$
w_0 = \frac{1}{2} (x_1 - x_0) = \frac{h}{2}, \quad w_1 = \frac{1}{2} (x_1 - x_0) = \frac{h}{2}.
$$

(Osnovna) trapezna formula

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1))$$

Interval $[a, b]$ podijelimo na n jednakih dijelova:

$$a = x_0 < x_1 < \ldots x_n = b, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + i \cdot h.$$

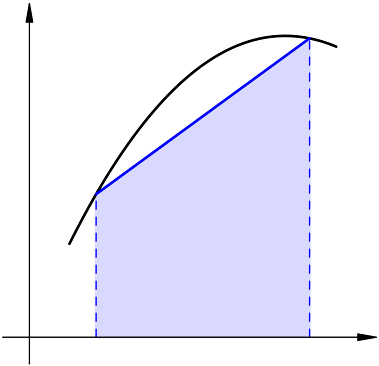
$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) = \\ &= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right) \end{aligned}$$

(Produljena) trapezna formula

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)$$

Zašto baš trapezna formula?

Slika aproksimacije integrala funkcije f površinom trapeza.



$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx h\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2}$$

Koje polinome egzaktno integrira trapezna formula?

Je li trapezna formula egzaktna za

$$f(x) = x^2.$$

Vrijedi

$$\frac{x_1^3 - x_0^3}{3} = \int_{x_0}^{x_1} x^2 \, dx \neq I_1(x^2) = \frac{x_0^2 + x_1^2}{2} (x_1 - x_0).$$

Nije.

Drugi pristup.

- Povučemo li kroz točke $(x_0, f(x_0))$ i $(x_0, f(x_0))$ interpolacijski polinom stupnja 1 za funkciju f,
- a zatim ga egzaktno integriramo,

dobivamo opet trapeznu formulu.

Vrijedi

$$\begin{aligned}\text{aproksimacija integrala} &= \text{integral aproksimacije}\\ \text{aproksimacija integrala} &= \text{integral (interpolacije)}.\end{aligned}$$

Ovaj zaključak nam omogućava nalaženje greške trapezne formule! Slično vrijedi i za ostale integracijske formule.

Integral linearnog interpolacijskog polinoma

Interpolacijski polinom:

$$p_1(x) = \frac{(x - x_1)^2}{2(x_0 - x_1)} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_1} p_1(x)\,dx &= \left(\frac{(x - x_1)^2}{2(x_0 - x_1)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2(x_1 - x_0)} f(x_1) \right) \Big|_{x_0}^{x_1} \\
&= \frac{x_1 - x_0}{2} f(x_1) - \frac{x_0 - x_1}{2} f(x_0) \\
&= \frac{h}{2}(f(x_1) + f(x_0))
\end{aligned}$$

Ocjena pogreške trapezne formule

Interpolacijska pogreška:

$$f(x) = p_1(x) + (x - x_0)\,(x - x_1)\,\frac{f''(\xi_x)}{2}.$$

Pogreška trapezne formule:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} p_1(x)\,dx + \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\,\frac{f''(\xi_x)}{2}\,dx.$$

Pogreška trapezne formule:

$$E_1(f) = \int_{x_0}^{x_1} e_1(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} (x - a)\,(x - b)\,\frac{f''(\xi_x)}{2}\,dx.$$

Jednostavno:

$$E_1(f) = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\,\frac{f''(\xi_x)}{2}\,dx = \frac{f''(\bar{\xi})}{2}\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\,dx.$$

Ali u pravilu krivo!

Teorem srednje vrijednosti za integrale (g nepewkidna)

$$\int_a^b g(x)\,dx = g(\xi)\int_a^b dx = g(\xi)(b - a).$$

Općenitija verzija ($w(x) \geq 0$)

$$\int_a^b w(x)g(x)\,dx = g(\xi)\int_a^b w(x)\,dx.$$

Jer je

$$(x - x_0)(x - x_1) \le 0 \quad \forall x \in [x_0, x_1]$$

zbilja postoji $\bar{\xi}$ tako da je

$$E_1(f) = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\xi_x)}{2}\, dx = \frac{f''(\bar{\xi})}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\, dx.$$

Ni ovo nije potpuno ispravno.

Je li $f''(\xi_x) = f''(\xi(x))$ neprekidna?

Potpuno ispravno je koristiti ocjenu pogreške

$$f(x) = p_1(x) + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x].$$

Sada je

$$
\begin{aligned}
E_1(f) &= \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\, f[x_0, x_1, x]\, dx \\
&= f[x_0, x_1, \xi] \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\, dx. \\
&= \frac{f''(\bar{\xi})}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\, dx.
\end{aligned}
$$

Jer je

$$
\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\, dx = -\frac{(x_1 - x_0)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}
$$

Integracijska pogreška je

$$
E_1(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi).
$$

Ocjena pogreške za produljenu trapeznu formulu

Produljena trapezna formula:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) = \\
&= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) - \frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \\
&= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) - \frac{nh^3}{12}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)
\end{aligned}
$$

Aritmetička sredina:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) = f''(\xi).$$

Uz $n\,h = b - a$, vrijedi

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) - \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)$$

Pogreška: h^2 - metoda reda 2.

Simpsonova formula

Sljedeći primjer je metoda za $m = 2$:

$$I_2(f) = w_0^{(2)} f(x_0) + w_1^{(2)} f(x_1) + w_2^{(2)} f(x_2).$$

Označimo

$$h := \frac{x_2 - x_0}{2}.$$

Neka je

$$x_1 = \frac{x_0 + x_2}{2}.$$

Nije nužno ali su formule jednostavnije.
I izbacimo indekse:

$$I_2(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2).$$

Koeficijenti preko egzaktnosti na polinomima

3 koeficijenta $\quad\rightarrow\quad$ 3 jednadžbe $\quad\rightarrow\quad$ egzaktnost na $\{x^0, x^1, x^2\}$:

$$
\begin{aligned}
x_2 - x_0 &= \int_{x_0}^{x_2} x^0\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1. \\
\frac{x_2^2 - x_0^2}{2} &= \int_{x_0}^{x_2} x^1\,dx = w_0 \cdot x_0 + w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2. \\
\frac{x_2^3 - x_0^3}{3} &= \int_{x_0}^{x_2} x^2\,dx = w_0 \cdot x_0^2 + w_1 \cdot x_1^2 + w_2 \cdot x_2^2.
\end{aligned}
$$

Rješenje:

$$w_0 = w_2 = \frac{h}{3} \quad w_1 = \frac{4h}{3}.$$

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\Big).$$

Koeficijenti preko interpolacijskog polinoma

Interpolacijski polinom:

$$\begin{aligned} p_3(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \end{aligned}$$

Formula

$$
\begin{aligned}
I_3(f) &= \int_{x_0}^{x_2} p_3(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0)\,dx + \\
&\quad + \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1)\,dx + \\
&\quad + \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)\,dx \\
&= \frac{f(x_0)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_1)(x-x_2)\,dx - \frac{f(x_1)}{h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_2)\,dx \\
&\quad + \frac{f(x_2)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_1)\,dx = \ldots = \\
&= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right).
\end{aligned}
$$

Egzaktnost integracije za x^3

Simpsonova formula je egzaktna na polimomima stupnja ≤ 2. Što je s višim stupnjem?

$$\int_{x_0}^{x_2} x^3 \, dx = \frac{x_2^4 - x_0^4}{4}.$$

$$I_2(x^3) = \ldots = \frac{x_2^4 - x_0^4}{4}.$$

Simpsonova formula je egzaktna na polinomima stupnja 3!

Ovo se moglo dobiti i bez puno računanja:

Funkcija $(x - x_1)^3$ je antiseimetrična na $[x_0, x_2]$.

Zato je

$$\int_{x_0}^{x_2} (x - x_1)^3 \, dx = 0.$$

S druge strane je Simpsonova formula simetrična

$$I_3(f) = \frac{h}{3} \Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \Big).$$

pa je

$$I_3\Big((x - x_1)^3 \Big) = 0.$$

Ocjena pogreške za Simpsonovu formulu

Interpolacijska pogreška:

$$\begin{aligned} e_2(x) &= f(x) - p_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) f[x_0, x_1, x_2, x] = \\ &= (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} \end{aligned}$$

Integracijska pogreška

$$E_2(f) = \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx - I_2(f) = \int_{x_0}^{x_2} e_2(x)\,dx.$$

Funkcija

$$(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

mijenja predznak na $[x_0, x_2]$ pa se ne može direktno primijeniti teorem srednje vrijednosti.

Moglo bi:

$$
\begin{aligned}
|E_2(f)| &\leq \int_{x_0}^{x_2} |(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)|\, |f[x_0, x_1, x_2, x]|\, dx \\
&= \frac{|f^{(3)}(\xi)|}{6} \int_{x_0}^{x_2} |(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)|\, dx \\
&= \frac{h^4}{12} |f^{(3)}(\xi)|
\end{aligned}
$$

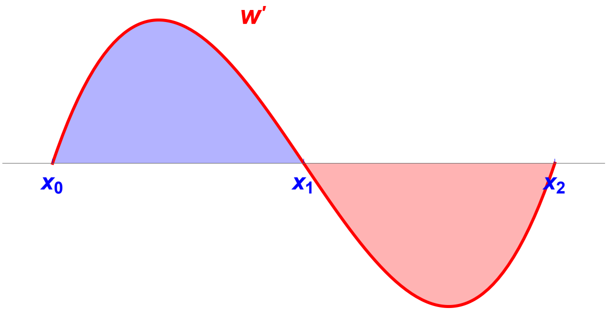
- Nije optimalno.
- I ne pokazuje da je formula egzaktna za x^3.
- $E_2(x^3) = 0$.

Definirajmo
$$w(x) = \int_{x_0}^{x} (t - x_0)(t - x_1)(t - x_2)\, dt.$$
Pokažimo da vrijedi
$$w(x_0) = w(x_2) = 0, \quad w(x) > 0, \quad x \in (x_0, x_2).$$

- $w(x_0) = 0$ očito
- $(t - x_0)(t - x_1)(t - x_2)$ je antisimetrična s obzirom na x_1 pa je integral jednak 0. (Može se i izračunati.)
- x_1 je jedina nultočka od w' na $(x_0, x_2) \rightarrow$ jedini ekstrem.
- Jer je $w(x_1) > 0$ to je maksimum ($w(x) > 0$ na (x_0, x_1)
- $\Rightarrow \quad w(x) > 0$ na (x_0, x_2)

Dd

Graf funkcije w'



Integracijska pogreška:

$$
\begin{aligned}
E_2(f) &= \int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\, f[x_0, x_1, x_2, x]\, dx \\
&= \int_{x_0}^{x_2} w'(x)\, f[x_0, x_1, x_2, x]\, dx \\
&= w(x) f[a, b, c, x] \Big|_{x_0}^{x_2} - \int_{x_0}^{x_2} w(x)\, \frac{d}{dx} f[x_0, x_1, x_2, x]\, dx \\
&= {\color{red}0} - \int_{x_0}^{x_2} w(x)\, f[x_0, x_1, x_2, x, {\color{red}x}]\, dx \\
&= -f[x_0, x_1, x_2, x, {\color{red}\eta}, {\color{red}\eta}] \int_{x_0}^{x_2} w(x)\, dx \\
&= -\frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \int_{x_0}^{x_2} w(x)\, dx
\end{aligned}
$$

Izračunamo

$$\int_{x_0}^{x_2} w(x)\,dx = \ldots = \frac{4h^5}{15}$$

Ocjena pogreške za Simpsonovu formulu:

$$E_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Produljena Simpsonova formula

Interval $[a, b]$ podijelimo na paran broj podintervala (n je parni broj).

