Numerička matematika
12. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Numerička integracija (nastavak):
  - Ekstrapolacija i Rombergov algoritam.
  - Primjeri za Rombergov algoritam.
  - Integracijske formule visokog stupnja egzaktnosti.
    - Gauss–Christoffel formule.
    - Gauss–Radau formule.
    - Gauss–Lobatto formule.
  - Primjer za težinske Newton–Cotesove i Gaussove formule.
  - Osnovna svojstva Gaussovih formula.
  - Gaussove formule i Hermiteova interpolacija.

Informacije

Službeni termin drugog kolokvija je:

- srijeda, 1. 7., u 12 sati.

Rok za predaju zadaća je

- dan drugog kolokvija, 1. 7., do ponoći (24 sata).

Neslužbeni termin popravnog kolokvija je:

- ponedjeljak, 13. 7., u 9 sati.

Na `http://e-ucenje.fsb.hr/`,

- pod kolegijem Numerička analiza,
- možete naći "naša" predavanja.

Ako naš web zakaže, ima tamo . . .

Informacije — nastavak

Domaće zadaće iz NM — realizacija ide preko web aplikacije. Pogledajte na službeni web kolegija, pod “zadaće”.

- Tamo su početne upute.

Skraćeni link je

http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php

Direktni link na aplikaciju za zadaće je

http://degiorgi.math.hr/nm/

Kolegij “Numerička matematika” ima demonstratora!

- Sonja Šimpraga — termin je četvrtkom, od 16–18.

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Skraćena verzija skripte — 1. dio (prvih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat1.pdf

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat2.pdf

Informacije — nastavak

Na molbu Sanje Singer i Vedrana Novakovića, za goste je otvorena i web stranica kolegija Matematika 3 i 4 na FSB-u.

Tamo možete naći dodatne materijale za neke dijelove NM,

- posebno — vježbe i riješene zadatke.

Predavanja su "malo nježnija" od naših. Početna stranica je

`http://e-ucenje.fsb.hr/`

Zatim potražite "Katedra za matematiku" i onda:

- odete (kliknete) na kolegije Matematika 3 i 4,
- kliknete na gumb "Prijava kao gost",
- na stranici potražite blok 3 "Numerička matematika".

Iskoristite! Naravno, smijete pogledati i ostalo!

Rombergov algoritam

Općenito o Rombergovom algoritmu

Pri izvodu Rombergovog algoritma koristimo se sljedećim principima:

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

Ponovljena primjena ovog principa zove se Richardsonova ekstrapolacija.

Za početak, treba objasniti

- što je to asimptotski razvoj.

Asimptotski razvoj

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

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

red smo aproksimirali konačnom parcijalnom sumom

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog niza

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Precizna definicija asimptotskog razvoja

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

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

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

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

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

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

Euler–MacLaurinova formula

gdje su koeficijenti

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

a ostatak je

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

Ovdje su B_{2i} Bernoullijevi brojevi,

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

Euler–MacLaurinova formula

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

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

Dokaz je u klasičnim udžebnicima numeričke analize. ■

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

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

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

Eliminacija člana greške

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

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

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

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

Ideja: Ako je funkcija f dovoljno glatka,

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

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

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

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

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

Sličan argument kao i prije možemo upotrijebiti i dalje. Eliminirajmo prvi član pogreške iz $I_n^{(1)}$ i $I_{n/2}^{(1)}$,

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

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

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

Izvod Rombergovog algoritma

odnosno

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

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

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

Induktivno, nastavljanjem postupka, dobivamo Richardsonovu ekstrapolaciju

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

Izvod Rombergovog algoritma

Pritom je greška jednaka

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

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

Sada možemo složiti Rombergovu tablicu

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

Poredak računanja

Poredak računanja u tablici je sljedeći:

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

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

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

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

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

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

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

Primjeri za Rombergov algoritam

Omjeri grešaka u Rombergovoj tablici

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

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

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

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

Eksponencijalna funkcija

Eksponencijalna funkcija ima beskonačno mnogo neprekidnih derivacija, pa bi se računanje integrala moralo ponašati po predviđanju.

