

Sadržaj

1. Numerička integracija	1
1.1. Općenito o integracijskim formulama	1
1.2. Newton–Cotesove formule	3
1.2.1. Trapezna formula	3
1.2.2. Simpsonova formula	9
1.2.3. Produljene formule	14
1.2.4. Primjeri	17
1.2.5. Formula srednje točke (midpoint formula)	20
1.3. Rombergov algoritam	21
1.4. Težinske integracijske formule	30
1.5. Gaussove integracijske formule	33
1.5.1. Gauss–Legendreove integracijske formule	39
1.5.2. Druge Gaussove integracijske formule	50
2. Metode za rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi	58
2.1. Uvod	58
2.2. Runge–Kutta metode	58
2.2.1. Varijabilni korak za Runge–Kutta metode	61
2.2.2. Runge–Kutta metode za sustave jednadžbi	61
2.3. Višekoračne metode	62
2.4. Krute (stiff) diferencijalne jednadžbe	63
3. Rubni problem za obične diferencijalne jednadžbe	64
3.1. Egizstencija i jedinstvenost rješenja	64

3.2.	Metoda gađanja za linearne diferencijalne jednađzbe 2. reda . . .	65
3.3.	Nelinearna metoda gađanja	66
3.4.	Metoda konačnih razlika	66
4.	Rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednađzbi	68
4.1.	Paraboličke PDJ — Provođenje topline	68
4.1.1.	Eksplicitna metoda	68
4.1.2.	Crank–Nicolsonova metoda	69
4.2.	Hiperboličke PDJ — Valna jednađzba	70
4.2.1.	Eksplicitna metoda	70

1. Numerička integracija

1.1. Općenito o integracijskim formulama

Zadana je funkcija $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, gdje je I obično interval (može i beskonačan). Želimo izračunati integral funkcije f na intervalu $[a, b]$,

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx. \quad (1.1.1)$$

Svi znamo da je deriviranje (barem analitički) jednostavan postupak, dok integriranje to nije, pa se integrali analitički u “lijepoj formi” mogu izračunati samo za malen skup funkcija f . Zbog toga, u većini slučajeva ne možemo iskoristiti osnovni teorem integralnog računa, tj. Newton–Leibnitzovu formulu za računanje $I(f)$ preko vrijednosti primitivne funkcije F od f u rubovima intervala

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

Drugim riječima, jedino što nam preostaje je približno, numeričko računanje $I(f)$.

Osnovna ideja numeričke integracije je izračunavanje $I(f)$ korištenjem vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. Recimo odmah da postoje i integracijske formule koje koriste i derivacije funkcije f , ali o tome kako se one dobivaju i čemu služe, bit će više riječi nešto kasnije.

Opća integracijska formula ima oblik

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

pri čemu je $m + 1$ broj korištenih točaka, $I_m(f)$ pripadna aproksimacija integrala, a $E_m(f)$ pritom napravljena greška. Ovakve formule za približnu integraciju funkcija jedne varijable (tj. na jednodimenzionalnoj domeni) često se zovu i **kvadrature** formule, zbog interpretacije integrala kao površine ispod krivulje.

Ako koristimo samo funkcijske vrijednosti za aproksimaciju integrala, onda aproksimacija $I_m(f)$ ima oblik

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^m w_k^{(m)} f(x_k^{(m)}), \quad (1.1.2)$$

pri čemu je m neki unaprijed zadani prirodni broj. Koeficijenti $x_k^{(m)}$ zovu se čvorovi integracije, a $w_k^{(m)}$ težinski koeficijenti.

U općem slučaju, za fiksni m , moramo nekako odrediti $2m + 2$ nepoznatih koeficijenata. Uobičajen način njihovog određivanja je zahtjev da su integracijska formule egzaktna na vektorskom prostoru **polinoma** što višeg stupnja. Zašto baš tako? Ako postoji Taylorov red za funkciju f i ako on konvergira, onda bi to značilo da integracijska formula egzaktno integrira početni komad Taylorovog reda, tj. Taylorov polinom. Drugim riječima, greška bi bila mala, tj. jednaka integralu greške koji nastaje kad iz Taylorovog reda napravimo Taylorov polinom.