Produljena Simpsonova formula:

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{3}(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1})) + f(x_{2i}) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i) = \\
&= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n) \right) - \\
&\quad - \frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) =
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
= \quad & \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)\right) - \\
& - \frac{\frac{n}{2}h^5}{90}\,\frac{1}{\frac{n}{2}}\sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) = \\
= \quad & \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)\right) - \\
& - (b-a)\frac{h^4}{180} f^{(4)}(\xi)
\end{aligned}
$$

Pogreška: h^4 - metoda reda 4.

Produljena Simpsonova formula:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)\right) - $$

$$- (b-a)\frac{h^4}{180}\, f^{(4)}(\xi)$$

Formula srednje točke
Pravokutna formula

Odredimo formulu oblika:

$$I_0(f) = w_0\, f(\zeta_0).$$

Treba odrediti koeficijent w_0 i točku ζ_0 da formula bude egzaktna na intervalu $[x_0, x_1]$ za polinome što višeg stupnja.

Označimo $H := x_1 - x_0$.

2 nepoznanice $\rightarrow$ 2 jednadžbe $\rightarrow$ egzaktnost na $\{x^0, x^1\}$:

$$H = x_1 - x_0 = \int_{x_0}^{x_1} x^0 \, dx = w_0 \cdot 1$$

$$H \frac{x_1 + x_0}{2} = \frac{x_1^2 - x_0^2}{2} = \int_{x_0}^{x_1} x^1 \, dx = w_0 \cdot \zeta_0$$

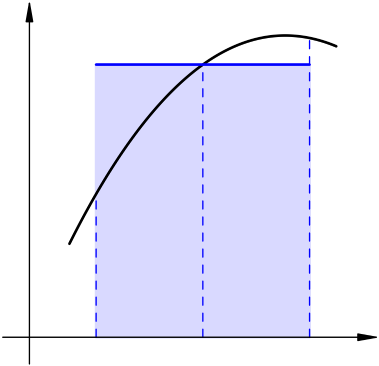
Rješenje:

$$w_0 = H \quad \zeta_0 = \frac{x_1 + x_0}{2}.$$

Formula srednje točke

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) \, dx \approx hf(\zeta_0), \quad \zeta_0 = x_0 + \frac{1}{2} H$$

Aproksimacija integrala funkcije f površinom pravokutnika.



Gaussova formula

Odredimo formulu oblika:

$$I_1(f) = w_0\, f(\zeta_0) + w_1\, f(\zeta_1).$$

Treba odrediti koeficijente $w_0,\ w_1$ i točke ζ_0, ζ_1 da formula bude egzaktna na intervalu $[x_0, x_1]$ za polinome što višeg stupnja.

Označimo $H := x_1 - x_0$.

4 nepoznanice $\rightarrow$ 4 jednadžbe $\rightarrow$ egzaktnost na $\{x^0, x^1, x^2, x^3\}$.

Bolje je koristiti $(x - \bar{x})^k$ gdje je $\bar{x} = (x_0 + x_1/2)$. Simetrija.

$$
\begin{aligned}
H &= \int_{x_0}^{x_1} 1\,dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 \\
0 &= \int_{x_0}^{x_1} (x - \bar{x})\,dx = w_0 \cdot (\zeta_0 - \bar{x}) + w_1 \cdot (\zeta_1 - \bar{x}) \\
\frac{H^3}{12} &= \int_{x_0}^{x_1} (x - \bar{x})^2\,dx = w_0 \cdot (\zeta_0 - \bar{x})^2 + w_1 \cdot (\zeta_1 - \bar{x})^2 \\
0 &= \int_{x_0}^{x_1} (x - \bar{x})^3\,dx = w_0 \cdot (\zeta_0 - \bar{x})^3 + w_1 \cdot (\zeta_1 - \bar{x})^3
\end{aligned}
$$

Nelinearni sustav.

Rješenje: U ovom trenutku nije bitno.

Ali...

Ako pretpostavimo simetriju:

$$w_0 = w_1 \quad \Rightarrow \quad w_0 = w_1 = \frac{H}{2}.$$

Iz druge jednadžbe slijedi:

$$\bar{x} - \zeta_0 = \zeta_1 - \bar{x}$$

Opet simetrija.

Iz treće jednadžbe slijedi:

$$\zeta_{0,1} = \bar{x} \mp \frac{H}{2\sqrt{3}}.$$

Newton-Cotesove formule

Općenito, želimo aproksimirati

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

gdje je w težinska funkcija ($w > 0$ ili $w \geq 0$ uz dodatne uvjete).

Prirodno ograničenje je: $x_k^{(m)} \in [a, b]$.

I radi jednostavnosti $x_k^{(m)} < x_{k+1}^{(m)}$.

Napomena. Zbog jednostavnosti, ispuštamo indekse m.

Težinske koeficijente w_k (a i točke x_k) određujem iz uvjeta egzaktnosti na nekom skupu funkcija.

Npr. egzaktnost na polinomima $\{1, x, x^2, \ldots\}$.

Ili egzaktnost na $\{1, \exp x, \exp 2x, \ldots\}$.

Definicija

Za integracijsku formulu ćemo reći da ima polinomni stupanj egzaktnosti d ako je

$$E_m(f) = 0 \quad \text{za sve} \quad f \in \mathcal{P}_d,$$

pri čemu je $\mathcal{P}_d$ vektorski prostor polinoma stupnja manjeg ili jednakog d.

Ukoliko je u

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

- $x_0 = a$ i $x_m = b$ - **zatvorena** integracijska formula
- $x_0 > a$ i $x_m < b$ - **otvorena** integracijska formula
- može i kombinacija $x_0 > a$ i $x_m = b$ ili $x_0 = a$ i $x_m < b$.

Određivanje koeficijenata

Neka je zadana mreža $a \leq x_0 < x_1 < \ldots x_n \leq b$.

Interpolacijski polinom u Lagrangeovoj bazi:

$$P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} L_k(x) f(x_k),$$

gdje je

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

$$\begin{aligned}
\int_a^b w(x)f(x)\,dx &= \int_a^b w(x)P_m(x)\,dx + \int_a^b w(x)e_m(x)\,dx \\
&= \sum_{k=0}^{m} \int_a^b w(x)L_k(x)\,dx f(x_k) + \int_a^b w(x)e_m(x)\,dx
\end{aligned}$$

Dakle,

$$w_k = \int_a^b w(x)L_k(x)\,dx = \int_a^b w(x) \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{m} \frac{x-x_i}{x_k-x_i}\,dx$$

i

$$E_m(f) = \int_a^b w(x)e_m(x)\,dx$$

Definicija

Integracijsku formulu oblika

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k f(x_k),$$

gdje je $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_m \le m$, ćemo zvati **interpolacijska formula** ukoliko težinski koeficijenti zadovoljavaju

$$w_k = \int_a^b w(x) L_k(x)\, dx = \int_a^b w(x) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}\, dx.$$

Ukoliko je $a = x_0$ i $b = x_m$ formula se naziva **zatvorena** a ukoliko je $a < x_0$ i $b > x_m$ formula se naziva **otvorena**.

- Jer je formula bazirana na Lagrangeovoj interpolaciji, ponekad se koristi i naziv interpolacijska formula Legrengeovog tipa.
- Integracijske formule se mogu izvesti i iz formula za Hermiteovu interpolaciju. Takve formule uključuju i derivacije $f'(x_k)$. (Interpolacijske formule Hermiteovog tipa.)
- Integracijske formule mogu biti niti otvorene niti zatvorene (čvor u samo jednom rubu).

Teorem

Integracijska formula

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k f(x_k),$$

ima stupanj egzaktnosti barem m ako i samo ako je interpolacijska.

Dokaz. Interpolacijska očito ima stupanj egzaktnosti barem m.

Ukoliko integracijska formula ima stupanj egzaktnosti m, egzaktna je na L_k:

$$\int_a^b w(x) L_k(x)\,dx = \sum_{i=0}^{m} w_i L_k(x_i) = w_k L_k(x_k) = w_k$$

pa je formula interpolacijska. $\square$

Definicija

Newton-Cotesove formule su interpolacijske integracijske formule kod kojih su čvorovi integracije $\{x_i\}_{i=0}^{m} \subset [a, b]$ ekvidistantni.
Ukoliko je $a = x_0$ i $b = x_m$ formula se naziva **zatvorena** a ukoliko je $a < x_0$ i $b > x_m$ formula se naziva **otvorena**.

Za večinu svojstava koje ćemo pokazati, ekvidistantnost nije toliko važna u definiciji koliko činjenica da su čvorovi unaprijed zadani nevezano uz točnost formule.

Daleko najčešće se koriste ekvidistantni čvorovi.
Formule su jednostavnije.

Kod otvorenih formula se misli na to da su a i b od x_0 i x_n udaljeni kao i ostali susjedni čvorovi.

Ukoliko 'zaboravimo' ekvidistantnost, u istom kontekstu možemo promatrati formule koje uključuju i derivacije.

Npr., čvorovi: $t_0 = t_1 < t_2 = t_3 < \ldots < t_{2m-1} = t_{2m}$ i $x_k = t_{2k}$ definiraju formulu oblika

$$\int_a^b w(x) f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{m} w_k f(x_k) + \sum_{k=0}^{m} \bar{w}_k f'(x_k).$$

Koeficijenti Newton-Cotesovih formula

$$w_k = \int_a^b w(x) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}\, dx$$

Ekvidistantna mreža: $x_{k+1} - x_k = h$.

Supstitucija: $t = (x - x_0)/h$:

$$\begin{aligned} w_k &= h \int_{(a-x_0/h)}^{(b-x_0)/h} w(x_0 + th) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{h(t-i)}{h(k-i)}\, dt = \\ &= h \frac{(-1)^{m-k}}{k!(m-k)!} \int_{(a-x_0/h)}^{(b-x_0)/h} w(x_0 + th) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} (t-i)\, dt \end{aligned}$$

Najčešće se koriste formule gdje je $w(x) \equiv 1$.