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

$$I_5 = 1.7182818284590452$$

$$I = e - 1 = 1.7182818284590452$$

$$I - I_5 = 0.$$

Eksponencijalna funkcija

Omjeri pogrešaka u stupcima su

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

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

Eksponencijalna funkcija

Eksponenti omjera pogrešaka su

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

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

Funkcija $x^{3/2}$

Funkciji $f(x) = x^{3/2}$ puca druga derivacija u 0, pa bi

- "zanimljivo ponašanje" moralo početi već u drugom stupcu, jer je
- za trapez je funkcija dovoljno glatka za ocjenu pogreške.

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

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

Primijetite da je broj intervala poprilično velik!

Funkcija $x^{3/2}$

Što je s omjerima pogrešaka?

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

Nakon prvog stupca omjeri pogrešaka su se stabilizirali.

Funkcija $x^{3/2}$

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

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

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

Funkcija $\sqrt{x}$

Situacija s funkcijom $f(x) = \sqrt{x}$ mora biti još gora, jer njoj puca prva derivacija u 0.

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

$$
\begin{aligned}
I_{15} &= 0.6666666551083763 3\\
I &= 2/3 = 0.6666666666666667\\
I - I_{15} &= 0.000000011558290 33.
\end{aligned}
$$

Funkcija $\sqrt{x}$

Omjeri pogrešaka u tablici su:

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

Funkcija $\sqrt{x}$

Pripadni eksponenti su

$$
\begin{array}{c|cccccc}
0 & 1.0000 \\
1 & 1.4010 & 1.0000 \\
2 & 1.4324 & 1.4957 & 1.0000 \\
3 & 1.4538 & 1.4991 & 1.4998 & 1.0000 \\
4 & 1.4681 & 1.4998 & 1.5000 & 1.5000 & 1.0000 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & & \ddots & \ddots \\
15 & 1.4993 & 1.5000 & \cdots & & \cdots & 1.5000 & 1.0000
\end{array}
$$

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

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

Zadatak

Ako u posljednjem integralu promijenimo granice integracije

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

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

Druge oznake

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

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

Sama tablica ima oblik

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

Još malo o Rombergovoj tablici

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

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

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

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

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

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

Još malo o Rombergovoj tablici

uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

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

što je Simpsonova formula s n podintervala.

Zadatak

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

Na sreću, odgovor je ne!

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

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

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

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

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

Oprez s oscilirajućim funkcijama

Rombergova tablica:

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

Rezultat (sa svim znamenkama):