Zbog linearnosti integrala kao funkcionala

$$\int (\alpha f(x) + \beta g(x)) dx = \alpha \int f(x) dx + \beta \int g(x) dx, \quad (1.1.3)$$

dovoljno je gledati egzaktnost tih formula na nekoj bazi vektorskog prostora, recimo na

$$\{1, x, x^2, x^3, \dots, x^m, \dots\},$$

jer svojstvo (1.1.3) onda osigurava egzaktnost za sve polinome do najvišeg stupnja baze.

Ako su čvorovi fiksirani, recimo ekvidistantni, onda dobivamo tzv. Newton–Cotesove formule, za koje moramo odrediti $m + 1$ nepoznati koeficijent (težine). Uvjeti egzaktnosti na vektorskom prostoru polinoma tada vode na sustav linearnih jednadžbi. Kasnije ćemo pokazati da se te 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”. Ove posljednje formule zovu se formule Gaussovog tipa. U slučaju Gaussovih formula (ali može se i kod težinskih Newton–Cotesovih formula) uobičajeno je (1.1.1) zapisati u obliku

$$I(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx, \quad (1.1.4)$$

pri čemu je funkcija $w \geq 0$ tzv. težinska funkcija. Ona ima istu ulogu “gustoće” mjere kao i kod metode najmanjih kvadrata. Ideja je “razdvojiti” podintegralnu

funkciju na dva dijela, tako da singulariteti budu uključeni u w . Gaussove se formule nikad ne računaju “direktno” iz uvjeta egzaktnosti, jer to vodi na nelinearni sustav jednažbi. Pokazat ćemo da postoji veza Gaussovih formula, funkcije w i ortogonalnih polinoma obzirom na funkciju w na intervalu $[a, b]$, koja omogućava efikasno računanje svih parametara za Gaussove formule.

Na kraju ovog uvoda spomenimo još da postoje primjene u kojima je korisno tražiti egzaktnost integracijskih formula na drugačijim sustavima funkcija, koji nisu prostori polinoma do određenog stupnja.

1.2. Newton–Cotesove formule

Newton–Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, s tim da je prvi čvor u točki $x_0 := a$, a posljednji u $x_m := b$. Preciznije, za zatvorenu (to se često ispušta) Newton–Cotesovu formulu s $(m + 1)$ -nom točkom čvorovi su

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

Drugim riječima, osnovni je oblik Newton–Cotesovih formula

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_m(f) = \sum_{k=0}^m w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m). \quad (1.2.1)$$

1.2.1. Trapezna formula

Izvedimo najjednostavniju (zatvorenu) Newton–Cotesovu formulu za $m = 1$.

Za $m = 1$, aproksimacija integrala (1.2.1) ima oblik

$$I_1(f) = w_0^{(1)} f(x_0) + w_1^{(1)} f(x_0 + h_1),$$

pri čemu je

$$h := h_1 = \frac{b - a}{1} = b - a,$$

pa je $x_0 = a$ i $x_1 = b$. Da bismo olakšali pisanje, kad znamo da je $m = 1$, možemo izostaviti gornje indekse u $w_k^{(1)}$, tj., radi jednostavnosti, pišemo $w_k := w_k^{(1)}$. Dakle, moramo pronaći težine w_0 i w_1 , tako da integracijska formula egzaktno integrira polinome što višeg stupnja na intervalu $[a, b]$, tj. da za polinome f što višeg stupnja bude

$$\int_a^b f(x) dx = I_1(f) = w_0 f(a) + w_1 f(b).$$

Stavimo, redom, uvjete na bazu vektorskog prostora polinoma. Ako je f neki od polinoma baze vektorskog prostora, morat ćemo izračunati njegov integral. Zbog toga je zgodno odmah izračunati integrale oblika

$$\int_a^b x^k dx, \quad k \geq 0,$$

a zatim rezultat koristiti za razne k . Vrijedi

$$\int_a^b x^k dx = \frac{x^{k+1}}{k+1} \Big|_a^b = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}. \quad (1.2.2)$$

Za $f(x) = 1 = x^0$ dobivamo

$$b - a = \int_a^b x^0 dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1.$$

Odmah je očito da iz jedne jednadžbe ne možemo odrediti dva nepoznata parametra, pa moramo zahtijevati da integracijska formula bude egzaktna i na polinomima stupnja 1.

