

Numerička integracija

Uvod u numeričku matematiku

M. Klaričić Bakula

Ožujak, 2009.

1 Općenito o integracijskim formulama

Neka je zadana funkcija $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, gdje je $I \subseteq \mathbb{R}$ (interval može biti i beskonačan). Želimo izračunati određeni integral

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b f(x) dx,$$

pri čemu je $[a, b] \subset I$.

Dok je deriviranje (barem analitički) jednostavan postupak, integriranje to nije, pa se integrali (u lijepoj analitičkoj formi) mogu izračunati samo za malen broj funkcija f . Zbog toga u većini slučajeva ne možemo iskoristiti osnovni teorem integralnog računa, tj. *Newton-Leibnitzovu formulu* za računanje $\mathcal{I}(f)$ preko vrijednosti primitivne funkcije F na rubovima segmenta

$$\mathcal{I}(f; a, b) = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

Drugim riječima, jedino što nam preostaje je približno, **numeričko računanje integrala** $\mathcal{I}(f; a, b)$.

Osnovna ideja numeričke integracije je izračunavanje $\mathcal{I}(f; a, b)$ (nadalje ćemo kraće pisati $\mathcal{I}(f)$) korištenjem vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. Neke integracijske formule koriste i vrijednosti derivacija funkcije f .

Opća integracijska formula ima oblik

$$\mathcal{I}(f) = \mathcal{I}_m(f) + E_m(f),$$

pri čemu je za $m \in \mathbb{N}_0$ prirodni broj $m + 1$ broj korištenih točaka, $\mathcal{I}_m(f)$ pripadna **aproksimacija integrala**, a $E_m(f)$ pritom napravljena **greška**. Ovakve formule za približnu integraciju funkcija jedne varijable često se zovu i **kvadraturene formule** (zbog interpretacije određenog integrala kao površine ispod krivulje).

Ako koristimo samo funkcijske vrijednosti za aproksimaciju integrala, onda aproksimacija $\mathcal{I}_m(f)$ ima oblik

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

pri čemu je broj m unaprijed zadan. Koeficijenti $x_k^{(m)}$ zovu se **čvorovi integracije**, a realni brojevi $w_k^{(m)}$ **težinski koeficijenti**.

U općem slučaju, za fiksni m , moramo odrediti $m + 1$ nepoznatih koeficijenata. Uobičajeni način njihovog određivanja je zahtjev da je integracijska formula egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja. No zašto baš tako? Ako postoji Taylorov red za funkciju f i ako on konvergira, onda bi to značilo da integracijska formula egzaktno integrira neki početni komad tog reda, točnije Taylorov polinom onolikog stupnja koliki je i stupanj egzaktnosti promatrane integracijske formule. Greška bi bila mala: bila bi jednaka integralu greške koja nastaje odbacivanjem dijela Taylorovog reda kada ga pretvaramo u Taylorov polinom. Zbog linearnosti integrala kao funkcionala vrijedi

$$\int (\alpha f(x) + \beta g(x)) dx = \int \alpha f(x) dx + \int \beta g(x) dx,$$

pa je dovoljno promatrati egzaktnost tih formula na nekoj bazi vektorskog prostora polinoma, recimo na standardnoj bazi

$$\mathcal{B} = \{1, x, x^2, \dots, x^m, \dots\}$$

jer svojstvo linearnosti osigurava egzaktnost za sve polinome do najvišeg stupnja baze \mathcal{B} .

Ako su čvorovi $x_k^{(m)}$ fiksirani i recimo ekvidistantni, onda dobivamo tzv. **Newton-Cotesove formule**, za koje moramo odrediti $m + 1$ nepoznatih koeficijenata $w_k^{(m)}$. Uvjet egzaktosti na vektorskom prostoru polinoma tada vodi na sustav linearnih jednažbi. Kasnije ćemo vidjeti da se formule mogu dobiti i kao integrali interpolacijskih polinoma stupnja m za funkciju f na zadanoj (ekvidistantnoj) mreži čvorova.

S druge strane, možemo fiksirati samo neke čvorove ili dozvoliti da su svi čvorovi slobodni. Ovakve formule zovu se **formule Gaussova tipa**. Kod ovakvih formula uobičajeno je pisati

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx,$$

pri čemu je nenegativna funkcija w **težinska funkcija**. Ideja je razdvojiti podintegralnu funkciju na dva dijela, tako da singulariteti budu uključeni u w . Gaussove se formule nikada ne računaju direktno iz uvjeta egzaktosti, jer to vodi na nelinearni sustav jednažbi. Pokazuje se da postoji veza između Gaussovih formula, težinske funkcije w i ortogonalnih polinoma s obzirom na w na intervalu $[a, b]$, koja omogućava efikasno računanje svih parametara za Gaussove formule.

Sjetimo se kratko jedne vrste interpolacijskih polinoma s kojima smo se već upoznali, **Newtonovih interpolacijskih polinoma**. Oni će nam poslužiti za ocjenu grešaka integracijskih formula.

Newtonov interpolacijski polinom koji interpolira funkciju $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ u $n + 1$, $n \in \mathbb{N}$, točaka $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$, je oblika

$$p_n(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] \\ + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \dots, x_n].$$

Podsjetimo se da je $f[x_0] = f(x_0)$ i

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \quad f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0},$$

a računanje se dalje nastavlja rekurzivno, pa je

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}.$$

Pod uvjetom da je funkcija f neprekidno $(n + 1)$ -derivabilna na segmentu $[a, b]$, te da su x_0, x_1, \dots, x_n međusobno različiti interpolacijski čvorovi iz $[a, b]$, greška Newtonovog interpolacijskog polinoma u točki $x \in [a, b]$ je dana s

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega(x) = f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] \omega(x),$$

gdje je

$$\min \{x_0, x_1, \dots, x_n\} < \xi < \max \{x_0, x_1, \dots, x_n\}.$$

2 Newton-Cotesove formule

Newton-Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, s tim da su prvi i posljednji uvijek krajevi segmenta $[a, b]$ (dakle, $x_0 = a$ i $x_m = b$). Preciznije, za zatvorenu Newton-Cotesovu formulu s $(m + 1)$ -nom točkom čvorovi su dani s

$$x_k^{(m)} = x_0 + kh_m, \quad k = 0, \dots, m, \quad : h_m = \frac{b - a}{m}.$$