$$I_7 = 0.03744821953512704$$
$$I = 0.03744822190397537$$
$$I - I_7 = 0.00000000236884834.$$

Oprez s oscilirajućim funkcijama

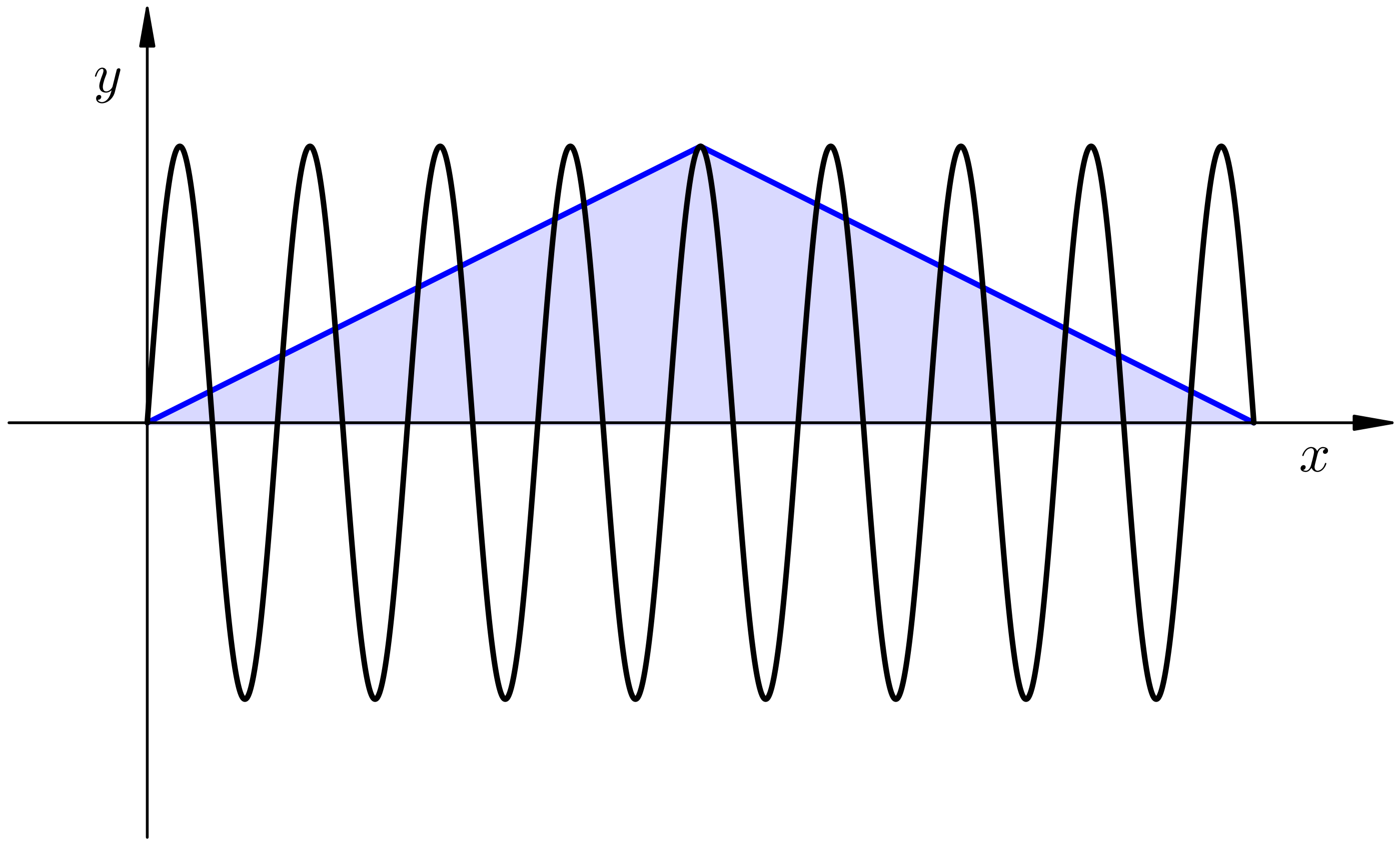
Što je razlog stabilizacije oko jedne, pa oko druge vrijednosti?