Za $f(x) = x$ izlazi

$$\frac{b^2 - a^2}{2} = \int_a^b x dx = w_0 \cdot a + w_1 \cdot b.$$

Sada imamo dvije jednadžbe s dvije nepoznanice

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 &= b - a \\ aw_0 + bw_1 &= \frac{b^2 - a^2}{2}. \end{aligned}$$

Pomnožimo li prvu jednadžbu s $-a$ i dodamo drugoj, dobivamo

$$(b - a)w_1 = \frac{b^2 - a^2}{2} - a(b - a) = \frac{b^2 - 2ab + a^2}{2} = \frac{(b - a)^2}{2}.$$

Budući da je $a \neq b$, dijeljenjem s $b - a$, dobivamo

$$w_1 = \frac{1}{2}(b - a) = \frac{h}{2}.$$

Drugu težinu w_0 lako izračunamo iz prve jednadžbe linearnog sustava

$$w_0 = b - a - w_1 = \frac{1}{2}(b - a) = \frac{h}{2},$$

pa je $w_0 = w_1$.

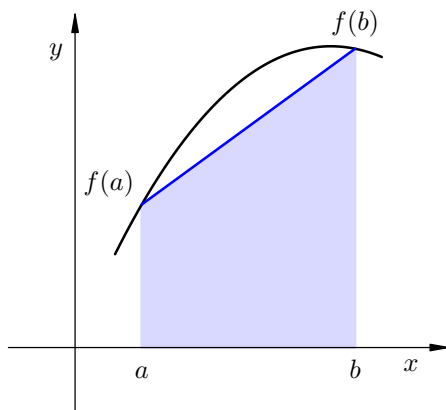
Vidimo da je integracijska formula $I_1(f)$ dobivena iz egzaktnosti na svim polinomima stupnja manjeg ili jednakog 1, i glasi

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(a) + f(b)).$$

Ta formula zove se trapezna formula. Odakle joj ime? Napišemo li je na malo drugačiji način, kao

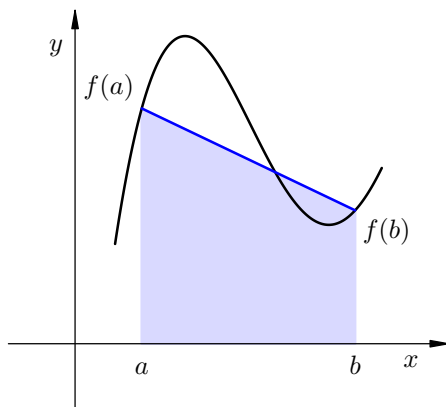
$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{f(a) + f(b)}{2} (b - a),$$

odmah ćemo vidjeti da je $(f(a) + f(b))/2$ srednjica, a $b - a$ visina trapeza sa slike.



Drugim riječima, površinu ispod krivulje zamijenili smo (tj. aproksimirali) površinom trapeza.

Koliko je ta zamjena dobra? Ovisi o funkciji f . Sve dok pravac razumno aproksimira oblik funkciju f , greška je mala. Na primjer, za funkciju



pravac nije dobra aproksimacija za oblik funkcije f . Da smo nacrtali funkciju f “simetričnije” oko sjecišta, moglo bi se dogoditi da je greška vrlo mala, jer bi se ono što je previše uračunato u površinu s jedne strane “skratilo” s onim što je premalo uračunato s druge strane. S numeričkog stanovišta, takav pristup je opasan.

Trapezna integracijska formula neće egzaktno integrirati sve polinome stupnja 2. To nije teško pokazati, jer već za

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

vrijedi

$$\frac{b^3 - a^3}{3} = \int_a^b x^2 dx \neq I_1(x^2) = \frac{a^2 + b^2}{2} (b - a).$$

Slika nas upućuje na još jednu činjenicu. Povučemo li kroz $(a, f(a))$, $(b, f(b))$ linearni interpolacijski polinom, a zatim ga egzaktno integriramo od a do b , dobivamo trapeznu formulu. Pokažimo da je to tako.