Dakle, osnovni oblik ovakvih formula je ovakav:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_m(f) = \sum_{k=0}^m w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m).$$

2.1 Trapezna formula

Najjednostavnija zatvorena Newton-Cotesova formula je **trapezna formula** koja se dobije kada je $m = 1$. U tom slučaju aproksimacija integrala ima oblik

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_1(f) = w_0^{(1)} f(a) + w_1^{(1)} f(b),$$

jer je

$$x_0^{(1)} = a + 0 \cdot \frac{b-a}{1} = a, \quad x_1^{(1)} = a + 1 \cdot \frac{b-a}{1} = b.$$

Kako ćemo u ovoj točki stalno uzimati $m = 1$ izostavit ćemo pisanje gornjih indeksa, pa ćemo imati

$$w_k^{(m)} = w_k, \quad k = 0, \dots, m.$$

Dakle, moramo pronaći težine w_0 i w_1 tako da integracijska formula egzaktno integrira polinome što višeg stupnja, tj. da za polinome što višeg stupnja vrijedi

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_1(f) = w_0 f(a) + w_1 f(b).$$

Pogledajmo integrale članova naše baze \mathcal{B} .

$$\int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}, \quad k \geq 0.$$

U našem slučaju za $k = 0$ i $k = 1$ imamo

$$\begin{aligned} \int_a^b x^0 dx &= b - a = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1, \\ \int_a^b x^1 dx &= \frac{b^2 - a^2}{2} = w_0 \cdot a + w_1 \cdot b. \end{aligned}$$

Rješavanjem ovog kvadratnog sustava dobijemo

$$w_0 = w_1 = \frac{b - a}{2} = \frac{h}{2}.$$

Dakle, integracijska formula dobivena iz egzaktnosti na svim polinomima stupnja najviše 1 glasi

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_1(f) = \frac{f(a) + f(b)}{2} (b - a) = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)],$$

pa se zato i zove *trapezna formula*. Naime, površinu ispod krivulje $y = f(x)$ na $[a, b]$ zamijenili smo površinom trapeza komu je $(f(a) + f(b))/2$ je srednjica, a $b - a$ visina. Koliko je ta zamjena dobra ovisi, naravno, o funkciji f . Sve dok pravac "razumno" aproksimira oblik grafa funkcije f , greška je mala. Lako se vidi da za mnoge funkcije ipak nije tako.

Trapezna formula neće egzaktno integrirati sve polinome stupnja 2. Npr., već za polinom stupnja 2 koji je element baze \mathcal{B} vrijedi

$$\frac{b^3 - a^3}{3} = \int_a^b x^2 dx \neq \mathcal{I}_1(x^2) = \frac{a^2 + b^2}{2} (b - a).$$

Primjetimo još nešto: provučemo li kroz točke $(a, f(a))$, $(b, f(b))$ linearni interpolacijski polinom, a zatim ga egzaktno integriramo od a do b , dobit ćemo trapeznu formulu. Interpolacijski polinom koji prolazi kroz dane točke je dan formulom

$$p_1(x) = f(a) + f[a, b](x - a).$$

Integriranjem na $[a, b]$ dobijemo

$$\begin{aligned} \int_a^b p_1(x) dx &= \left(f(a)x + af[a, b]x + f[a, b]\frac{x^2}{2} \right) \Big|_a^b \\ &= f(a)(b - a) + f[a, b]\frac{(b - a)^2}{2} \\ &= (b - a)\frac{f(a) + f(b)}{2}. \end{aligned}$$

Ovaj nam pristup omogućava i ocjenu greške integracijske formule preko ocjene greške interpolacijskog polinoma, uz uvjet da f ima dovoljan broj neprekidnih derivacija.

Pretpostavimo sada da je funkcija f dvaput neprekidno derivabilna. Greška interpolacijskog polinoma stupnja 1 koji funkciju f interpolira u točkama $(a, f(a)), (b, f(b))$ na segmentu $[a, b]$ jednaka je

$$e_1(x) = f(x) - p_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2} (x - a)(x - b),$$

pa vrijedi

$$E_1(f) = \int_a^b e_1(x) dx = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2} (x - a)(x - b) dx.$$

Dakle, ostaje izračunati $E_1(f)$.

Da bismo to učinili iskoristit ćemo generalizaciju Teorema o srednjoj vrijednosti za integrale. Podsjetimo se najprije sljedećega: ako su funkcije g i $w \geq 0$ integrabilne na $[a, b]$, te ako je

$$m = \inf_{x \in [a, b]} g(x), \quad M = \sup_{x \in [a, b]} g(x),$$

onda vrijedi

$$m \int_a^b w(x) dx \leq \int_a^b w(x) g(x) dx \leq M \int_a^b w(x) dx.$$

Iz ovoga lako slijedi naredni teorem (s jednostavnijom verzijom smo se upoznali u Uvodu!).

TEOREM. (*Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti*) Neka su funkcije g i $w \geq 0$ integrabilne na $[a, b]$, te neka je

$$m = \inf_{x \in [a, b]} g(x), \quad M = \sup_{x \in [a, b]} g(x).$$

Tada postoji broj $\mu \in [m, M]$ takav da vrijedi

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

Posebno, ako je g neprekidna na $[a, b]$, onda postoji i broj $\nu \in [a, b]$ takav da vrijedi

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

Sada ćemo to iskoristiti za ocjenu greške $E_1(f)$.