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

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

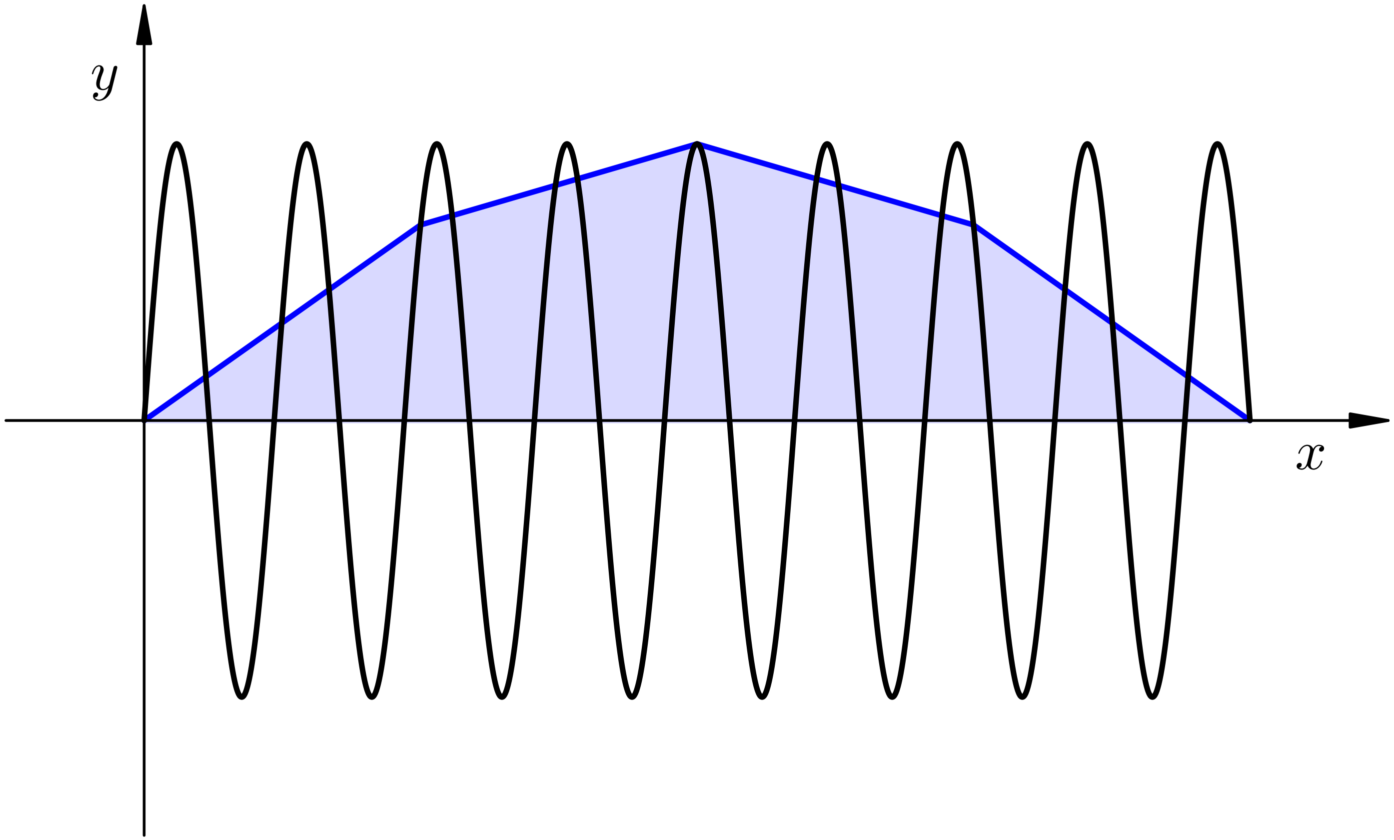
- stavili smo skoro jednu točku po grbi
- i trapezna formula je počela "prepoznavati oblik" podintegralne funkcije.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