Kod zatvorenih Newton-Cotesovih formula je

$$a = x_0, \quad , b = x_m \quad \Rightarrow \quad \frac{a - x_0}{h} = 0, \quad \frac{b - x_0}{h} = m.$$

Koeficijenti zatvorenih Newton-Cotesovih formula

$$w_k = h \frac{(-1)^{m-k}}{k!(m-k)!} \int_0^m \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} (t - i)\, dt$$

Kod otvorenih Newton-Cotesovih formula je

$$a = x_0 - h, \quad , b = x_m + h \quad \Rightarrow \quad \frac{a - x_0}{h} = -1, \quad \frac{b - x_0}{h} = m + 1.$$

Koeficijenti otvorenih Newton-Cotesovih formula

$$w_k = h\frac{(-1)^{m-k}}{k!(m-k)!} \int_{-1}^{m+1} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} (t - i)\, dt$$

Simetrija težinskih koeficijenata

Vrijedi $w_k = w_{m-k}$ (zatvorena formula):

$$
\begin{aligned}
w_k &= h\frac{(-1)^{m-k}}{k!(m-k)!}\int_0^m \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{m} (t-i)\,dt = (u = m-t) \\
&= -h\frac{(-1)^{m-k}}{k!(m-k)!}\int_m^0 \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{m} (m-u-i)\,du = \\
&= h\frac{(-1)^{-(m-k)}}{k!(m-k)!}\int_0^m \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{m} (u-(m-i))(-1)^m\,du = \\
&= h\frac{(-1)^{m-(m-k)}}{k!(m-k)!}\int_0^m \prod_{\substack{j=0\\ j\neq m-k}}^{m} (u-j)\,du = w_{m-k}
\end{aligned}
$$

Koeficijenti zatvorenih Newton–Cotesovih formula

$w_k = A\, W_k\, h,$

m	A	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	
1	$\frac{1}{2}$	1	1				Trapezna
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1			Simpsonova
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1		Simpsonova 3/8-ska
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7	Booleova
5	$\frac{5}{288}$	19	75	50	50	75	
6	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272	27	Weddleova
7	$\frac{7}{17280}$	751	3577	1323	2989	2989	
8	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10496	-4540	

Koeficijenti otvorenih Newton-Cotesovih formula

m	A	W_0	W_1	W_2
0	2	1		
1	$\frac{3}{2}$	1	1	
2	$\frac{4}{3}$	2	-1	2
3	$\frac{5}{24}$	11	1	1
4	$\frac{3}{10}$	11	-14	26

Zaključak. Koeficijenti u integracijskim formulama za veće m

- poprimaju i pozitivne i negativne predznake,
- rastu po apsolutnoj vrijednosti.

Zbog kraćenja može doći do velike greške u rezultatu.

Egzaktnost Newton-Cotesovih formula na polinomima

Promatramo funkciju

$$(x - c)^{2k+1}, \quad c = \frac{a+b}{2}, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Antisimetrična s obzirom na sredinu intervala $[a, b]$.

$$\int_a^b w(x)(x - c)^{2k+1}\, dx = 0$$

ukoliko je w simetrična na $[a, b]$.

Zbog simetrije koeficijenata u Newton-Cotesovim formulama:

$$I_m\left((x - c)^{2k+1}\right) = \sum_{i=0}^{m} w_i(x_i - c)^{2k+1} = 0.$$

- Ukoliko je Newton-Cotesova formula egzaktna na $\mathcal{P}_{2k}$ egzaktna je i na $\mathcal{P}_{2k+1}$.
- Ovo smo uočili kod Simpsonove formule. Izvedena je iz uvjeta egzaktnosti na polinomima stupnja 2 a egzaktna je na polinomima stupnja 3.
- I_{2k} i I_{2k+1} imaju isti polinomni stupanj egzaktnosti.
- $\rightarrow$ Preferira se korištenje I_{2k}.
  Jednostavnija a isti stupanj točnosti. (Konstanta u ocjeni pogreške nije ista.)

Ocjena pogreške

Iz

$$F(x) = P_m(x) + e_m(x)$$

slijedi

$$\int_a^b w(x)F(x)\,dx = I_m(x) + \int_a^b w(x)e_m(x).$$

Pogreška integracije:

$$E_m = \int_a^b w(x)e_m(x)\,dx = \int_a^b w(x)\,\omega_m(x)f[x_0,\ldots,x_n,x]\,dx.$$

Jednostavni pristup:

$$
\begin{aligned}
|E_m| &\leq \int_a^b w(x)|\omega_m(x)|\,|f[x_0,\ldots,x_m,x]|\;dx \\
&= \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\int_a^b w(x)|\omega_m(x)|\,dx = (t=(x-x_0)/h) \\
&= \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}h^{m+2}\int_0^m w(x)\prod_{i=0}^{m}|t-i|\;dt \\
&= C_m\,h^{m+2}\,\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}
\end{aligned}
$$

- Ovo nije optimalno.
- Za parni m je formula egzaktna na $\mathcal{P}_{m+1}$.
  $E_m(x^{m+1}) = 0$. Ova ocjena je već od 0.
- Simpsonova formula

$$
\begin{aligned}
|E_2(f)| &\leq \frac{h^4}{12}|f^{(3)}(\xi)| \\
E_2(f) &= -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)
\end{aligned}
$$

Lema

Pretpostavimo da je $m \in \mathbb{N}$ paran. Neka je $[a, b] \subset \mathbb{R}$ i čvorovi $a = x_0 < x_1 < \ldots x_n = b$ ekvidistantni $x_i = x_0 + i\,h$. Neka je $\omega_m(x) = \prod_{i=0}^{m}(x - x_i)$ i

$$\Omega_m(x) = \int_a^x \omega_m(t)\,dt.$$

Tada je $\Omega_m(a) = 0$, $\Omega_m(b) = 0$ i

$$\Omega_m(x) > 0, \quad \forall x \in (a, b).$$

Dokaz. E. Isaacson, H.B. Keller, 'Analysis of Numerical Methods', Dover,1994.

Dokaz se zasniva na dvije leme:

Lema

$$\omega_m(x_{m/2} + \xi) = (-1)^{m+1} \omega_m(x_{m/2} - \xi)$$

Simetrija/antisimetrija - pokazano prije.

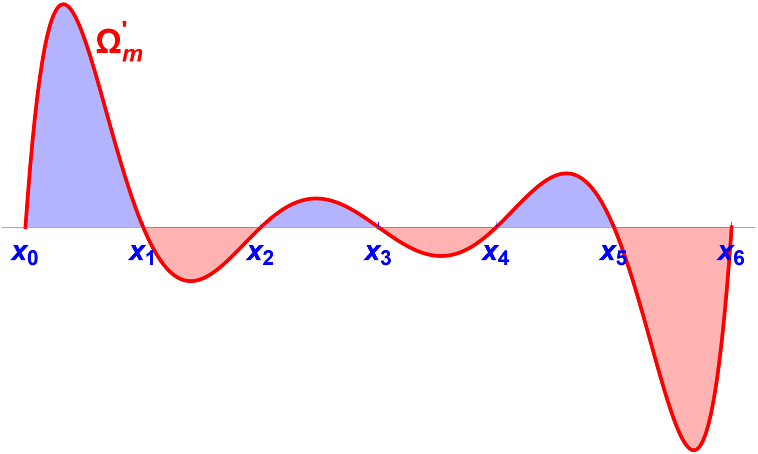
Lema

a) *Za* $a < \xi + h \leq x_{n/2}$ *i* $\xi \neq x_j$, $j = 0, 1, \ldots, m$:

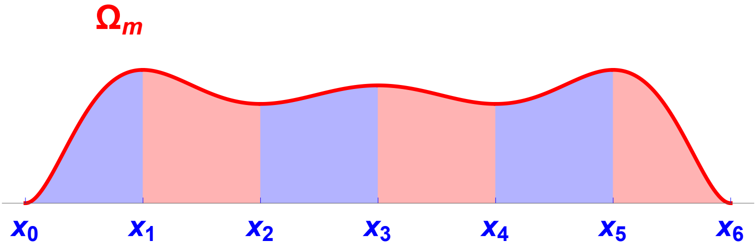
$$|\omega_m(\xi + h)| < |\omega_m(\xi)|;$$

b) *Za* $x_{m/2} \leq \xi < b$ *i* $\xi \neq x_j$, $j = 0, 1, \ldots, m$:

$$|\omega_m(\xi)| < |\omega_m(\xi + h)|.$$



$$|\omega_m(\xi + h)| < |\omega_m(\xi)| \quad \Rightarrow \quad \left| \int_{x_1}^{x_2} \omega_m(t)\, dt \right| < \left| \int_{x_0}^{x_1} \omega_m(t)\, dt \right|$$



$$\Omega_m'(x_1) = 0 \quad \text{i} \quad \Omega_m(x_1) > 0, \quad \text{I. maksimum}$$

$$\Omega_m'(x_2) = 0 \quad \text{i} \quad \Omega_m(x_2) = \int_{x_0}^{x_1} \omega_m(t)\,dt + \int_{x_1}^{x_2} \omega_m(t)\,dt > 0$$

I. minimum

...

Na $(x_0, x_{n/2}]$ je u lokalnim minimumima

$$\Omega_m(x_{2j}) > 0$$

pa je

$$\Omega_m(x) > 0 \quad \forall x \in \left(x_0, x_{n/2}\right].$$

Zbog simetrije to vrijedi i na $[x_{n/2}, x_n)$.

Na kraju,

$$\Omega_m(a) = \int_a^a \omega_m(t)\, dt = 0.$$

Zbog antisimetrije ω_m vrijedi

$$\Omega_m(b) = \int_a^b \omega_m(t)\, dt = 0.$$

Teorem (Ocjena pogreške za parni red)

Neka je $[a, b] \subset \mathbb{R}$*, neka je* m *paran i* $f \in C^{m+2}(a, b)$*. Tada zatvorena Newton-Cotesova formula reda* n *za* $w \equiv 0$ *i neki* $\xi \in (a, b)$ *zadovoljava*

$$E_m(f) = C_m \frac{f^{(m+2)}(\xi)}{(m+2)!}$$

gdje je

$$C_m = \int_a^b x\,\omega_m(x)\,dx < 0.$$

Dokaz.

$$
\begin{aligned}
E_m &= \int_a^b \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx = \text{parc. int.} \\
&= \Omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x] \,\Big|_a^b - \int_a^b \Omega_m(x) \frac{d}{dx} f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx = \\
&= 0 - \int_a^b \Omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x, x]\, dx = (\Omega_m > 0) \\
&= -f[x_0, \ldots, x_m, \eta, \eta] \int_a^b \Omega_m(x)\, dx = \\
&= -\frac{f^{(m+2)}(\xi)}{(m+2)!} \int_a^b \Omega_m(x)\, dx
\end{aligned}
$$

Jer je $\Omega_m > 0$:

$$\begin{aligned} 0 &< \int_a^b \Omega_m(x)\,dx = \text{parc. int.} \\ &= x\,\Omega_m(x)\,\Big|_a^b - \int_a^b x\,\Omega_m'(x)\,dx = \\ &= -\int_a^b x\,\omega_m(x)\,dx. \end{aligned}$$

$\square$

Teorem (Ocjena pogreške za neparni red)

Neka je $[a, b] \subset \mathbb{R}$*, neka je* m *neparan i* $f \in C^{m+1}(a, b)$*. Tada zatvorena Newton-Cotesova formula reda* n *za* $w \equiv 0$ *i neki* $\xi \in (a, b)$ *zadovoljava*

$$E_m(f) = C_m \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}$$

gdje je

$$C_m = \int_a^b \omega_m(x)\, dx < 0.$$

Dokaz. Uočimo da je $\omega_m(x) < 0$ na $(b-h, b) = (x_{m-1}, x_m)$.