Primjetimo da je

$$\frac{(x-a)(x-b)}{2} \leq 0, \quad x \in [a, b],$$

pa možemo staviti da je

$$w(x) = -\frac{(x-a)(x-b)}{2}, \quad g(x) = -f''(\xi), \quad x \in [a, b].$$

Ako je derivacija f'' neprekidna na $[a, b]$, onda po *Teoremu o integralnoj srednjoj vrijednosti* dobijemo

$$E_1(f) = -f''(\nu) \int_a^b -\frac{(x-a)(x-b)}{2} dx = -f''(\nu) \frac{(b-a)^3}{12} = -f''(\nu) \frac{h^3}{12}.$$

2.2 Simpsonova formula

Sljedeća zatvorena Newton-Cotesova formula je **Simpsonova formula** koja se dobije kada je $m = 2$. U tom slučaju imamo

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_2(f) = w_0^{(2)} f(x_0) + w_1^{(2)} f(x_0 + h_2) + w_2^{(2)} f(x_0 + 2h_2), \quad (1)$$

pri čemu je

$$h := h_2 = \frac{b - a}{2}.$$

I opet ćemo radi jednostavnosti izostaviti pisanje gornjih indeksa, no treba voditi računa da nisu isti kao kod trapezne formule.

Kada takav h uvrstimo u gornju formulu (1), dobijemo

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_2(f) = w_0 f(a) + w_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + w_2 f(b).$$

Sada ćemo izračunati koeficijente w_k iz uvjeta egzaktnosti na prostoru polinoma što višeg stupnja. Kako imamo tri nepoznata koeficijenta, moramo postaviti najmanje tri jednačbe.

$$\begin{aligned}b - a &= \int_a^b x^0 dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1, \\ \frac{b^2 - a^2}{2} &= \int_a^b x^1 dx = w_0 \cdot a + w_1 \cdot \frac{a + b}{2} + w_2 \cdot b, \\ \frac{b^3 - a^3}{3} &= \int_a^b x^2 dx = w_0 \cdot a^2 + w_1 \cdot \left(\frac{a + b}{2}\right)^2 + w_2 \cdot b^2.\end{aligned}$$

Rješavanjem ovog sustava dobijemo

$$w_0 = w_2 = \frac{1}{6}(b - a) = \frac{1}{3}h, \quad w_1 = \frac{4}{6}(b - a) = \frac{4}{3}h.$$

Dakle, integralna formula glasi

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right].$$

Simpsonova formula ima jednu prednost: iako je dobivena iz uvjeta egzaktnosti za polinome stupnja najviše dva, ona egzaktno integrira i sve polinome stupnja tri. Dovoljno je pokazati da egzaktno integrira element stupnja 3 baze \mathcal{B} .

$$\int_a^b x^3 dx = \frac{b^4 - a^4}{4} = \frac{b - a}{6} \left[a^3 + 4 \left(\frac{a + b}{2} \right)^3 + b^3 \right] = \mathcal{I}_2(x^3).$$

Nadalje, opet nije teško pokazati da je i ova formula interpolacijska. Ako provučemo kvadratni interpolacijski polinom kroz točke

$$(a, f(a)), \left(\frac{a + b}{2}, f\left(\frac{a + b}{2}\right) \right), (b, f(b)),$$

a zatim ga egzaktno integriramo na $[a, b]$, dobijemo upravo Simpsonovu formulu.

Pokazat ćemo da Simpsonova formula ima manju grešku nego trapezna. Grešku ćemo opet izračunati integracijom greške pripadnog interpolacijskog polinoma. Pod uvjetom da je f triput neprekidno derivabilna vrijedi

$$e_2(x) = f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{6} (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b), \quad \xi \in [a, b],$$

pa je

$$E_2(f) = \int_a^b e_2(x) dx = \int_a^b \frac{f'''(\xi)}{6} (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b) dx.$$

Na žalost, funkcija

$$y = (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b)$$

nije stalnog predznaka na $[a, b]$, pa ne možemo direktno primijeniti *Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti*.

Označimo

$$c := \frac{a + b}{2}$$

i definirajmo

$$w(x) = \int_a^x (t - a)(t - c)(t - b) dt, \quad x \in [a, b].$$

Tvrdimo da vrijedi

$$w(x) = \begin{cases} 0, & x = a \\ y > 0, & x \in (a, b) \\ 0, & x = b \end{cases}.$$

Naime, skiciramo li funkciju f definiranu s $f(t) = (t - a)(t - c)(t - b)$, $t \in [a, b]$, odmah vidimo da je centralno simetrična oko središnje točke c segmenta $[a, b]$. Dakle, w će rasti na $[a, c]$, a padati na $[c, b]$, dok će c biti točka maksimuma. Očito je da je $w(a) = w(b) = 0$.

Prisjetimo li se Newtonovog interpolacijskog polinoma, znamo da za $m = 2$ vrijedi

$$e(x) = f[a, b, c, x] \omega(x) = \frac{f'''(\xi)}{6} \omega(x),$$

pri čemu je

$$a < \xi < b,$$

pa je greška Simpsonove formule dana s

$$E_2(f) = \int_a^b w'(x) f[a, b, c, x] dx.$$

Parcijalnom integracijom dobivamo

$$E_2(f) = w(x) f[a, b, c, x] \Big|_a^b - \int_a^b w(x) \frac{d}{dx} f[a, b, c, x] dx.$$

Prvi član je očito jednak nuli jer je $w(a) = w(b) = 0$, pa ostaje još srediti drugi član. Može se pokazati da je derivacija po x treće podijeljene razlike $f[a, b, c, x]$ u stvari četvrta podijeljena razlika s dvostrukim čvorom x .

Prema tome, imamo

$$E_2(f) = - \int_a^b w(x) f[a, b, c, x, x] dx.$$

Kako je funkcija w nenegativna, možemo primjeniti *Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti*, pa dobijemo

$$E_2(f) = -f[a, b, c, \eta, \eta] \int_a^b w(x) dx,$$

gdje je $\eta \in [a, b]$. Ako još postoji i neprekidna derivacija $f^{(4)}$ na $[a, b]$, možemo pisati

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b w(x) dx.$$

Ostaje još integrirati funkciju w .

Imamo

$$\begin{aligned} w(x) &= \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b) dt \\ &= \frac{(x-c)^4}{4} - h^2 \frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4}, \end{aligned}$$

pa je

$$\int_a^b w(x) dx = \int_a^b \left[\frac{(x-c)^4}{4} - h^2 \frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4} \right] dx = \frac{4}{15} h^5.$$

Kada to uključimo u formulu za grešku, dobijemo

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b w(x) dx = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \cdot \frac{4}{15} h^5 = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta).$$

Odmah uočavamo da je greška za jedan red veličine bolja nego što bi trebala biti s obzirom na upotrijebljeni interpolacijski polinom.