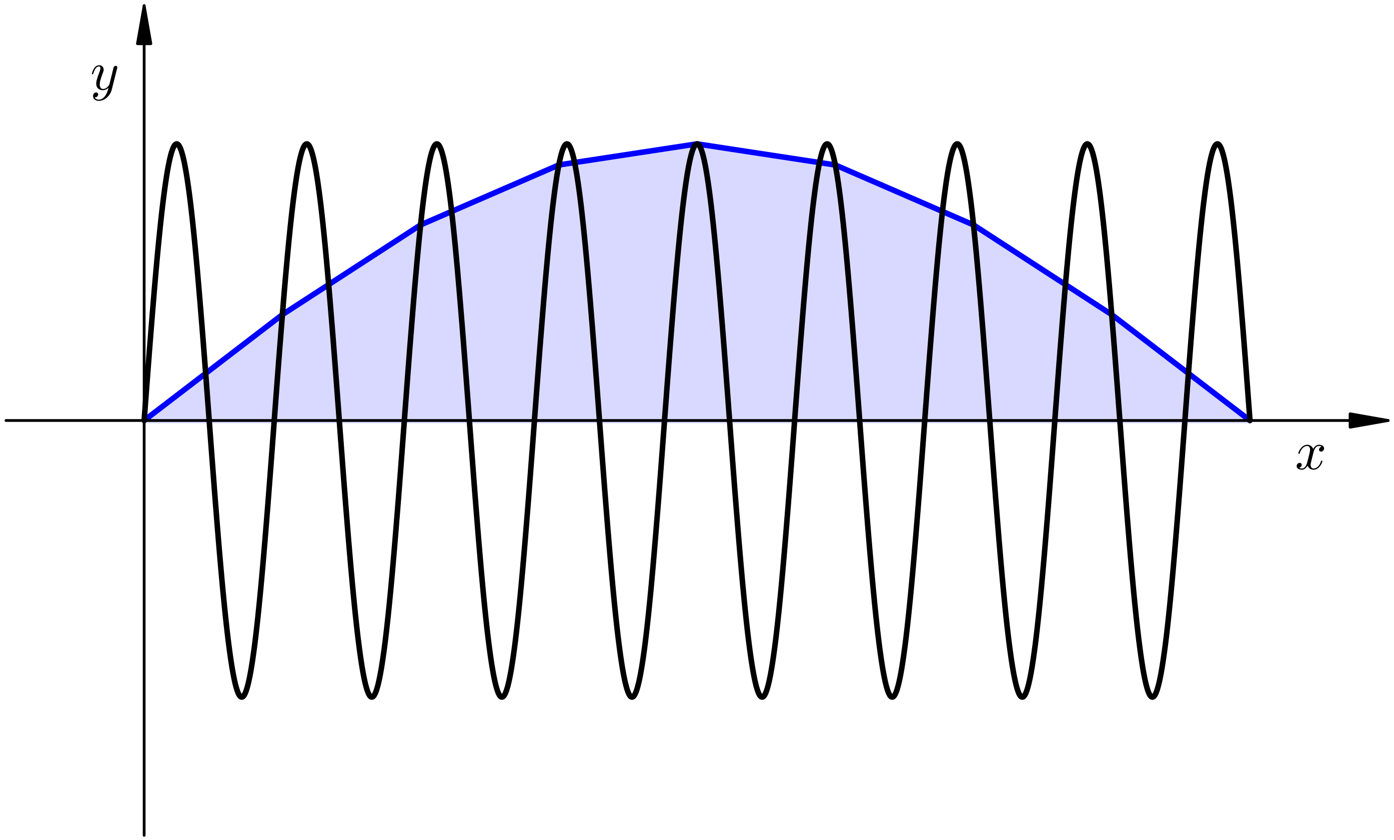
Produljena trapezna formula s 2 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