Teorem srednje vrijednosti:

$$\begin{aligned} E_m &= \int_a^b \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx = \\ &= \int_a^{b-h} \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx + \int_{b-h}^b \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx = \\ &= \int_a^{b-h} \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx + f[x_0, \ldots, x_m, \xi] \int_{b-h}^b \omega_m(x)\, dx \end{aligned}$$

Označimo

$$\omega_m(x) = \omega_{m-1}(x)(x - x_m) = \omega_{m-1}(x)(x-b) \quad \text{i} \quad \Omega_m = \int_a^x \omega_m(x)\, dx.$$

Sada je

$$
\begin{aligned}
I_1 &= \int_a^{b-h} \omega_m(x) f[x_0, \ldots, x_m, x]\, dx = \\
&= \int_a^{b-h} \omega_{m-1}(x)(x - x_m)\, \frac{f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x] - f[x_0, \ldots, x_m]}{x - x_m}\, dx = \\
&= \int_a^{b-h} \Omega'_{m-1}(x) \left(f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x] - f[x_0, \ldots, x_m] \right) dx = \\
&= \int_a^{b-h} \Omega'_{m-1}(x) f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x]\, dx - \\
&\quad - f[x_0, \ldots, x_m] \int_a^{b-h} \Omega'_{m-1}(x)\, dx =
\end{aligned}
$$

$m-1$ je paran pa je (Lema) $\Omega_{m-1}(x) > 0$ za $x \in (a, b-h)$ i $\Omega_{m-1}(a) = \Omega_{m-1}(b-h) = 0$. Zato

$$\int_a^{b-h} \Omega'_{m-1}(x)\, dx = 0.$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^{b-h} \Omega'_{m-1}(x) f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x]\, dx = \text{(parc. int.)} \\ &= \Omega_{m-1}(x) f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x] \Big|_a^{b-h} - \\ &\quad - \int_a^{b-h} \Omega_{m-1}(x) f[x_0, \ldots, x_{m-1}, x, x]\, dx = (\Omega_{m-1} > 0) \\ &= -f[x_0, \ldots, x_{m-1}, \eta, \eta] \int_a^{b-h} \Omega_{m-1}(x)\, dx \end{aligned}$$

Sada je

$$\begin{aligned}
E_m &= -f[x_0, \ldots, x_{m-1}, \eta, \eta] \int_a^{b-h} \Omega_{m-1}(x)\, dx + \\
&\quad + f[x_0, \ldots, x_m, \xi] \int_{b-h}^{b} \omega_m(x)\, dx \\
&= -\frac{f^{(m+1)}(\xi_1)}{(m+1)!} \int_a^{b-h} \Omega_{m-1}(x)\, dx + \frac{f^{(m+1)}(\xi_2)}{(m+1)!} \int_{b-h}^{b} \omega_m(x)\, dx.
\end{aligned}$$

Jer je $m-1$ paran (Lema),

$$\begin{aligned}
0 &< \int_a^{b-h} \Omega_{m-1}(x)\,dx = \\
&= (x-b)\Omega_{m-1}(x)\Big|_a^{b-h} - \int_a^{b-h} (x-b)\omega_{m-1}(x)\,dx = \\
&= -\int_a^{b-h} (x-b)\omega_{m-1}(x)\,dx = -\int_a^{b-h} \omega_m(x)\,dx
\end{aligned}$$

Jer je $\omega_m(x) < 0$ na $(b-h, b)$ slijedi

$$0 < -\int_{b-h}^{b} \omega_m(x)\,dx.$$

Iskoristit ćemo teorem srednje vrijednosti. Za $\alpha, \beta > 0$ i g neprekidna je

$$\alpha g(x_1) + \beta g(x_2) = (\alpha + \beta) g(\xi)$$

za neki $\xi \in I(x_1, x_2)$.

Tvrdnja je očita ako se napiše u obliku

$$\frac{\alpha}{\alpha + \beta} g(x_1) + \frac{\beta}{\alpha + \beta} g(x_2) = g(\xi).$$

Konveksna kombinacija!

Ovo primijenimo na pogrešku:

$$\begin{aligned}
E_m &= -\left[\frac{f^{(m+1)}(\xi_1)}{(m+1)!}\int_a^{b-h}\Omega_{m-1}(x)\,dx - \frac{f^{(m+1)}(\xi_2)}{(m+1)!}\int_{b-h}^{b}\omega_m(x)\,dx\right] = \\
&= -\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\left[-\int_a^{b-h}\omega_m(x)\,dx - \int_{b-h}^{b}\omega_m(x)\,dx\right] = \\
&= \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\int_a^{b}\omega_m(x)\,dx.
\end{aligned}$$

$\square$

Koeficijente možemo napisati u malo drugačijem obliku.

Uz supstituciju $t = (x - x_0)/h$:

$$
\begin{aligned}
C_{2k} &= \int_a^b x\,\omega_{2k}(x)\,dx = h^{2k+3}\int_0^{2k} t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-2k)\,dt \\
C_{2k+1} &= \int_a^b \omega_{2k+1}(x)\,dx = \\
&= h^{2k+3}\int_0^{2k+1} t(t-1)(t-2)\ldots(t-(2k+1))\,dt
\end{aligned}
$$

Sada je ocjena pogreške oblika

$$E_m(f) = B_m h^{m+2}\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}$$

$$E_m(f) = B_m h^{m+3}\frac{f^{(m+2)}(\xi)}{(m+2)!}$$

Koeficijenti zatvorenih Newton-Cotesovih formula

$$E_m(f) = B_m\, h^{m+1+k} f^{(m+1+k)}(\zeta)$$

$$k = \begin{cases} 0, & \text{za } m \text{ neparan,} \\ 1, & \text{za } m \text{ paran.} \end{cases}$$

Koeficijenti zatvorenih Newton-Cotesovih formula

m	A	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	B_m
1	$\frac{1}{2}$	1	1				$-\frac{1}{12}$
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1			$-\frac{1}{90}$
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1		$-\frac{3}{80}$
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7	$-\frac{8}{945}$
5	$\frac{5}{288}$	19	75	50	50	75	$-\frac{275}{12096}$
6	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272	27	$-\frac{9}{1400}$
7	$\frac{7}{17280}$	751	3577	1323	2989	2989	$-\frac{8183}{518400}$
8	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10496	-4540	$-\frac{2368}{467775}$

Produljene Newton-Cotesove formule

- Osnovna Newton-Cotesova formula se ne primjenjuje na cijelom segmentu $[a, b]$.
- Segment $[a, b]$ podijelimo na N (jednakih) podsegmenata na na svakom od njih primijenimo osnovnu Newton-Cotesovu formulu:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N} \left(I_m^{(i)}(f) + E_m^{(i)}(f) \right).$$

- Sve skupa $n = Nm$ podintervala i $n + 1 = Nm + 1$ ekvidistantna točka $x_0, x_1, \ldots, x_{Nm}$.

Produljena integracijska formula:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; I_m^P \;=\; \sum_{i=1}^{N} I_m^{(i)}(f).$$

Produljena trapezna formula

$$I_2^P = \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)$$

Produljena Simpsonova formula

$$I_3^P = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)\right)$$

Ocjena pogreške za produljene Newton-Cotesove formule

$$
\begin{aligned}
E_m &= \sum_{i=1}^{N} E_m^{(i)}(f) = \sum_{i=1}^{N} B_m\, h^{m+1+k} f^{(m+1+k)}(\zeta_i) = \\
&= B_m\, h^{m+k} \frac{1}{m} hmN \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{(m+1+k)}(\zeta_i) = \\
&= (b-a)\, B_m\, h^{m+k} f^{(m+1+k)}(\zeta)
\end{aligned}
$$

$$
k = \begin{cases} 0, & \text{za } m \text{ neparan,} \\ 1, & \text{za } m \text{ paran.} \end{cases}
$$

Gaussove formule

Newton-Cotesove formule.
$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ zadani (i ekvidistantni).

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

Težine w_k određene iz uvjeta egzaktnosti na prostoru polinoma.

Postignuti stupanj egzaktnosti: m ili $m+1$.

Gaussove formule: određujemo i čvorove x_i tako da postignemo što je moguće veću egzaktnost.

Malo ćemo promijeniti notaciju:

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

Želimo egzaktnost maksimalnog stupnja.

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

n koeficijenata i n čvorova $\quad\rightarrow\quad$ Očekujemo egzaktnost na $\mathcal{P}_{2n-1}$.

Neka je $p_{2n-1} \in \mathcal{P}_{2n-1}$ i

$$\omega_n(x) = (x - x_1)\dots(x - x_n).$$

Tada je

$$p_{2n-1}(x) = q_{n-1}(x)\omega_n(x) + r_{n-1}(x), \quad q_{n-1}, r_{n-1}(x) \in \mathcal{P}_{n-1}.$$

$$\int_a^b w(x)p_{2n-1}(x) = \int_a^b w(x)r_{n-1}(x)\,dx + \int_a^b w(x)q_{n-1}(x)\omega_n(x)\,dx$$

Ukoliko su težine dobivene preko interpolacijskog polinoma
$\rightarrow$ formula je egzaktna na $\mathcal{P}_{n-1}$:

$$\int_a^b w(x) r_{n-1}(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} w_k r_{n-1}(x_k) = \sum_{k=1}^{n} w_k p_{2n-1}(x_k)$$

jer

$$\begin{aligned} p_{2n-1}(x_k) &= q_{n-1}(x_k)\omega_n(x_k) + r_{n-1}(x_k) = \\ &= q_{n-1}(x_k) \cdot 0 + r_{n-1}(x_k) = r_{n-1}(x_k). \end{aligned}$$

Sada je

$$\int_a^b w(x) p_{2n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} w_k p_{2n-1}(x_k) + \int_a^b w(x) q_{n-1}(x) \omega_n(x)\, dx$$

$$\int_a^b w(x)q_{n-1}(x)\omega_n(x)\,dx = 0, \quad \forall q_{n-1}$$

je zadovoljeno ukoliko je ω_n ortogonalan na sve polinome iz $\mathcal{P}_{n-1}$.