Interpolacijski polinom stupnja 1 koji prolazi kroz zadane točke je

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

Njegov integral na $[a, b]$ je

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

Ovaj nam pristup omogućava i ocjenu greške integracijska formule, preko ocjene greške interpolacijskog polinoma, uz uvjet da možemo ocijeniti grešku interpolacijskog polinoma (tj. ako f ima dovoljan broj neprekidnih derivacija).

Neka je funkcija $f \in C^2[a, b]$. Greška interpolacijskog polinoma stupnja 1 koji funkciju f interpolira u točkama $(a, f(a))$, $(b, f(b))$ na intervalu $[a, b]$ jednaka je

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

Drugim riječima, vrijedi

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

Ostaje samo izračunati $E_1(f)$. Iskoristit ćemo generalizaciju teorema srednje vrijednosti za integrale. Ako su funkcije g i w integrabilne na $[a, b]$ i ako je $w(x) \geq 0$ na $[a, b]$, a

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

onda vrijedi

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

Prethodna formula lako se dokazuje, jer je

$$m \leq g(x) \leq M \implies mw(x) \leq g(x)w(x) \leq Mw(x),$$

pa je

$$m \int_a^b w(x) dx \leq \int_a^b w(x)g(x) dx \leq M \int_a^b w(x) dx. \quad (1.2.3)$$

Digresija za nematematičare. \inf (čitati infimum) je minimum funkcije koji se ne mora dostići. Na primjer, funkcija

$$g(x) = x \quad \text{na} \quad (0, 1) \quad (1.2.4)$$

nema minimum, ali je

$$\inf_{x \in (0, 1)} x = 0.$$

Slično vrijedi i za \sup (čitati supremum). Supremum je maksimum funkcije koji se ne mora dostići. Na primjer, funkcija iz relacije (1.2.4) nema ni maksimum, ali je

$$\sup_{x \in (0, 1)} x = 1.$$



Korištenjem relacije (1.2.3), lako dokazujemo integralni teorem srednje vrijednosti s težinama.

Teorem 1.2.1. *Neka su funkcije g i w integrabilne na $[a, b]$ i neka je*

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

Nadalje, neka je $w(x) \geq 0$ na $[a, b]$. Tada postoji broj μ , $m \leq \mu \leq M$ 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 broj ζ takav da je

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

Dokaz:

Ako je

$$\int_a^b w(x) dx = 0,$$

onda je po (1.2.3) i

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

pa za μ možemo uzeti proizvoljan realan broj. Ako je

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

onda dijeljenjem formule (1.2.3) s prethodnim integralom dobivamo

$$m \leq \frac{\int_a^b w(x)g(x) dx}{\int_a^b w(x) dx} \leq M,$$

pa za μ možemo uzeti

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

Posljednji zaključak teorema slijedi iz činjenice da neprekidna funkcija na segmentu postiže sve vrijednosti između minimuma i maksimuma, pa mora postići i μ . Drugim riječima, postoji ζ takav da je $\mu = g(\zeta)$. ■

Prisjetite se, već smo pokazali da je

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

Primijetite da je funkcija

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

pa možemo uzeti

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

Po generaliziranom teoremu srednje vrijednosti, ako je $f \in C^2[a, b]$, (što znači da je $f'' \in C^0[a, b]$), vrijedi da je

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

Ovaj se integral jednostavno računa. Integriranjem dobivamo

$$\int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2} dx = -\frac{(b-a)^3}{12} = -\frac{h^3}{12},$$

pa je

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

1.2.2. Simpsonova formula

Izvedimo sljedeću (zatvorenu) Newton–Cotesovu formulu za $m = 2$, poznatu pod imenom Simpsonova formula.