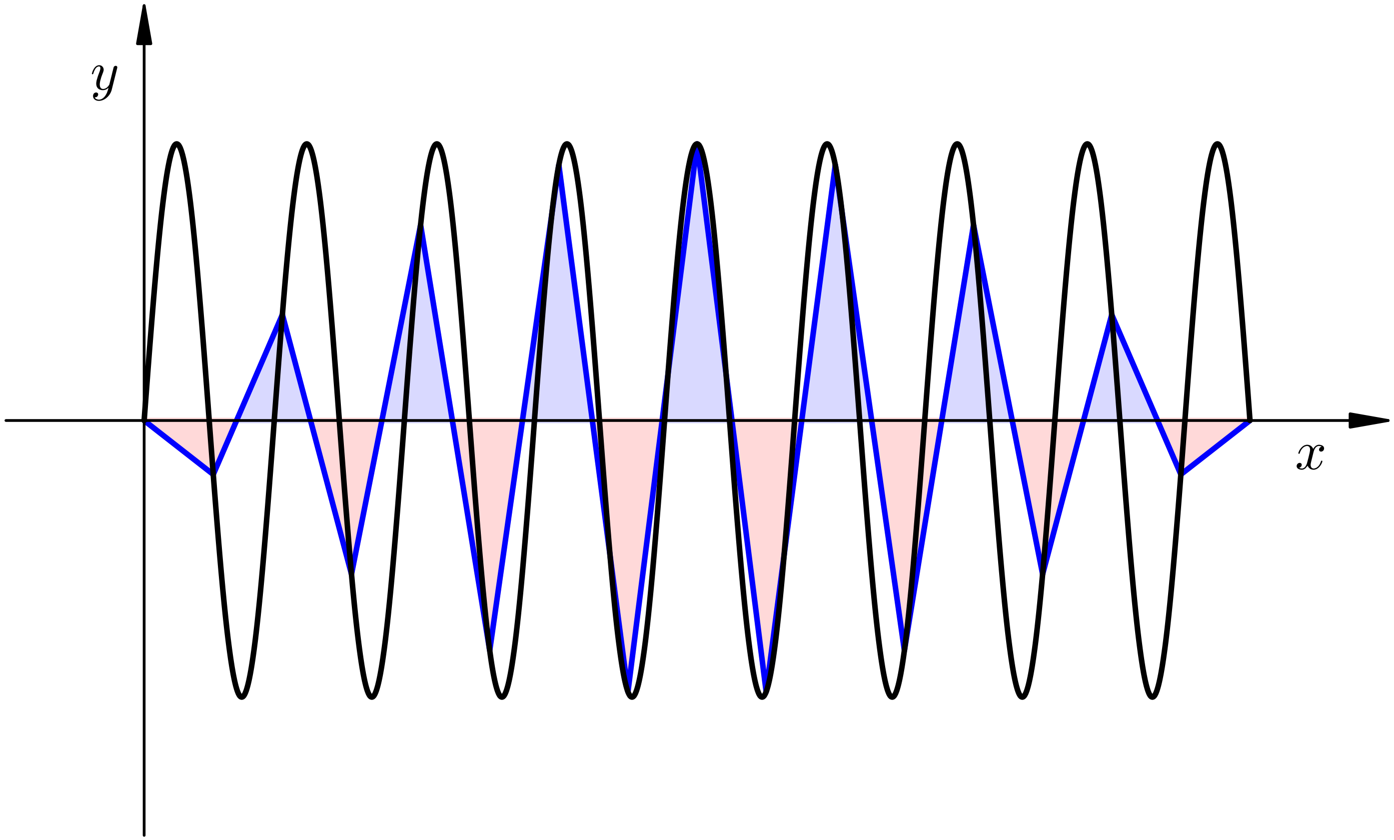
Produljena trapezna formula s 4 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula s 8 podintervala.

Oprez s oscilirajućim funkcijama



Produljena trapezna formula sa 16 podintervala.

Zadatak

Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

Oprez, ako u Rombergovom algoritmu

- ne zahtijevate stavljanje dovoljnog broja podintervala,

dobiveni rezultat bit će pogrešan!

Trapez može biti brži od Romberga

Primjer. Korištenjem Rombergovog algoritma izračunajte približnu vrijednost integrala

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

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

U ovom primjeru događa se zanimljiv fenomen:

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

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

Trapez može biti brži od Romberga

Početni dio Rombergove tablice:

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

Crveno označeni brojevi imaju sve znamenke točne.

Rombergov algoritam daje netočniju aproksimaciju 0.5651591437527359З.

Trapez može biti brži od Romberga

Sporost Rombergovog algoritma posljedica je činjenice da

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

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

Rješenje problema:

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

Teorija integracijskih formula — nastavak

Težinske integracijske formule — sažetak

Do sada smo radili integracijske formule oblika

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

(ispuštamo gornje indekse m) u kojima su

- čvorovi integracije $x_0, \ldots, x_m$ bili fiksni — unaprijed zadani,
- a težinske koeficijente $w_0, \ldots, w_m$ određivali smo iz uvjeta egzaktnosti na vektorskom prostoru polinoma $\mathcal{P}_d$ što većeg stupnja d.

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

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:

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

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

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

Težinska funkcija u integracijskoj formuli

Pretpostavljamo da je težinska funkcija w

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

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

- funkcija f polinom, neovisno o stupnju.

To postižemo zahtjevom da svi momenti težinske funkcije w

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

postoje (kao integrali) i da su konačni.