2.3 Produljene formule

Nije teško pokazati da su sve Newton-Cotesove formule integrali interpolacijskih polinoma na ekvidistantnoj mreži. Kao što podizanje stupnja interpolacijskog polinoma na ekvidistantnoj mreži može dovesti do divergencije procesa, tako se može dogoditi i s Newton-Cotesovim integracijskim formulama višega reda. Drugim riječima, ako podizanjem reda integracijske formule ne povećavamo točnost, već je u nekim slučajevima i drastično smanjujemo, što preostaje za učiniti u cilju smanjenja greške?

Rješenje je sljedeće: umjesto da podižemo red formule, podijelimo područje integracije na više djelova (recimo, jednake duljine), a zatim na svakom od njih primijenimo odgovarajuću integracijsku formulu niskog reda. Tako dobivene formule zovu se **produljene formule**.

Pogledajmo kako to radimo u slučaju trapezne formule.

Podijelimo segment $[a, b]$ na n podintervala oblika $[x_{k-1}, x_k]$, $k = 1, \dots, n$, s tim da je

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b,$$

i na svakome od njih primijenimo običnu trapeznu formulu. Tada je

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx,$$

pa na isti način zbrojimo obične trapezne aproksimacije u produljenu trapeznu aproksimaciju.

Najjednostavniji je slučaj kada su točke x_k ekvidistantne, tj. kada je svaki podinterval $[x_{k-1}, x_k]$ iste duljine h . To znači da je

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

Aproksimacija produljenom trapeznom formulom je

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n \right) + E_n^T(f),$$

pri čemu je $f_k = f(x_k)$, $k = 0, \dots, n$, a $E_n^T(f)$ je greška produljene formule.

Pretpostavimo sada da je f dvaput neprekidno derivabilna na $[a, b]$. Grešku $E_n^T(f)$ možemo zapisati kao zbroj grešaka osnovnih trapeznih formula na podintervalima, pa je

$$E_n^T(f) = \sum_{k=1}^n -f''(\nu_k) \frac{h^3}{12} = -\frac{h^3 n}{12} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f''(\nu_k) \right).$$

Kako izraz

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f''(\nu_k)$$

predstavlja aritmetičku sredinu brojeva $f''(\nu_k)$, to znamo da je ispunjeno

$$\min \{f''(\nu_1), \dots, f''(\nu_n)\} \leq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f''(\nu_k) \leq \max \{f''(\nu_1), \dots, f''(\nu_n)\},$$

a zbog neprekidnosti f'' slijedi

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f''(\nu_k) = f''(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

Dakle, imamo

$$E_n^T(f) = -\frac{h^3 n}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

Iz te formule lako dobijemo važnu ocjenu broja podintervala potrebnih da se postigne zadana točnost $\varepsilon > 0$ za produljenu trapeznu formulu. Vrijedi

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{(b-a)h^2}{12}M = \frac{(b-a)^3}{12n^2}M, \quad M = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|,$$

pa želimo li da je

$$|E_n^T(f)| \leq \varepsilon,$$

dovoljno je tražiti

$$n \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M}{12\varepsilon}}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

2.4 Formula srednje točke (midpoint formula)

Do sada smo se upoznali s dvije vrste Newton-Cotesovih kvadrature formula zatvorenog tipa. Ako, pak, prilikom interpolacije ne koristimo jednu ili nijednu rubnu točku dobijemo **otvorene Newton-Cotesove formule**.

Stavimo li

$$x_0 := a, \quad x_{m+1} := b, \quad h_m = \frac{b - a}{m + 2},$$

onda otvorene Newton-Cotesove formule imaju oblik

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{I}_m(f) = \sum_{k=0}^m w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m).$$

Najpoznatija i najkorištenija otvorena Newton-Cotesova formula je ona koja se dobije za $m = 0$, a poznata je pod nazivom **midpoint formula** ili **formula srednje točke**.

Da bismo odredili midpoint formulu dovoljno je naći koeficijent $w_0 := w_0^{(0)}$ takav da je formula

$$\int_a^b f(x) dx = w_0 f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja, u ovom slučaju stupnja jedan. Dobijemo

$$b - a = \int_a^b 1 dx = w_0,$$

odakle slijedi

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Greška ove integracijske formule jednaka je integralu greške interpolacijskog polinoma stupnja nula (konstante) koji interpolira f u srednjoj točki segmenta $[a, b]$.

Ako definiramo

$$w(x) = \int_a^x (t - c) dt, \quad c := \frac{a + b}{2},$$

onda koristeći istu tehniku kao kod Simpsonove formule dobijemo

$$E_0(f) = \int_a^b e_0(x) dx = f''(\xi) \frac{(b - a)^3}{24}, \quad \xi \in [a, b].$$

Koristimo li produljenu midpoint formulu na n podintervala jednake duljine h , dobijemo

$$I_n(f) = h(f_1 + \cdots + f_n) + E_n^M(f), \quad h = \frac{b-a}{n},$$
$$x_k = a + \left(k - \frac{1}{2}\right)h, \quad y_k = f(x_k), \quad k = 1, \dots, n,$$

pri čemu je $E_n^M(f)$ ukupna greška produljene midpoint formule koja je jednaka

$$E_n^M(f) = \sum_{k=1}^n f''(\xi_k) \frac{h^3}{24} = \frac{h^3 n}{24} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f''(\xi_k) \right)$$
$$= \frac{h^3 n}{24} f''(\xi) = \frac{h^2 (b-a)}{24} f''(\xi),$$

gdje je $\xi \in [a, b]$.

3 Rombergov algoritam

Pri izvodu **Rombergovog algoritma** koristimo se sljedećim principima:

- udvostručavanjem broja podintervala u produljenoj trapeznoj metodi,
- eliminacijom člana greške iz dviju susjednih produljenih formula (ponovljena primjena ovog principa zove se **Richardsonova ekstrapolacija**).

Da bismo nastavili moramo se najprije podsjetiti što su Bernoullijevi polinomi i iz njih definirani Bernoullijevi brojevi.