$\Rightarrow$ Integracijska formula je egzaktna na $\mathcal{P}_{2n-1}$
ukoliko je ω_n n-ti ortogonalni polinom
(tj. čvorovi x_i su nultočke n-tog ortogonalnog polinoma)
a težinski koeficijenti w_i dobiveni interpolacijskom formulom.

Čvorovi Gaussovih integracijskih formula

Teorem (Svojstva čvorova)

Svi čvorovi x_k su realni, različiti i leže unutar otvorenog intervala $[a, b]$.

Dokaz. Čvorovi su nultočke ortogonalnog polinoma stupnja n.

Ortogonalni polinom stupnja n ima točno n jednostrukih (dakle realnih nultočaka) i vrijedi

$$a < x_1 < \ldots < x < n < b.$$

$\square$

Gaussove formule - egzaktnost na x^{2n}

Odaberimo

$$p_{2n}(x) = \omega_n^2(x).$$

S jedne strane je

$$\int_a^b w(x)\omega_n^2(x)\,dx > 0.$$

S druge strane je

$$\sum_{k=1}^{n} w_k\omega_n^2(x_k) = 0$$

jer su x_k nultočke funkcije ω_n.

$\Rightarrow$ Formula nije egzaktna na $\mathcal{P}_{2n}$.

Primjeri Gaussovih formula

- Gauss-Legendreove formule

  $w(x) = 1. \quad$ interval: $[-1, 1]$

  Ove formule je Gauss originalno proučavao.

- Gauss-Laguerreove formule

  $w(x) = \exp(-x). \quad$ interval: $[0, \infty)$

- Gauss-Hermiteove formule

  $w(x) = \exp(-x^2). \quad$ interval: $(-\infty, \infty)$

- Gauss-Čebiševljeve formule

  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}. \quad$ interval: $[-1, 1]$

Gauss–Legendreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Legendreove formule.

- Težinska funkcija je $w(x) = 1$ na intervalu $[-1, 1]$.

Čvorovi integracije su nultočke polinoma P_n definiranih Rodriguesovom formulom

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

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

Gauss–Laguerreove formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Laguerreove formule.

- Težinska funkcija je $w(x) = e^{-x}$ na intervalu $[0, \infty)$.

Čvorovi integracije su nultočke polinoma $\widetilde{L}_n$ definiranih Rodriguesovom formulom

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

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.

- Težinska funkcija je $w(x) = e^{-x^2}$ na intervalu $(-\infty, \infty) = \mathbb{R}$.

Čvorovi integracije su nultočke polinoma H_n definiranih Rodriguesovom formulom

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

Težine u Gaussovoj formuli možemo napisati na razne načine

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

Gauss–Čebiševljeve formule

Gaussove integracijske formule oblika

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

zovu se Gauss–Čebiševljeve formule.

- Težinska funkcija je $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ na intervalu $[-1, 1]$.

Čvorovi integracije su nultočke Čebiševljevih polinoma $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$. Za nultočke vrijedi formula

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

Sve težine u Gaussovoj formuli su jednake

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

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

Ocjena pogreške za Gaussove formule
Hermiteova interpolacija

Neka su $x_1, \ldots, x_n$ međusobno različite točke.

Hermiteov interpolacijski polinom $h_{2n-1} \in \mathcal{P}_{2n-1}$:

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

Prikaz u Hermiteovoj bazi :

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

gdje su

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

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

Polinome Hermiteove baze možemo eksplicitno izraziti u obliku

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

gdje je L_k odgovarajući polinom Lagrangeove baze.

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.

Interpolacijska pogreška:

$$e_h(x) = f(x) - h_{2n-1}(x) = \omega_n^2(x)\,\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}.$$

Integracijske formule s derivacijama u čvorovima

Integracijom Hermiteovog interpolacijskog polinoma dobivamo integracijsku formulu oblika

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

Formula koristi vrijednosti funkcije i derivacije.

Težine w_k i w_k' su

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

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

Ako koristimo prikaz preko polinoma Lagrangeove baze:

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

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

Formula je egzaktna na $\mathcal{P}_{2n-1}$.

Kao i Gaussove formule.

Gaussove formule i integracijske formule s derivacijama u čvorovima

Neka je

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k)$$

Gaussova integracijska formula.

Ona je egzaktna na polinomima Hermiteove baze pa:

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

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

Gausove formule su zapravo integracijske formule s derivacijama u čvorovima.

Čvorovi x_k su izabrani tako da je $w_k' = 0$.

Ocjena pogreške za Gaussove formule:

$$
\begin{aligned}
E_n(f) &= \int_a^b w(x) f(x)\, dx - \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k) = \\
&= \int_a^b w(x) f(x)\, dx - \int_a^b w(x) h_{2n-1}(x)\, dx = \\
&= \int_a^b w(x) \Big(f(x) - h_{2n-1}(x) \Big)\, dx = \\
&= \int_a^b w(x) \omega_n^2(x) f[x_0, x_0, \ldots, x_n, x_n, x]\, dx = \\
&= f[x_0, x_0, \ldots, x_n, x_n, \eta] \int_a^b w(x) \omega_n^2(x)\, dx = \\
&= \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b w(x) \omega_n^2(x)\, dx
\end{aligned}
$$

Integral na desnoj strani je kvadrat norme polinoma p_n s vodećim koeficijentom $A_n = 1$, pa je

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

U principu, za zadane w i $[a, b]$,

- $\|p_n\|^2$ se može eksplicitno izračunati i ovisi samo o n (v. malo kasnije za klasične formule).

Ako koristimo p_n za koji je $A_n \neq 1$, formula za grešku se trivijalno mijenja

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} \cdot \frac{\|p_n\|^2}{A_n^2}.$$

Gauss-Legendreova formula:

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

Gauss-Laguerrove formula:

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

Gauss-Hermiteove formula:

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

Gauss-Čebiševljeve formule:

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

Konvergencija Gaussovih formula

Tvrdnja. Ako je $[a, b]$ konačni interval, tada Gaussova formula konvergira za bilo koju neprekidnu funkciju f, tj. za $f \in C[a, b]$ vrijedi

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

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

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

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

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

Budući da je $E_n(\hat{p}_{2n-1}) = 0$
(zbog polinomnog stupnja egzaktnosti $d = 2n - 1$), slijedi

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

Uočimo da je

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

pa korištenjem prethodne formule zaključujemo

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

što je trebalo dokazati. $\square$

Ne vrijedi za Newton–Cotesove formule

Ovaj zaključak ne vrijedi za Newton–Cotesove formule,

- iako formula s n čvorova egzaktno integrira polinom $\hat{p}_{n-1}$.

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 $f(x) = 1$.

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.

Produljene formule

Produljene Gaussove formule općenito nemaju smisla uz upotrebu težinskih funkcija.

Prethodni rezultat pokazuje da imamo konvergenciju povećavanjem reda metode.

Produljena formula ukoliko je $w \equiv 1$ (Gauss-Legendre).

Segment $[a, b]$ podijelimo na N (jednakih) dijelova:
$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b$.

$$[x_0, x_1] \quad \leftrightarrow \quad [-1, 1], \quad x = \frac{x_0 + x_1}{2} + \frac{H}{2} t$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{H}{2}\int_{-1}^{1} f\Big(\frac{x_0+x_1}{2}+\frac{H}{2}t\Big)\,dt$$

Ocjena pogreške:

$$\begin{aligned}
E_n(f) &= \frac{H}{2}\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\,\frac{d^{2n}}{dx^{2n}}f\Big(\frac{x_0+x_1}{2}+\frac{H}{2}t\Big)_{t=\eta_i}\\
&= \frac{H}{2}\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\,\left(\frac{H}{2}\right)^{2n} f^{(2n)}\Big(\frac{x_0+x_1}{2}+\frac{H}{2}\eta_i\Big)\\
&= H^{2n+1}\frac{(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\,f^{(2n)}(\xi_i)
\end{aligned}$$

Pogreška za produljenu formulu:

$$\begin{aligned} E_n^P(f) &= \sum_{i=1}^{N} H^{2n+1} \frac{(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\, f^{(2n)}(\xi_i) \\ &= H^{2n+1} \frac{(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\, N \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{(2n)}(\xi_i) \\ &= (b-a) H^{2n} \frac{(n!)^4}{(2n+1)\,[(2n)!]^3}\, f^{(2n)}(\xi) \end{aligned}$$

Računanje čvorova i težina u Gaussovim formulama

Kako za zadani $n \in \mathbb{N}$ naći sve "parametre" odogovarajuće Gaussove integracijske formule reda n

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

To znači da treba izračunati

- sve čvorove x_k i težine w_k, za $k = 1, \ldots, n$.

Usput, ove parametre treba izračunati maksimalno točno, da osiguramo što točniju numeričku integraciju raznih funkcija f.

Idealno: izračunati čvorove i težine na "punu" točnost aritmetike računala (u kojoj radimo).

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

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

Loš pristup!

- Ovisnost o nepoznanicama x_k je nelinearna.
- Moguća loša uvjetovanost izabrane baze prostora polinoma.

Drugi pristup;

- Odrediti nultočke n-tog ortogonalnog polinoma
- Težine w_i odrediti prema definiciji

I ovo nije optimalno.

Ortogonalni polinomi i tročlana rekurzija

Za skalarni produkt

$$(f, g) = \int_a^b w(x) f(x) g(x)\, dx$$

ortogonalni polinomi su definirani rekurzijom:

$$p_n(x) = (x - \alpha_n) p_{n-1} - \beta_n^2 p_{n-2}(x)$$

gdje su

$$\alpha_n = \frac{(x p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-1}, p_{n-1})}$$

$$\beta_n^2 = \begin{cases} 0 & \text{za } i = 0 \\ \frac{(p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-2}, p_{n-2})} & \text{za } i \geq 1 \end{cases}$$

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

Teorem

Svojstvene vrijednosti matrice

$$J_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_2 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & \gamma_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{n-2} & \alpha_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix}$$

su nultočke ortogonalnog polinoma p_n.

Dokaz. Karakteristični polinom:

$$
\begin{aligned}
k_n(x) &= \det(J_n - xI) = \\
&= \det \begin{bmatrix}
\alpha_1 - x & \gamma_2 & & & & \\
\gamma_2 & \alpha_2 - x & \gamma_3 & & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & & \\
& \gamma_{n-2} & \alpha_{n-2} - x & \gamma_{n-1} & \\
& & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} - x & \gamma_n \\
& & & \gamma_n & \alpha_n - x
\end{bmatrix} \\
&= (\alpha_n - x) k_{n-1}(x) - \gamma_{n-1}^2 k_{n-2}(x).
\end{aligned}
$$

k_n i p_n zadovoljavaju istu rekurziju.