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

Interpolacijske težinske kvadraturne formule

Uz ove pretpostavke i oznake,

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

težinska integracijska ili kvadraturna formula

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

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

- ako i samo ako je interpolacijska,

tj. dobivena je kao

- egzaktni integral interpolacijskog polinoma funkcije f u čvorovima $x_1, \ldots, x_n$.

Težine u interpolacijskim formulama

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

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

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

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

Napomena: Ovo smo već dokazali, samo oznake su 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 k zadani cijeli broj takav da je $0 \leq k \leq n$. 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 $d = n - 1 + k$, ako i samo ako je formula interpolacijska i

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

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

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 $d = n - 1 + k$ ekvivalentno relaciji ortogonalnosti za polinom ω_n.

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

Neka je $p \in \mathcal{P}_{k-1}$ bilo koji polinom stupnja najviše $k-1$. Za produkt $f = \omega_n p$ onda vrijedi $\omega_n p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$.

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

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

Integracijske formule višeg stupnja egzaktnosti

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

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

Onda je

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

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

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

Neka je $p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$ 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 $q \in \mathcal{P}_{k-1}$ 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 $q \in \mathcal{P}_{k-1}$ 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 $p \in \mathcal{P}_{n+k-1}$. ∎

O granicama za stupanj egzaktnosti

Nekoliko komentara na prethodni rezultat.

Relacija ortogonalnosti

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

omogućava povećanje stupnja egzaktnosti formule za k,

- s $d = n - 1$,
- na $d = n - 1 + k$.

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

Naime, relacija ortogonalnosti postavlja

- točno k dodatnih uvjeta na čvorove $x_1, \ldots, x_n$.

O granicama za stupanj egzaktnosti

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

S druge strane, zbog nenegativnosti težnske funkcije w, mora biti $k \leq n$. Opravdanje:

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

Dakle, $k = n$ 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–Christofellove formule.

Relacija ortogonalnosti iz prethodnog teorema za $k = n$ 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

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

Ova formula se rijetko koristi za stvarno računanje težina. Prema autoru formule, težine w_k u Gaussovim formulama ponekad se zovu i Christofellovi brojevi.

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. $k < n$.

Integracijske formule s fiksnim rubovima

Prethodni teorem ima praktične primjene i za $k < n$.
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 $n - k$ 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.

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 $k = n - 1$

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

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 $k = n - 2$ 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).

Primjer za težinske formule

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Primjer. Napravimo usporedbu

- zatvorene Newton–Cotesove formule i
- Gaussove formule

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

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

U slučaju Newton–Cotesovih formula, težine možemo izračunati iz

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

Lagrangeova baza ℓ_1 i ℓ_2 jednaka je

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

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

Težinska Newton–Cotesova formula

pa imamo

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

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

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

Težinska Newton–Cotesova formula

Tražena zatvorena Newton–Cotesova formula glasi:

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

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

Uočite da korijenski singularitet u nuli uzrokuje da

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

Gaussova formula

Gaussovu formulu najlakše je odrediti preko ortogonalnih polinoma. Treba nam normalizirani 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 1 dobivamo:

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

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

Gaussova formula

- za polinom x izlazi:

$$0 = \int_0^1 x^{-1/2} x\, p_2(x)\, dx = \int_0^1 (x^{5/2} + a_1 x^{3/2} + a_0 x^{1/2})\, dx$$

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

Sustav za koeficijente je:

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

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

Gaussova formula

Rješenje tog sustava je

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

pa je ortogonalni polinom p_2

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

Čvorovi za Gaussovu integracijsku formulu su nultočke polinoma p_2:

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

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

Gaussova formula

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

Međutim, kad imamo čvorove x_1 i x_2 puno je lakše iskoristiti da Gaussova formula egzaktno integrira bazu polinoma

- stupnja 0, pa stavljamo $f(x) = 1$ i dobivamo jednadžbu

$$w_1^G + w_2^G = \int\limits_0^1 x^{-1/2}\, dx = 2,$$

- i stupnja 1, pa stavljamo $f(x) = x$ i dobivamo jednadžbu

$$x_1 w_1^G + x_2 w_2^G = \int\limits_0^1 x^{-1/2}\, x\, dx = \frac{2}{3}.$$

Gaussova formula

Rješenje prethodne dvije jednadžbe je

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

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

Sada je težina

- w_1^G približno 1.87476 puta veća od težine w_2^G.