Bernoullijevi polinomi zadani su implicitno funkcijom izvodnicom

$$\frac{te^{xt}}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x) \frac{t^n}{n!},$$

dok se **Bernoullijevi brojevi** implicitno definiraju s

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{t^n}{n!}.$$

Evo prvih nekoliko Bernoullijevih polinoma:

- $B_0(x) = 1$
- $B_1(x) = x - \frac{1}{2}$
- $B_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}$
- $B_3(x) = x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x$
- $B_4(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}$

Općenito vrijedi

$$B_{2n+1}(0) = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Evo i prvih nekoliko Bernoullijevih brojeva:

- $B_0 = 1$
- $B_1 = -1/2$
- $B_2 = 1/6$
- $B_4 = -1/30$
- $B_6 = 1/42$

Općenito vrijedi

$$B_n = B_n(0), \quad n \in \mathbb{N},$$

pa je

$$B_{2n+1} = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Bernoullijevi polinomi mogu se definirati i rekurzivno s

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

$$B'_n(x) = \begin{cases} nB_{n-1}(x), & n \geq 4 \text{ paran} \\ n(B_{n-1}(x) + B_{n-1}) & n \geq 3 \text{ neparan} \end{cases}.$$

Za Bernoullijeve polinome vrijedi i

$$\int_0^1 B_n(x) dx = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Ponekad su nam potrebna i **periodička proširenja Bernoullijevih polinoma**. Ona se definiraju kao

$$B_n^*(x) = \begin{cases} B_n(x), & x \in [0, 1] \\ B_n^*(x-1) & x > 1 \end{cases}.$$

Sada ćemo se upoznati s jednim od klasičnih teorema numeričke analize koji nam daje **asimptotski razvoj ocjene greške** za trapeznu formulu.

TEOREM. (*Euler-Maclaurinova formula*) Neka je $m \in \mathbb{N}_0$ i $n \in \mathbb{N}$. Definiramo ekvidistantnu mrežu na n podintervala segmenta $[a, b]$ s

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

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

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

pri čemu je

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

a ostatak $F_{n,m}$ je dan s

$$F_{n,m} = \frac{(b - a)^{2m+2}}{n^{2m+2} (2m + 2)!} \int_a^b B_{2m+2}^* \left(\frac{b - a}{h} \right) f^{(2m+2)}(x) dx.$$

Sada možemo izvesti **Rombergov algoritam**.

Označimo s $I_n^{(0)}$ trapeznu formulu duljine intervala $h = (b - a) / n$. Ako je n paran iz Euler-Maclaurinove formule dobijemo

$$\int_a^b f(x) dx - I_n^{(0)}(f) = \frac{d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{d_4^{(0)}}{n^4} + \dots + \frac{d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n,m},$$

$$\int_a^b f(x) dx - I_{n/2}^{(0)}(f) = \frac{4d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{16d_4^{(0)}}{n^4} + \dots + \frac{2^{2m}d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n/2,m}.$$

Ako prvi razvoj pomnožimo s 4 i oduzmemo mu drugi razvoj, dobit ćemo

$$4 \left(\int_a^b f(x) dx - I_n^{(0)}(f) \right) - \left(\int_a^b f(x) dx - I_{n/2}^{(0)}(f) \right) = -\frac{12d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{60d_6^{(0)}}{n^6} + \dots.$$

Sređivanjem dobijemo

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{4I_n^{(0)}(f) - I_{n/2}^{(0)}(f)}{3} - \frac{4d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{20d_6^{(0)}}{n^6} + \dots.$$

Prvi član s desne strane jednakosti možemo uzeti kao novu, bolju aproksimaciju integrala, u oznaci

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

Greška ove nove aproksimacije iznosi

$$\int_a^b f(x) dx - I_n^{(1)}(f) = \frac{d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{d_6^{(1)}}{n^6} + \dots,$$

pri čemu je

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

Cilj nam je naći eksplicitnu formulu za $I_n^{(1)}(f)$.

Vrijedi (vidi produljenu trapeznu formulu)

$$I_n^{(0)} = h \left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n \right),$$
$$I_{n/2}^{(0)} = h_1 \left(\frac{1}{2}f_0 + f_2 + \cdots + f_{n-2} + \frac{1}{2}f_n \right), \quad h_1 = 2h.$$

Uvrštavanjem u $I_n^{(1)}(f)$ dobijemo

$$I_n^{(1)}(f) = \frac{4h}{3} \left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n \right) - \frac{2h}{3} \left(\frac{1}{2}f_0 + f_2 + \cdots + f_{n-2} + f_n \right)$$
$$= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n),$$

što je u stvari Simpsonova formula s n podintervala.

Postupak možemo nastaviti na analogan način. Dobijemo

$$\int_a^b f(x) dx - I_{n/2}^{(1)}(f) = \frac{16d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{64d_6^{(1)}}{n^6} + \dots,$$

pa je

$$16 \left(\int_a^b f(x) dx - I_n^{(1)}(f) \right) - \left(\int_a^b f(x) dx - I_{n/2}^{(1)}(f) \right) = -\frac{48d_6^{(1)}}{n^6} + \dots,$$

odnosno

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{16I_n^{(1)}(f) - I_{n/2}^{(1)}(f)}{15} - \frac{48d_6^{(1)}}{n^6} + \dots.$$

Ponovno prvi član s desne strane jednakosti proglasimo novom aproksimacijom integrala

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

Ako ovaj postupak nastavimo induktivno, dobijemo Richardsonovu ekstrapolaciju

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

pri čemu je greška za $f \in C^{(2k+2)}[a, b]$ jednaka

$$E_n^{(k)}(f) = \int_a^b f(x) dx - I_n^{(k)}(f) = \frac{d_{2k+2}^{(k)}}{n^{2k+2}} + \dots = \beta_k (b-a) h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

Može se pokazati i da vrijedi

$$\frac{E_n^{(k)}(f)}{E_{2n}^{(k)}(f)} = 2^{2k+2}.$$

Rombergova tablica

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

Omjeri pogrešaka u stupcima Rombergove tablice

$$\begin{array}{cccc}
 1 & & & \\
 4 & 1 & & \\
 4 & 16 & 1 & \\
 4 & 16 & 64 & 1 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \quad \ddots
 \end{array}$$

OBAVEZNO POGLEDATI PRIMJERE U KNJIZI, STR. 503.!!!!!!