Za $k_{-1}(x) = 0,\ k_0(x) = 1$ je $k_1(x) = \alpha_1 - x$.

k_n i p_n ista rekurzija + isti početni uvjeti $\quad \Rightarrow \quad k_n \equiv p_n$. $\square$

Teorem

Neka je $v^{(i)} = (v_1^{(i)}, v_2^{(i)}, \ldots, v_n^{(i)})$ *svojstveni vektor matrice* J_n *koji pripada svojstvenoj vrijednosti* x_i. *Pretpostavimo da je* $v^{(i)}$ *skaliran tako da da*

$$v^{(i)^T} v^{(i)} = (p_0, p_0) = \int_a^b w(x)\, dx.$$

Tada su težinski koeficijenti dani s

$$w_i = (v_1^{(i)})^2, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Pokazat ćemo da je vektor

$$\tilde{v}^{(i)} = (\rho_0 p_0(x_i), \rho_1 p_1(x_i), \ldots, \rho_{n-1} p_{n-1}(x_i))$$

$$\rho_j = \begin{cases} 1 & \text{za } j = 0 \\ \frac{1}{\gamma_2 \cdots \gamma_{j+1}} & \text{za } j = 1, \ldots, n-1 \end{cases}$$

svojstveni vektor od J_n za svojstvenu vrijednost x_i.

Iskoristit ćemo tročlanu rekurziju

$$p_n(x) + \alpha_n p_{n-1} + \beta_n^2 p_{n-2}(x) = x p_{n-1}$$

$$\begin{aligned} \left(J_n \tilde{v}^{(i)}\right)_1 &= \alpha_1 \rho_0 p_0(x_i) + \gamma_2 \rho_1 p_1(x_i) = \\ &= \alpha_1 p_0(x_i) + p_1(x_i) = x_i p_0(x_i) = x_i \rho_0 p_0(x_i) = x_i \left(\tilde{v}^{(i)}\right)_1. \end{aligned}$$

Za $j = 2, \ldots, n-1$:

$$\begin{aligned}
\left(J_n \tilde{v}^{(i)}\right)_j &= \gamma_j \rho_{j-2} p_{j-2}(x_i) + \alpha_j \rho_{j-1} p_{j-1}(x_i) + \gamma_{j+1} \rho_j p_j(x_i) = \\
&= \rho_{j-1} \left[\gamma_j^2 p_{j-2}(x_i) + \alpha_j p_{j-1}(x_i) + p_j(x_i)\right] = \\
&= x_i \rho_{j-1} p_{j-1}(x_i) = \left(\tilde{v}^{(i)}\right)_j.
\end{aligned}$$

Za $j = n$:

$$\begin{aligned}
\left(J_n \tilde{v}^{(i)}\right)_n &= \gamma_n \rho_{n-2} p_{n-2}(x_i) + \alpha_n \rho_{n-1} p_{n-1}(x_i) = \\
&= \gamma_n \rho_{n-2} p_{n-2}(x_i) + \alpha_n \rho_{n-1} p_{n-1}(x_i) + \gamma_{n+1} \rho_n p_n(x_i) = \\
&= \rho_{n-1} \left[\gamma_n^2 p_{n-2}(x_i) + \alpha_n p_{n-1}(x_i) + p_n(x_i)\right] = \\
&= x_i \rho_{n-1} p_{n-1}(x_i) = \left(\tilde{v}^{(i)}\right)_n.
\end{aligned}$$

Težine w_i se određuju iz uvjeta egzaktnosti na $\mathcal{P}_{n-1}$:

$$\sum_{i=1}^{n} w_i p_k(x_i) = \delta_{k,0}$$

(Ovdje su korišteni ortogonalni polinomi.)

Ovaj sustav je ekvivalentan s:

$$\left[\tilde{v}^{(1)}, \tilde{v}^{(2)}, \ldots, \tilde{v}^{(n)}\right] w = (p_0, p_0) e_1$$

gdje je

$$w = (w_1, \ldots, w_n)^T \quad \text{i} \quad e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^T.$$

Pomnožimo sustav s lijeva s $\tilde{v}^{(i)T}$.
Jer je J_n simetrična, $\tilde{v}^{(i)}$ su ortogonalni.

$$\left(\tilde{v}^{(i)T} \tilde{v}^{(i)}\right) w_i = (p_0, p_0) \tilde{v}_1^{(i)}.$$

$\rho_0 = 1$ i $p_0(x) = 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{v}_1^{(i)} = 1.$

Dakle

$$\left(\tilde{v}^{(i)T}\tilde{v}^{(i)}\right) w_i = (p_0, p_0).$$

$\tilde{v}_1^{(i)} = 1 \quad \Rightarrow \quad v_1^{(i)}\tilde{v}^{(i)} = v^{(i)}$

Pomnožimo gornju jednadžbu s $(v_1^{(i)})^2$:

$$\left(v^{(i)T}v^{(i)}\right) w_i = (v_1^{(i)})^2(p_0, p_0).$$

Jer je po pretpostavci teorema $v^{(i)T}v^{(i)} = (p_0, p_0)$ slijedi

$$w_i = (v_1^{(i)})^2.$$

Neke integracijske formule s povišenom egzaktnošću
Integracijske formule s fiksnim rubovima

U težinskoj integracijskoj formuli

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

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

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

Ovaj pristup se najčešće koristi za $k = n-1$ i $k = n-2$, 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 $k = n - 1$ čvorova određujemo tako da

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

Ove integracijske formule zovu se Gauss–Radau formule.

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 $k = n - 1$

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

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 $[a, b]$.

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 $k = n - 2$ 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).

Rombergov algoritam

Euler-Maclaurinova formula

Teorem (Euler-Maclaurinova formula)

Neka je $f \in C^{(2m+2)}(0,1)$*. Tada je*

$$\int_0^1 f(t)\,dt = \frac{f(0)}{2} + \frac{f(1)}{2} + \sum_{i=1}^{m} \frac{B_{2i}}{(2i)!}\Big(f^{(2i-1)}(0) - f^{(2i-1)}(1)\Big) - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi)$$

gdje su B_i *Bernoullijevi brojevi i* $\xi \in (0,1)$*.*

Uočimo da je $(f(0)+f(1))/2$ zapravo trapezna formula.

Ukoliko formulu produljimo na $[0, N]$, za $f \in C^{(2m+2)}(0, N)$ je

$$\begin{aligned}
\int_0^N f(t)\,dt &= \frac{f(0)}{2} + f(1) + \ldots + f(N-1) + \frac{f(N)}{2} \\
&\quad \sum_{i=1}^{m} \frac{B_{2i}}{(2i)!} \left(f^{(2i-1)}(0) - f^{(2i-1)}(N) \right) \\
&\quad - N \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi)
\end{aligned}$$

gdje je $\xi \in (0, N)$.

Uočimo da se članovi iz sume u unutarnjim čvorovima ponište!

Za ekvidistantnu particiju $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b,\ x_i - x_{i-1} = h$, dobivamo

$$
\begin{aligned}
T(h) \;&=\; \int_a^b f(t)\,dt + \sum_{i=1}^{m} h^{2i}\frac{B_{2i}}{(2i)!}\Big(f^{(2i-1)}(b) - f^{(2i-1)}(a)\Big) \\
&\quad + h^{2m+2}(b-a)\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi)
\end{aligned}
$$

gdje je $T(h)$ označava trapeznu formulu

$$
T(h) = \frac{f(0)}{2} + f(1) + \ldots + f(N-1) + \frac{f(N)}{2}
$$

Dokaz (Euler-Maclaurinova formula).

Uzastopnom primjenom parcijalne integracije odrediti polinome B_k, počevši s $B_1(x) = x - \frac{1}{2}$.
Uz $B'_{k+1} = (k+1)B_k$ slijedi

$$\begin{aligned}
\int_0^1 f(t)\,dt &= B_1(t)f(t)\Big|_0^1 - \int_0^1 B_1(t)f'(t)\,dt \\
\int_0^1 B_1(t)f'(t)\,dt &= \frac{1}{2}B_2(t)f'(t)\Big|_0^1 - \frac{1}{2}\int_0^1 B_2(t)f''(t)\,dt \\
&\vdots \\
\int_0^1 B_{k-1}(t)f^{(k-1)}(t)\,dt &= \frac{1}{k}B_k(t)f^{(k-1)}(t)\Big|_0^1 - \frac{1}{k}\int_0^1 B_k(t)f^{(k)}(t)\,dt
\end{aligned}$$

Iz

$$B'_{k+1}(x) = (k+1)B_k(x)$$

je jasno da je stupanj B_k točno k i koeficijent uz najvišu potenciju je 1.

Za dani B_k je B_{k+1} jednoznačno određen do na aditivnu konstantu.

Konstante određujemo tako da

$$B_{2k+1}(0) = B_{2k+1}(1) = 0 \quad \text{za } k > 0.$$

Ovo jednoznačno određuje B_k.

Za

$$B_{2k-1}(x) = x^{2k-1} + c_{2k-2}x^{2k-2} + \cdots + c_1 x + c_0$$

integracija (i množenje s $2k(2k+1)$ daje

$$B_{2k+1}(x) = x^{2k+1} + \frac{2k(2k+1)}{(2k-1)(2k)} c_{2k-2}x^{2k} + \cdots + (2k+1)cx + d.$$

- $B_{2k+1}(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad d = 0$
- $B_{2k+1}(1) = 0$ određuje c

Polinomi

$$B_0(x) = 1, \quad B_1(x) = x - \tfrac{1}{2}, \quad B_2(x) = x^2 - x + \tfrac{1}{6}$$

$$B_3(x) = x^3 - \tfrac{3}{2}x^2 + \tfrac{1}{2}x, \quad B_4(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - \tfrac{1}{30}$$

su poznati kao **Bernoullijevi polinomi**.

Konstante

$$B_k = B_k(0)$$

su **Bernoullijevi brojevi**.

Bernoullijevi polinomi su simetrični (k paran) ili antisimetrični (k neparan):

$$(-1)^k B_k(1-x) = B_k(x).$$

$(-1)^k B_k(1-x)$ zadovoljava istu rekurziju i početak rekurzije je isti ($B_0 = 1$).

Sada je

$$\begin{aligned} B_{2k}(0) &= B_{2k}(1) = B_{2k} \\ B_{2k+1}(0) &= B_{2k+1}(1) = 0 = B_{2k+1} \end{aligned}$$

za $k \geq 1$, odnosno

$$B_k(0) = B_k(1) = B_k \quad \text{za } k > 1.$$

(Ne vrijedi za B_1)

Bernoullijevi brojevi:

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

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

Nastavljamo s razvojem $\int_0^1 f(t)\,dt$.

$$\frac{1}{k} B_k(t) f^{(k-1)}(t)\Big|_0^1 = -\frac{B_k}{k}\left(g^{(k-1)}(0) - g^{(k-1)}(1)\right)$$

Uzmemo u obzir da je $B_{2k+1} = 0$:

$$\int_0^1 f(t)\,dt = \frac{f(0)}{2} + \frac{f(1)}{2} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left(f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right) + r_{m+1}.$$

Pogreška r_{m+1}:

$$r_{m+1} = \frac{-1}{(2m+1)!} \int_0^1 B_{2m+1}(t) g^{(2m+1)}(t)\,dt$$

Parcijalna integracija:

$$\int_0^1 B_{2m+1}(t) g^{(2m+1)}(t)\, dt = \frac{1}{2m+2}\Big(B_{2m+2}(t) - B_{2m+2}\Big) g^{(2m+1)}(t)\Big|_0^1$$
$$- \frac{1}{2m+2}\int_0^1 \Big(B_{2m+2}(t) - B_{2m+2}\Big) g^{(2m+2)}($$

Prvi član je 0.