Za $m = 2$, aproksimacija integrala (1.2.1) ima oblik

$$I_2(f) = w_0^{(2)} f(x_0) + w_1^{(2)} f(x_0 + h_2) + w_2^{(2)} f(x_0 + 2h_2),$$

pri čemu je

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

Ponovno, da bismo olakšali pisanje, kad znamo da je $m = 2$, možemo, radi jednostavnosti, izostaviti gornje indekse u $w_k := w_k^{(2)}$. Oprez, to nisu isti w_k i h kao u trapeznoj formuli! Kad uvrstimo značenje h u aproksimacijsku formulu, dobivamo

$$I_2(f) = w_0 f(a) + w_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + w_2 f(b).$$

Stavimo uvjete na egzaktnost formule na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja. Moramo postaviti najmanje tri jednačbe, jer imamo tri nepoznata koeficijenta. Za $f(x) = 1$ dobivamo

$$b-a = \int_a^b x^0 dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1.$$

Za $f(x) = x$ izlazi

$$\frac{b^2 - a^2}{2} = \int_a^b x \, dx = w_0 \cdot a + w_1 \frac{a+b}{2} + w_2 \cdot b.$$

Konačno, za $f(x) = x^2$ dobivamo

$$\frac{b^3 - a^3}{3} = \int_a^b x^2 \, dx = w_0 \cdot a^2 + w_1 \frac{(a+b)^2}{4} + w_2 \cdot b^2.$$

Sada imamo linearni sustav s tri jednadžbe i tri nepoznanice

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 + w_2 &= b - a \\ aw_0 + \frac{a+b}{2} w_1 + bw_2 &= \frac{b^2 - a^2}{2} \\ a^2w_0 + \frac{(a+b)^2}{4} w_1 + b^2w_2 &= \frac{b^3 - a^3}{3}. \end{aligned}$$

Rješavanjem ovog sustava, dobivamo

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

Drugim riječima, integracijska formula $I_2(f)$ dobivena je iz egzaktnosti na svim polinomima stupnja manjeg ili jednakog 2, i 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 još jednu prednost. Iako je dobivena iz uvjeta egzaktnosti na vektorskom prostoru polinoma stupnja manjeg ili jednakog 2, ona egzaktno integrira i sve polinome stupnja 3. Dovoljno je pokazati da egzaktno integrira

$$f(x) = x^3.$$

Egzaktni integral jednak je

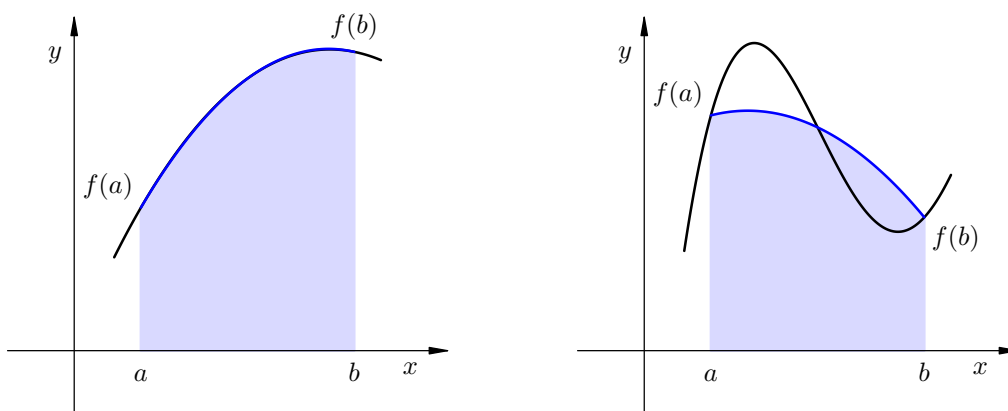
$$\int_a^b x^3 \, dx = \frac{b^4 - a^4}{4},$$

a po Simpsonovoj formuli, za $f(x) = x^3$ dobivamo

$$\begin{aligned} I_2(x^3) &= \frac{b-a}{6} \left(a^3 + 4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3 + b^3 \right) \\ &= \frac{b-a}{4} (a^3 + a^2b + ab^2 + b^3) = \frac{b^4 - a^4}{4}. \end{aligned}$$

Ponovno, nije teško pokazati da je i ova formula interpolacijska. Ako povučemo kvadratni interpolacijski polinom kroz $(a, f(a))$, $(\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$ i $(b, f(b))$, a zatim ga egzaktno integriramo od a do b , dobivamo Simpsonovu formulu.

Ako pogledamo kako ona funkcionira na funkcijama koje smo već integrirali trapeznom formulom, vidjet ćemo da joj je greška bitno manja. Posebno, na prvom primjeru, kvadratni interpolacijski polinom tako dobro aproksimira funkciju f , da se one na grafu ne razlikuju.