4 Težinske integracijske formule

Pretpostavimo da želimo približno izračunati integral

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

pri čemu je w pozitivna, ili barem nenegativna, **težinska funkcija** za koju pretpostavljamo da je integrabilna na (a, b) , s time da dozvoljavamo mogućnost njene nedefiniranosti na rubovima a i b . Pri tom interval integracije može biti i beskonačan. Drugim riječima, promatramo opći problem jednodimenzionalne integracije zadane funkcije f po zadanoj neprekidnoj mjeri $d\lambda$ generiranoj težinskom funkcijom w na zadanoj domeni. Ako je $w(x) = 1$ za sve $x \in [a, b]$, onda koristimo kraću oznaku $I(f)$ umjesto $I_w(f)$. Takvu kraću oznaku koristimo i ako je iz konteksta jasno o kojoj se težinskoj funkciji radi.

Kao i prije, ovaj integral aproksimiramo težinskom sumom vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. U ovo poglavlju ćemo točke numerirati od 1, a ne od 0, zato jer nam više neće postojati onakva povezanost između egzaktnosti i broja točaka kava je postojala kod netežinskih formula.

Dakle, **opća težinska integracijska formula** za aproksimaciju integrala $I_w(f)$ ima oblik

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i^{(n)} f(x_i^{(n)}), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Kao i prije, gornje indekse (n) ćemo radi jednostavnosti izostaviti iz zapisa, no stalno treba voditi računa da formula ovisi i o izboru prirodnog broja n . Brojeve w_i nazivamo **težinskim koeficijentima** ili **težinama** integracijske formule.

Dakle, sasvim općenito možemo pisati

$$I_w(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx = I_n(f) + E_n(f),$$

gdje je $E_n(f)$ **greška aproksimacije**.

Podsjetimo se da je u Uvodu definirano

$$\begin{aligned}\|\mathbf{a}\|_1 &= |a_1| + \cdots + |a_n|, \\ \|\mathbf{a}\|_\infty &= \max \{|a_1|, \dots, |a_n|\},\end{aligned}$$

pri čemu je $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n)$, no sada će nam trebati **norme funkcija**. Za funkciju $g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ definiramo

$$\begin{aligned}\|g\|_1 &= \int_a^b |g(x)| \, dx, \\ \|g\|_\infty &= \sup_{x \in [a, b]} |g(x)|.\end{aligned}$$

Osnovnu podlogu za konstrukcije formula i ocjenu grešaka daje sljedeći rezultat.

TEOREM. Ako je

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

Riemannov integral na konačnoj domeni $[a, b]$ i ako je \hat{f} bilo koja druga funkcija za koju postoji $I_w(\hat{f})$, onda vrijedi ocjena

$$\left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| \leq \|w\|_1 \left\| f - \hat{f} \right\|_\infty.$$

DOKAZ. Podsjetimo se da smo u uvodu naglasili kako ćemo promatrati težinske funkcije w koje su nenegativne i integrabilne, no u ovom slučaju je dovoljno promatrati w takvu da je $|w|$ integrabilna (a ona je svakako i nenegativna).

Ocjenu dobivamo direktno iz svojstava Riemannovog integrala. Imamo

$$\begin{aligned} \left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| &= \left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \int_a^b w(x) \hat{f}(x) dx \right| \\ &\leq \left| \int_a^b w(x) (f(x) - \hat{f}(x)) dx \right| \\ &\leq \int_a^b |w(x)| |f(x) - \hat{f}(x)| dx. \end{aligned}$$

Znamo da je

$$\left| f(x) - \hat{f}(x) \right| \leq \sup_{x \in [a, b]} \left| f(x) - \hat{f}(x) \right| = \|f - \hat{f}\|_{\infty}, \quad \forall x \in [a, b],$$

pa dobijemo

$$\left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| \leq \|f - \hat{f}\|_{\infty} \int_a^b |w(x)| dx = \|w\|_1 \|f - \hat{f}\|_{\infty} \quad \blacksquare$$

NAPOMENA. Ako za perturbiranu funkciju \hat{f} uzmemo funkciju $\hat{f} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ definiranu

$$\hat{f}(x) = f(x) + c \operatorname{sign}(w(x)),$$

onda je

$$\|f - \hat{f}\|_{\infty} = c,$$

a u ocjeni dobivamo jednakost, tj.

$$\left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| = c \|w\|_1.$$

Vidimo da apsolutni broj uvjetovanosti za $I_w(f)$ ne ovisi o f , već samo o w .

Zamislamo sada da je \hat{f} neka aproksimacija, a ne perturbacija funkcije f , koju želimo iskoristiti za približno računanje integrala $I_w(f)$. U to slučaju nejednakost

$$\left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| \leq \|w\|_1 \left\| f - \hat{f} \right\|_\infty$$

daje ocjenu apsolutne pogreške u integralu $I_w(\hat{f})$ izraženu preko greške aproksimacije funkcije f u normi ∞ .

Ono što stvarno želimo je dobiti niz aproksimacija integrala koji konvergira prema $I_w(f)$. Jedan od načina za to postići je izbor odgovarajućeg niza aproksimacija \hat{f}_n , $n \in \mathbb{N}$, funkcije f . Očito treba birati aproksimacije \hat{f}_n za koje znamo da *uniformno aproksimiraju* funkciju f , jer tada vrijedi

$$\left\| f - \hat{f}_n \right\|_\infty \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

pa dobijemo

$$\left| I_w(f) - I_w(\hat{f}_n) \right| \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Naravno da ove aproksimacije ovise o funkciji f , no nije nam cilj prilikom svake integracije posebno konstruirati novi niz aproksimacija. Poželjno bi bilo da svaku funkciju f za koju postoji $I_w(f)$ možemo aproksimirati nekim prostorom funkcija.