Za teorem srednje vrijednosti treba biti $B_{2m+2}(t) - B_{2m+2} \geq 0$ ili ≤ 0.

Indukcijom ćemo pokazati da

$$\begin{aligned}
(-1)^m B_{2m-1}(x) &> 0 \quad \text{za } 0 < x < \frac{1}{2} \\
(-1)^m (B_{2m}(x) - B_{2m}) &> 0 \quad \text{za } 0 < x < 1 \\
(-1)^{m+1} B_{2m} &> 0
\end{aligned}$$

Prva tvrdnja vrijedi za $m = 1$:

$$(-1)^1 B_1(x) = -\left(x - \frac{1}{2}\right) > 0 \quad \text{za } 0 < x < \frac{1}{2}.$$

Pretpostavimo da vrijedi za neki $m \geq 1$.

Za $0 < x \leq \frac{1}{2}$ je

$$\frac{(-1)^m}{2m}(B_{2m}(x) - B_{2m}) = (-1)^m \int_0^x B_{2m-1}(t)\, dt > 0$$

Zbog antisimetričnosti to možemo proširiti i na drugu polovicu intervala, $\frac{1}{2} \leq x < 1$.

Time smo dokazali 2. tvrdnju za m.

3. tvrdnja: ($\int_0^1 B_{2m}(t)\, dt = 0$)

$$(-1)^{m+1} B_{2m} = (-1)^m \int_0^1 (B_{2m}(t) - B_{2m})\, dt > 0$$

Dakle, iz 1. tvrdnje slijede 2. i 3. tvrdnja.

Moramo dokazati 1. tvrdnju za $m+1$.

Zbog

$$B_{2m+1}(0) = B_{2m+1}(1) = 0$$

i antisimetrije: $(-1)^{2m+1} B_{2m+1}(1-x) = B_{2m+1}(x)$ slijedi

$$B_{2m+1}\left(\frac{1}{2}\right) = 0.$$

Kada bi postojala nultočka u $(0, 1/2)$ tada bi postojala točka infleksije $\bar{x} \in (0, 1/2)$.

$$B''_{2m+1}(\bar{x}) = 0 \quad \Rightarrow \quad B_{2m-1}(\bar{x}) = 0$$

što je u suprotnosti s pretpostavkom indukcije ($B_{2m-1} > 0$ na $(0, 1/2)$).

Pogreška:

$$\begin{aligned} r_{m+1} &= \frac{1}{(2m+2)!} \int_0^1 \Big(B_{2m+2}(t) - B_{2m+2} \Big) g^{(2m+2)}(t)\, dt \\ &= \frac{1}{(2m+2)!} g^{(2m+2)}(\xi) \int_0^1 \Big(B_{2m+2}(t) - B_{2m+2} \Big)\, dt \end{aligned}$$

Jer je

$$\int_0^1 B_k(t)\, dt = 0$$

slijedi

$$r_{m+1} = -\frac{B_{2k}}{(2m+2)!} g^{(2m+2)}(\xi).$$

$\square$

Izvod Rombergovog algoritma

Euler-Maclaurinova formula, (ako je funkcija f dovoljno glatka)

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2}$$

$$\begin{aligned} \tau_0 &= \int_0^1 f(t)\, dt \\ \tau_k &= \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right) \\ \alpha_{m+1}(h) &= (b-a) \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi(h)) \end{aligned}$$

Ako je $f \in C^{2m+}$, $\exists L$ takav da je $|f^{(2m+2)}| \leq L$.

$$\Rightarrow \quad |\alpha_{m+1}(h)| \leq M_{m+1}$$

za sve $h = (b-a)/n, \; n = 1, 2, \ldots$

Ovakav razvoj se naziva **asimptotski razvoj** u h ako koeficijenti $\tau_k,\ k \leq m$ ne ovise o h i $\alpha_{m+1}(h)$ je ograničena.

Ideja Rombergovog algoritma:

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2}$$

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = \tau_0 + \tau_1 \frac{h^2}{4} + \tau_2 \frac{h^4}{16} + \cdots + \tau_m \frac{h^{2m}}{2^{2m}} + \alpha_{m+1}(h) \frac{h^{2m+2}}{2^{2m+2}}$$

$$\begin{aligned} T_1(h) &= \frac{4T\left(\frac{h}{2}\right) - T(h)}{3} \\ &= \tau_0 - \tau_2 \frac{h^4}{4} + \cdots \end{aligned}$$

$T_1(h)$ je aproksimacija integrala. pogreška h^4

Ponovimo ovo s $T_1(h)$

$$
\begin{aligned}
T_1(h) &= \tau_0 + \tau_2' h^4 + \tau_3' h^6 + \cdots + \tau_m' h^{2m} + \ldots \\
T_1\left(\frac{h}{2}\right) &= \tau_0 + \tau_2' \frac{h^4}{16} + \tau_3' \frac{h^6}{64} + \cdots + \tau_m' \frac{h^{2m}}{2^{2m}} + \ldots \\
T_2(h) &= \frac{4^2 T_1\left(\frac{h}{2}\right) - T(h)}{4^2 - 1} \\
&= \tau_0 - \tau_3'' h^6 + \cdots
\end{aligned}
$$

$T_2(h)$ je aproksimacija integrala. pogreška h^6

Uz oznaku

$$T_0^{(k)} = T\left(\frac{h}{2^k}\right)$$

dobivamo niz (**Rombergov algoritam**):

$$T_i^{(k)} = \frac{4^i T_{i-1}^{(k)} - T_{i-1}^{(k-1)}}{4^i - 1}, \; i \le k.$$

Točnost: h^{2i+2}.
Rombergova tablica

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

Nije nužno koristiti samo h i $h/2$.

Isti efekt se može dobiti s bilo kojim h_1 i h_2 (tj. s $T(h_1)$ i $T(h_2)$).

Drugi pristup:

Polinom

$$t_m(h) = a_0 + a_1 h^2 + \ldots + a_m h^{2m}$$

odredimo iz interpolacijskih uvjeta

$$t_m(h_i) = T(h_i), \quad i = 0, \ldots, m.$$

Integral aproksimiramo s $t(0)$.

Romberg: $h_i = (b - a)/2^i$,

Ekstrapolacija, jer 0 nije unutar interpolacijskih točaka.

Interpolacija: pogreška najveća u rubovima intervala a izvan intervala

Romberg: u rubu gdje ekstrapoliramo interpolacijske točke su sve gušće.

To smanjuje pogrešku

Prvi korak Rombergovog algoritma daje Simpsonovu formulu.

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

Nađimo eksplicitnu formulu za T_1.

$$\begin{aligned} T(h/2) &= \frac{h}{4}(f_0 + 2f_1 + \cdots 2f_{n-1} + f_n) \\ T(h) &= \frac{h}{2}(f_0 + 2f_2 + \cdots 2f_{n-2} + f_n), \end{aligned}$$

uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

$$
\begin{aligned}
T_1(h) &= \frac{4T(h/2) - T(h)}{3} = \frac{4}{3} \cdot \frac{h}{4}(f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\
&\qquad - \frac{1}{3} \cdot \frac{h}{2}(f_0 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + f_n) \\
&= \frac{h}{3}(f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\
&\qquad - \frac{h}{6}(f_0 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + f_n) \\
&= \frac{h}{6}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n),
\end{aligned}
$$

što je Simpsonova formula s n podintervala širine $h/2$.

Poredak računanja u tablici je sljedeći:

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

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

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

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

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

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

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

Primjeri za Rombergov algoritam

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

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

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

Promatramo ponašanje omjeri pogrešaka i eksponenata omjera pogrešaka u stupcima.

Eksponencijalna funkcija

$\exp x \in C^\infty$

Za $n = 2^5 = 32$ podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo vrijednost integrala I_5 takvu da je

$$\begin{aligned} I_5 &= 1.71828182845904524 \\ I &= e - 1 = 1.71828182845904524 \\ I - I_5 &= 0. \end{aligned}$$

Omjeri pogrešaka u stupcima su

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

Vidimo da su omjeri prema predviđanju $4, 16, 64, 256, 1024, \ldots$

Eksponenti omjera pogrešaka su

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

Eksponenti omjera pogrešaka: $2, 4, 6, 8, 10, \ldots$

Funkcija $x^{3/2}$

$f(x) = x^{3/2} \notin C^2$

- dovoljno glatka za ocjenu pogreške u trapeznoj formuli.
- odstupanje reda konvergencije bi se trebalo primijetiti već u drugom stupcu

Nakon $n = 2^{15}$ podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo

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

Uočite n. Eksponencijalna funkcija: $n = 2^5$ i potpuna točnost.

Omjeri pogrešaka:

0	1.0000						
1	3.7346	1.0000					
2	3.8154	5.4847	1.0000				
3	3.8721	5.5912	5.6484	1.0000			
4	3.9112	5.6331	5.6559	5.6566	1.0000		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	3.9981	5.6569	$\cdots$		$\cdots$	5.6569	1.0000

Nakon prvog stupca omjeri pogrešaka su se stabilizirali.

Eeksponenti omjera pogrešaka:

0	1.0000						
1	1.9010	1.0000					
2	1.9318	2.4554	1.0000				
3	1.9531	2.4832	2.4978	1.0000			
4	1.9676	2.4939	2.4998	2.4999	1.0000		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$	$\ddots$	
15	1.9993	2.5000	$\cdots$		$\cdots$	2.5000	1.0000

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

Trapez može biti brži od Romberga

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma računamo približnu vrijednost integrala

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

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

U ovom primjeru događa se zanimljiv fenomen:

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

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

Početni dio Rombergove tablice:

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

Crveno označeni brojevi imaju sve znamenke točne.

Rombergov algoritam daje netočniju aproksimaciju

0.5651591437527359З.

Trapez može biti brži od Romberga (nastavak)

Sporost Rombergovog algoritma posljedica je činjenice da

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

Stvarno, za produljenu trapeznu formulu ne vrijedi isti razvoj pogreške (puno je točnija)!