Gaussova formula

Tražena Gaussova formula glasi:

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

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

Težinska Newton–Cotesova vs. Gaussova f.

Usporedimo prethodne dvije formule na integralu

$$I = \int_0^1 x^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx = 2C(1) \approx 1.5597868007536456 5895,$$

pri čemu C označava Fresnelov kosinusni integral. Aproksimacije po obje formule formule su:

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

$$I_G \approx 1.5575895595933938 6882,$$

a pripadne greške

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

što pokazuje da je Gaussova formula puno bolja.

Gaussove integracijske formule

Gaussove integracijske formule — ponavljanje

Gaussova integracijska ili kvadraturna formula s težinskom funkcijom w na intervalu $[a,b]$ ima oblik

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

i dostiže maksimalni stupanj egzaktnosti $d_{\max} = 2n - 1$.

- Čvorovi x_k su sve nultočke ortogonalnog polinoma p_n s težinskom funkcijom w na $[a,b]$,
- Težine w_k su dane formulom

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

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. ∎

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 težina w_k u Gaussovim integracijskim formulama. ■

Pozitivnost težina u formulama s $d = 2n - 2$

Potpuno isti argument vrijedi i za

- integracijske formule stupnja egzaktnosti $2n - 2$, (za jedan manjeg nego u Gaussovim formulama),
- jer egzaktno integriraju polinome ℓ_k^2, za $k = 1, \ldots, n$.

Na primjer,

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

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

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

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

Iz dokaza pozitivnosti težina odmah dobivamo i “proširenu” relaciju

$$w_k = \int_a^b w(x) \ell_k(x) \, dx = \int_a^b w(x) \ell_k^2(x) \, dx > 0, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Opet, to vrijedi za težine w_k u Gaussovim formulama ($d = 2n - 1$) i formulama stupnja egzaktnosti $d = 2n - 2$.

Konvergencija Gaussovih formula

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

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

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.

Konvergencija Gaussovih formula

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

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

Konvergencija Gaussovih formula

U prethodnom izvodu koristili smo činjenicu da su težinski koeficijenti w_k pozitivni. 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. ■

Ne vrijedi za Newton–Cotesove formule

Ovaj zaključak ne vrijedi za Newton–Cotesove formule,

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

Naime, za malo veće n, težine w_k mogu biti i negativne. Tada još uvijek vrijedi

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

zbog egzaktne integracije konstante $f(x) = 1$. 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.

Gaussove formule i Hermiteova interpolacija

Integracija i interpolacija — ponavljanje

Vidjeli smo da se Newton–Cotesove formule mogu dobiti

- integracijom Lagrangeovog interpolacijskog polinoma za funkciju f na (zadanoj) mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$.

Tu činjenicu smo onda iskoristili za

- nalaženje i ocjenu greške integracijske formule.

Na sličan način, i Gaussove formule mogu se dobiti

- integracijom Hermiteovog interpolacijskog polinoma za funkciju f na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$,
- uz dodatni zahtjev da koeficijenti uz članove s derivacijama budu jednaki nula — to će odrediti čvorove.

Nakon dokaza, to ćemo iskoristiti za nalaženje greške Gaussove integracije.

Integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma

Hermiteov interpolacijski polinom za funkciju f na mreži čvorova $x_1, \ldots, x_n$,

- interpolira vrijednosti funkcije i njezine derivacije u čvorovima ($2n$ uvjeta),

pa, općenito, ima stupanj $2n - 1$.

To odgovara stupnju egzaktnosti $d = 2n - 1$ za Gaussove formule, pa cijeli pristup ima smisla.