Weierstrassov teorem o uniformnoj aproksimaciji neprekidnih funkcija polinomima na konačnom intervalu $[a, b]$ sugerira da je za spomenuti prostor funkcija treba uzeti prostor polinoma \mathcal{P}_d stupnja najviše d , pri čemu d ovisi o n (čak i raste s n). Kao što se pokazuje, korisno je uzeti $d \neq n$.

Za praktičnu primjenu ovog pristupa moramo moći efektivno izračunati integral $I_w(\hat{f})$ aproksimacijske funkcije, i to za bilo koju funkciju f za koju postoji $I_w(f)$. To se najlakše postiže tako da konstruiramo pripadnu integracijsku formulu I_n koja je egzaktna na cijelom prostoru polinoma \mathcal{P}_d . Dakle, uvjet egzaktnosti za I_n je

$$I_w(f) = I_n(f) \text{ ili } E_n(f) = 0, \quad \forall f \in \mathcal{P}_d.$$

Pri tom imamo **ocjenu greške** pripadne integracijske formule $I_n(f)$ za bilo koju f

$$|E_n(f)| = |I_w(f) - I_n(f)| = \left| I_w(f) - I_w(\hat{f}) \right| \leq \|w\|_1 \left\| f - \hat{f} \right\|_\infty.$$

5 Gaussove integracijske formule

Za razliku od Newton-Cotesovih formula, Gaussove integracijske formule su oblika

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

pri čemu točke integracije x_1, \dots, x_n nisu unaprijed zadane, nego se izračunaju tako da greška takve formula bude što manja.

Bitno je znati da se za neke važne težinske funkcije na određenim intervalima čvorovi i težine standardno tabeliraju u priručnicima. Evo nekih koje se često javljaju:

težinska funkcija w	interval	ime formule Gauss-*
1	$[-1, 1]$	Legendre
$1/\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 1. vrste
$\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 2. vrste
e^{-x}	$[0, \infty)$	Laguerre
e^{-x^2}	$(-\infty, \infty)$	Hermite

Glavni rezultat je sljedeći: ako zahtijevamo da formula integrira egzaktno polinome što je moguće većeg stupnja, onda su točke x_i u stvari nultočke polinoma koji su ortogonalni na intervalu (a, b) obzirom na težinsku funkciju w , a težine w_i mogu se eksplicitno izračunati po formuli

$$w_i = \int_a^b w(x) l_i(x) dx, \quad i = 1, \dots, n,$$

pri čemu su l_i polinomi Legrangeove baze definirani uvjetom

$$l_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

NAPOMENA. Kažemo da su funkcije $f, g : I \rightarrow \mathbb{R}$ **ortogonalne** na intervalu $(a, b) \subset I$ obzirom na težinsku funkciju $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ ako vrijedi

$$\int_a^b w(x) f(x) g(x) dx = 0.$$

Slično kao i Newton-Cotesove integracijske formule, i Gaussove formule se mogu dobiti integracijom jedne vrste interpolacijskih polinoma, no u ovom slučaju se radi o Hermiteovim interpolacijskim polinomima. Takav pristup ekvivalentan je onomu da Gaussove formule integriraju egzaktno polinome što je moguće višeg stupnja, tj. da vrijedi

$$\int_a^b w(x) x^j dx = \sum_{i=1}^n w_i x_i^j, \quad j = 0, 1, \dots, 2n - 1.$$

Ovaj drugi pristup nas vodi do sustava s $2n$ jednažbi i $2n$ nepoznanica x_k i w_k , no nepoznanice x_k ulaze u sustav nelinearno, pa je ovakav pristup težak: čak i dokaz da ovakav sustav ima jedinstveno rješenje nije jednostavan. Dakle, bolje je krenuti koristeći interpolacijske polinome.

Hermiteov interpolacijski polinom h_{2n-1} stupnja $2n - 1$, koji u čvorovima integracije x_i interpolira vrijednosti $f_i = f(x_i)$, $i = 1, \dots, n$, može se zapisati kao

$$h_{2n-1}(x) = \sum_{i=1}^n \left([1 - 2(x - x_i) l'_i(x_i)] l_i^2(x) f_i + (x - x_i) l_i^2(x) f'_i \right).$$

Integracijom dobijemo

$$\int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{i=1}^n (A_i f_i + B_i f'_i).$$

gdje su

$$A_i = \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_i) l'_i(x_i)] l_i^2(x) dx,$$

$$B_i = \int_a^b w(x) (x - x_i) l_i^2(x) dx,$$

za $i = 1, \dots, n$.

Uočimo da se u integracijskoj formuli sada javljaju i dodatni članovi $B_i f'_i$ koji koriste i derivaciju funkcije f u čvorovima integracije, pa ovakva formula ne bi bila Gaussova. Kada bi, kao kod Newton-Cotesovih formula, čvorovi integracije bili unaprijed zadani, iz uvjeta egzaktnosti bi se trebalo odrediti $2n$ nepoznatih parametara (težinskih koeficijenata) $A_i, B_i, i = 1, \dots, n$. Shodno tomu, očekivali bismo da formula egzaktno integrira sve polinome najviše stupnja $2n - 1$. No za uporabu ove formule treba znati sve funkcijske vrijednosti u čvorovima, te još i sve vrijednosti prve derivacije funkcije u čvorovima. To svakako želimo izbjeći.

Ideja je pokušati izbjeći korištenje derivacija, a to ćemo postići tako da odgovarajućim izborom čvorova x_i poništimo koeficijente B_i uz derivacije f'_i . Pri tom egzaktnost integracijske formule mora ostati ista (ostao je isti i broj nepoznatih parametara). Tako dobivena formula koristila bi samo vrijednosti funkcije f u čvorovima integracije, pa bi samim time bila Gaussova formula.

Može se pokazati da odgovarajućim izborom (različitih) čvorova x_i uvijek možemo poništiti koeficijente B_i , no za to nam je potrebno ponovno uvesti **polinom čvorova** (*node polynomial*) ω , koji ima nultočke u svim čvorovima integracije. On je zadan s

$$\omega(x) := (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n).$$

Očito je da ovaj polinom ima točno n jednostrukih nultočaka i da su to upravo čvorovi x_i . Sljedeća lema nam govori kako izabrati čvorove integracije.