Rješenje problema:

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

Produljena trapezna formula za periodičke funkcije

Tvrdnja. Neka je $E_n^T(f)$ greška produljene trapezne formule za računanje integrala

$$\int_0^{2\pi} f(t)\,dt$$

pri podjeli na n jednakih podintervala. Tada vrijedi

$$E_n^T(\sin kx) = 0, \quad E_n^T(\cos kx) = 0, \quad \text{za svaki} k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Dokaz.
Koristimo kompleksnu eksponencijalnu funkciju:

$$e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx), \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Greška produljene trapezne formule je

$$\begin{aligned} E_n^T\left(e^{ikx}\right) &= \int_0^{2\pi} e^{ikx}\, dx - \frac{\pi}{n}\left(e^{ik0} + 2\sum_{j=1}^{n-1} e^{ik\frac{2\pi j}{n}} + e^{ik2\pi}\right) \\ &= \int_0^{2\pi} e^{ikx}\, dx - \frac{2\pi}{n}\sum_{j=0}^{n-1} e^{2\pi kji/n}. \end{aligned}$$

Za $k = 0$ je:

$$E_n^T(1) = \int_0^{2\pi} dx - \frac{2\pi}{n} \sum_{j=0}^{n-1} 1 = 2\pi - 2\pi = 0.$$

Za $k > 0$ je:

$$
\begin{aligned}
E_n^T\left(e^{ikx}\right) &= \int_0^{2\pi} e^{ikx}\,dx - \frac{2\pi}{n}\sum_{j=0}^{n-1} e^{2\pi kji/n} \\
&= \frac{1}{ik}e^{ikx}\,\Big|_0^{2\pi} - \frac{2\pi}{n}\sum_{j=0}^{n-1}\left(e^{2\pi ki/n}\right)^j \\
&= 0 - \frac{2\pi}{n}\frac{\left(e^{2\pi ki/n}\right)^n - 1}{e^{2\pi ki/n} - 1} \\
&= -\frac{2\pi}{n}\frac{e^{2\pi ki} - 1}{e^{2\pi ki/n} - 1} \\
&= -\frac{2\pi}{n}\frac{1 - 1}{e^{2\pi ki/n} - 1} = \mathbf{0}
\end{aligned}
$$

Uočimo da

$$E_n^T\left(e^{ikx}\right) = -\frac{2\pi}{n}\frac{e^{2\pi ki}-1}{e^{2\pi ki/n}-1} = \mathbf{0}$$

vrijedi i $\forall k > n$ ukoliko $n \nmid k$,

tj. ako je $k \neq 0 \pmod n$. Tada je $e^{2\pi ki/n} \neq 1$.

Ako $n|k$, tj. ako je $k = 0 \pmod n$, onda je $e^{2\pi ki/n} = 1$, pa je

$$E_n^T\left(e^{ikx}\right) = -\frac{2\pi}{n}\sum_{\ell=0}^{n-1} 1 = -2\pi.$$

Zaključujemo da je

$$E_n^T\left(e^{ikx}\right) = \begin{cases} -2\pi, & \text{za } k > 0 \text{ i } k = 0 \,(\text{mod } n), \\ 0, & \text{za } k = 0 \text{ ili } k > 0 \text{ i } k \neq 0 \,(\text{mod } n). \end{cases}$$

Uzimanjem realnog i imaginarnog dijela dobivamo

$$\begin{aligned} E_n^T(\cos(kx)) &= \begin{cases} -2\pi, & \text{za } k > 0 \text{ i } k = 0 \,(\text{mod } n), \\ 0, & \text{za } k = 0 \text{ ili } k > 0 \text{ i } k \neq 0 \,(\text{mod } n), \end{cases} \\ E_n^T(\sin(kx)) &= 0. \end{aligned}$$

Ukoliko f zadovoljava uvjete Dirichletova teorema tada je

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)\right)$$

u točkama neprekidnosti, pri čemu su a_k i b_k Fourierovi koeficijenti za funkciju f.

Zbog neprekidnosti (po dijelovima) smijemo integrirati član po član!

Greška aproksimacije za integral funkcije f korištenjem produljene trapezne formule je

$$E_n^T(f) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(a_k E_n^T(\cos(kx)) + b_k E_n^T(\sin(kx))\right) = -2\pi \sum_{j=1}^{\infty} a_{j \cdot n}.$$

Što je funkcija f glađa, to Fourierovi koeficijenti brže teže u 0.

Integral Fourierovog reda (nastavak)

Preciznije, neka je $f \in C^r(\mathbb{R})$. Onda je

$$a_k = O(k^{-r}) \quad \text{i} b_k = O(k^{-r}) \quad \text{za} \quad k \to \infty.$$

To znači da je $E_n^T(f)$ približno jednak prvom članu greške za $j = 1$:

$$E_n^T(f) \approx -2\pi a_n = O(n^{-r})$$

Jer je $h = (b - a)/n$ (ovdje je $h = 2\pi/n$), onda ovu ocjenu možemo zapisati kao

$$E_n^T(f) = O(h^r) \quad \text{za} \quad h \to 0.$$

Ako je $r > 2$, onda je ova ocjena za periodičke funkcije

$$E_n^T(f) = O(h^r) \quad \text{za} \quad h \to 0,$$

bitno bolja od relacije

$$E_n^T(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) = O(h^2), \quad \text{za} \quad h \to 0,$$

koja vrijedi za neperiodičke funkcije f.

Posebno, ako je $r = \infty$, onda produljena trapezna formula za periodičke funkcije konvergira brže od bilo koje potencije od h.

Drugi pristup - Euler-Meclaurinova formula

$f \in C^{2m+2}$, ekvidistantna particija
$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b,\ x_i - x_{i-1} = h$:

$$\begin{aligned} T(h) &= \int_a^b f(t)\,dt + \sum_{i=1}^{m} h^{2i} \frac{B_{2i}}{(2i)!} \Big(f^{(2i-1)}(b) - f^{(2i-1)}(a) \Big) \\ &\quad + h^{2m+2}(b-a) \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi) \end{aligned}$$

gdje je $T(h)$ označava trapeznu formulu.

Ukoliko je f periodička, vrijedi:

$$f^{(2i-1)}(a) = f^{(2i-1)}(b), \quad i = 1, 2, \ldots, m$$

Sada je

$$T(h) = \int_a^b f(t)\,dt + h^{2m+2}(b-a)\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi).$$

Jer je $f \in C^{2m+2}$,
$\Rightarrow \quad \exists M_{2m+2} > 0$ takav da $\quad |f^{(2m+2)}(x)| < M_{2m+2}$ na $[a,b]$.

Asimptotska ocjena za Bernoullijeve brojeve kada $n \to \infty$:

$$B_{2n} \sim 4\sqrt{\pi n}\left(\frac{n}{\pi e}\right)^{2n}$$

$|f^{(2m+2)}(x)|$ može rasti s m.

Koeficijenti $K_{2m} = \dfrac{|B_{2m}|}{(2m)!}$

m	K_{2m}
1	$8 \cdot 10^{-2}$
2	$1 \cdot 10^{-3}$
3	$3 \cdot 10^{-5}$
4	$8 \cdot 10^{-7}$
5	$2 \cdot 10^{-8}$
6	$5 \cdot 10^{-10}$
7	$1 \cdot 10^{-11}$
8	$3 \cdot 10^{-13}$
9	$9 \cdot 10^{-15}$
10	$2 \cdot 10^{-16}$

m	K_{2m}
11	$6 \cdot 10^{-18}$
12	$1 \cdot 10^{-19}$
13	$4 \cdot 10^{-21}$
14	$9 \cdot 10^{-23}$
15	$2 \cdot 10^{-24}$
16	$6 \cdot 10^{-26}$
17	$1 \cdot 10^{-27}$
18	$4 \cdot 10^{-29}$
19	$9 \cdot 10^{-31}$
20	$2 \cdot 10^{-32}$

m	K_{2m}
30	$2 \cdot 10^{-40}$
40	$3 \cdot 10^{-48}$
50	$3 \cdot 10^{-56}$
60	$3 \cdot 10^{-64}$
70	$3 \cdot 10^{-72}$
80	$3 \cdot 10^{-80}$
90	$3 \cdot 10^{-88}$
100	$3 \cdot 10^{-96}$
110	$3 \cdot 10^{-104}$
120	$4 \cdot 10^{-112}$

Adaptivne integracijske formule

Ocjena pogreške

Kako ocijeniti pogrešku tijekom integracije kada nam je $f^{(k)}$ iz ocjene pogreške nepoznat?

Aproksimiramo integral

$$I(f; a, b) = \int_a^b w(x) f(x)\, dx$$

nekom produljenom formulom $I_n(f; a, b)$ na ekvidistantnoj mreži gdje je n broj podintervala.

Koristimo ideju iz Rombergovog algoritma:

$$\begin{aligned} I(f;a,b) &= I_n(f;a,b) + ch^k \\ I(f;a,b) &= I_{n/2}(f;a,b) + c2^k h^k \end{aligned}$$

Rombergov algoritam: eliminiramo ch^k i aproksimiramo $I(f;a,b)$.

Sada: eliminiramo $I(f;a,b)$ i aproksimiramo ch^k.

$$ch^k = \frac{I_n(f;a,b) - I_{n/2}(f;a,b)}{2^k - 1}$$

Ocjena:

$$\Big| I(f;a,b) - I_n(f;a,b) \Big| \approx \frac{\Big| I_n(f;a,b) - I_{n/2}(f;a,b) \Big|}{2^k - 1}$$

Uočimo da za računanje

$$\left| I(f;a,b) - I_n(f;a,b) \right| \approx \frac{\left| I_n(f;a,b) - I_{n/2}(f;a,b) \right|}{2^k - 1}$$

ne trebamo dodatno računati vrijednost funkcije u dodatnim čvorovima ukoliko redom radimo aproksimacije udvostručavanja broja čvorova.

Startamo s $I_{n_0}(f;a,b)$ (n_0 je relativno malen, može npr. $n_0 = 2$ za trapeznu formulu).

1. Ukoliko je pogreška $|I_n(f;a,b) - I_{n/2}(f;a,b)|$ manja od zadanog $\varepsilon \cdot (2^k - 1) \rightarrow$ KRAJ.
2. Inače, $n := 2n \rightarrow$ idi na 1..

Za ovaj izbor generiranja mreže mreže, za $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$

- parni čvorovi $x_0, x_2, \ldots, x_n$ su čvorovi mreže s $n/2$ intervala
- a neparni čvorovi $x_1, x_3, \ldots, x_{n-1}$ su novi čvorovi
- U trapeznoj formuli, ako je

$$S_n^N = \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) \quad \text{i} \quad S_n^P = \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i})$$

  tada

$$S_{n+1}^P = S_n^N + S_n^P, \qquad I_n(f; a, b) = h\left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + S_{n+1}^P\right]$$

- ovo je razlog zašto je dobro udvostručavati broj čvorova u novoj mreži.

Adaptivni algoritam

Nema potrebe udvostručavati broj točaka na cijelom intervalu $[a, b]$

Rekurzivni algoritam:

Funkcija $I_n(f, a, b, \tau)$

- ako je pogreška $\leq \tau \;\rightarrow\;$ izračunaj I_n i KRAJ
- odredi nove čvorove
- $m = (a + b)/2$
- $I_n = I_n(a, m, \tau/2) + I_n(m, b, \tau/2)$

Ima tu još problema, spora konvergencija, singulariteti,...