LEMA. Ako je polinom ω zadan s

$$\omega(x) := (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

ortogonalan s težinom w na sve polinome nižeg stupnja, tj. ako vrijedi

$$\int_a^b w(x) \omega(x) x^i dx = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1,$$

onda su svi koeficijenti B_i jednaki nula.

DOKAZ. Direktno se može provjeriti identitet

$$(x - x_i) l_i(x) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_i)}.$$

Supstitucijom ovog identiteta u izraz za B_i dobijemo

$$B_i = \frac{1}{\omega'(x_i)} \int_a^b w(x) \omega(x) l_i(x) dx.$$

Kako je po pretpostavci ω ortogonalan s težinom w na sve polinome nižeg stupnja, a stupanj polinoma l_i je najviše $n - 1$, to tvrdnja odmah slijedi ■

NAPOMENA. Lako se vidi da vrijedi i obrat ove leme. Razlog je to što su funkcije l_i zaista baza prostora \mathcal{P}_{n-1} .

Važno je napomenuti da takav ortogonalni polinom s obzirom na težinsku funkciju w zaista i **postoji**, a jednoznačan je do na vodeći koeficijent. Mi ćemo, zbog oblika Gaussove formule, izabrati onoga s vodećim koeficijentom 1, pa će za nas on uvijek biti **jedinstven**.

Nadalje, može se pokazati da uvijet ortogonalnosti iz prethodne leme jednoznačno određuje raspored čvorova za Gaussovu integraciju. To je posljedica činjenice da polinom ω ima točno n jednostrukih nultočaka koje možemo samo permutirati, a uz standardni dogovor da je

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n,$$

one su jednoznačno određene.

Time smo dokazali da **postoji jedinstvena Gaussova integracijska formula** oblika

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i).$$

Čvorovi integracije x_i su nultočke ortogonalnog polinoma stupnja n na $[a, b]$ s težinskom funkcijom w , a težinske koeficijente w_i izračunamo iz

$$A_i = \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_i) l'_i(x_i)] l_i^2(x) dx, \quad i = 1, \dots, n.$$

No koristimo li uvjet ortogonalnosti, možemo dobiti i jednostavniju formulu. Naime, vrijedi

$$\begin{aligned} A_i &= \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_i) l'_i(x_i)] l_i^2(x) dx \\ &= \int_a^b w(x) l_i^2(x) dx - 2l'_i(x_i) B_i = \int_a^b w(x) l_i^2(x) dx. \end{aligned}$$

Dakle,

$$w_i = A_i = \int_a^b w(x) l_i^2(x) dx.$$

Uočimo da je podintegralna funkcija w nenegativna, a l_i^2 je različit od nulpolinoma, pa desna strana jednakosti mora biti pozitivna. Dakle, *svi težinski koeficijenti u Gaussovoj integracijskoj formuli su pozitivni, što je vrlo bitno za numeričku stabilnost i konvergenciju.*

Zgodno je još primijetiti da vrijedi

$$w_i = \int_a^b w(x) l_i^2(x) dx = \int_a^b w(x) l_i(x) dx.$$

DOKAZ. Očito je to isto kao i dokazati

$$\int_a^b w(x) l_i^2(x) dx - \int_a^b w(x) l_i(x) dx = \int_a^b w(x) l_i(x) (l_i(x) - 1) dx = 0.$$

Jer je $l_i(x_j) = \delta_{ij}$ to se polinom $l_i - 1$ poništava u točki x_i , pa mora sadržavati faktor $(x - x_i)$. Dakle,

$$l_i(x) - 1 = (x - x_i) q(x), \quad \partial q = \partial l_i - 1 = n - 2.$$

Stoga je,

$$l_i(x) (l_i(x) - 1) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_i)(x - x_i)} (l_i(x) - 1) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_i)} q(x).$$

Zbog ortogonalnosti polinoma ω na sve polinome nižeg stupnja dobijemo

$$\int_a^b w(x) l_i(x) (l_i(x) - 1) dx = \frac{1}{\omega'(x_i)} \int_a^b w(x) \omega(x) q(x) dx = 0 \quad \blacksquare$$

PRIMJER. Neka je $w(x) = 1$ za sve $x \in (-1, 1)$ i $n = 3$. Odredimo čvorove integracije iz uvjeta ortogonalnosti. Dakle, potrebno je odrediti nultočke funkcije

$$\omega_3(x) = a + bx + cx^2 + x^3$$

za koju vrijedi

$$\int_{-1}^1 \omega_3(x) x^i dx = \int_{-1}^1 (a + bx + cx^2 + x^3) x^i dx = 0, \quad i = 0, 1, 2.$$

Nakon integracije dobijemo sustav

$$\begin{aligned} 2a + \frac{2}{3}c &= 0 \\ \frac{2}{3}b + \frac{2}{5}c &= 0 \\ \frac{2}{3}a + \frac{2}{5}c &= 0. \end{aligned}$$

Nakon rješavanja sustava imamo

$$a = 0, \quad b = -3/5, \quad c = 0,$$

pa je

$$\omega_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x = \left(x + \sqrt{\frac{3}{5}}\right) x \left(x - \sqrt{\frac{3}{5}}\right),$$

a čvorovi integracije su

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Ovaj jednostavni primjer nam je samo ilustrirao način rada. Često možemo na analitički način doći do rezultata i kada se radi o nekim specijalnim težinama, pa se mnogi rezultati nalaze kao već gotovi u standardnim priručnicima (vidi tablicu na početku sekcije). Ipak, za velike n poželjno je doći i do nekih dodatnih informacija o ortogonalnim polinomima, no mi ovdje nećemo ulaziti u to.

Na kraju napomenimo da nije moguće odabrati čvorove integracije i težinske koeficijente tako da dobivena Gaussova kvadratura formula s n čvorova bude egzaktna na polinomima stupnja $2n$. Naime, definiramo li polinom P_{2n} s

$$P_{2n}(x) = (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2,$$

gdje su $x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ različiti čvorovi integracije, u najjednostavnijem slučaju $w = 1$ imamo

$$I(f) = \int_a^b P_{2n}(x) dx > 0,$$

dok je

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i P_{2n}(x_i) = 0 \neq I(f).$$