Grešku Simpsonove formule računamo slično kao kod trapezne, integracijom greške kvadratnog interpolacijskog polinoma

$$e_2(x) = f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{6} (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b).$$

Dakle, za grešku Simpsonove formule vrijedi

$$E_2(f) = \int_a^b e_2(x) dx.$$

Nažalost, funkcija

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

nije više fiksnog znaka na $[a, b]$, pa ne možemo direktno primijeniti generalizirani teorem srednje vrijednosti. Pretpostavimo da je $f \in C^4[a, b]$. Označimo

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

i definiramo

$$w(x) = \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b) dt.$$

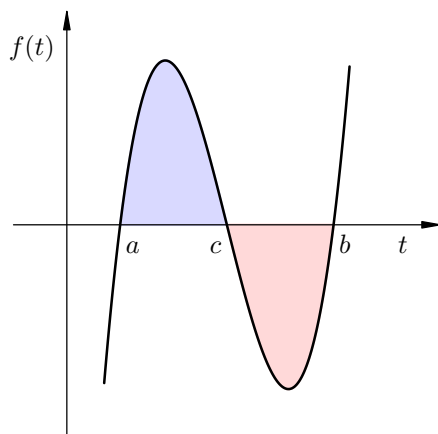
Tvrdimo da vrijedi

$$w(a) = w(b) = 0, \quad w(x) > 0, \quad x \in (a, b). \quad (1.2.5)$$

Skiciramo li funkciju

$$f(t) = (t - a)(t - c)(t - b)$$

odmah vidimo da je ona centralno simetrična oko srednje točke



pa će integral rasti od 0 do svog maksimuma (plava površina), a zatim padati (kad dođe u crveno područje) do 0.

Ostaje samo još napisati grešku interpolacijskog polinoma kao podijeljenu razliku. To smo pokazali općenito u poglavlju o Newtonovom interpolacijskom polinomu, a posebno za $n = 3$ vrijedi

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

Uz oznaku (1.2.5), grešku Simpsonove formule, onda možemo napisati kao

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

Parcijalnom integracijom ovog integrala 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 0, jer je $w(a) = w(b) = 0$. Ostaje još “srediti” drugi član. Kod splajnova smo objašnjavali da je podijeljena razlika s dvostrukim čvorom jednaka derivaciji funkcije. Na sličan je način derivacija treće podijeljene razlike

$f[a, b, c, x]$ po x , četvrta podijeljena razlika s dvostrukim čvorom x . Prema tome, dobivamo formulu greške u obliku

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

Sad je funkcija w nenegativna i možemo primijeniti generalizirani teorem srednje vrijednosti. Izlazi

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

gdje je $a \leq \eta \leq b$. Napišemo li $f[a, b, c, \eta, \eta]$ kao derivaciju, dobivamo

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

Ostaje još samo integrirati funkciju w . Vrijedi

$$\begin{aligned} w(x) &= \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b) dt = \text{zamjena varijable } y = t-c \\ &= \int_{-h}^{x-c} (y-h)y(y+h) dy = \int_{-h}^{x-c} (y^3 - h^2y) dy \\ &= \left(\frac{y^4}{4} - h^2 \frac{y^2}{2} \right) \Big|_{-h}^{x-c} = \frac{(x-c)^4}{4} - h^2 \frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4}. \end{aligned}$$

Nadalje je

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) dx &= \int_a^b \left(\frac{(x-c)^4}{4} - h^2 \frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4} \right) dx = \text{zamjena varijable } y = x-c \\ &= \int_{-h}^h \left(\frac{y^4}{4} - h^2 \frac{y^2}{2} + \frac{h^4}{4} \right) dy = \left(\frac{y^5}{20} - h^2 \frac{y^3}{6} + \frac{h^4 y}{4} \right) \Big|_{-h}^h \\ &= 2 \left(\frac{h^5}{20} - \frac{h^5}{6} + \frac{h^5}{4} \right) = \frac{4}{15} h^5. \end{aligned}$$

Kad to uključimo u formulu za grešku, dobivamo

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\zeta)}{24} \cdot \frac{4}{15} h^5 = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\zeta).$$

Primijetite, greška je za red veličine bolja no što bi po upotrijebljenom interpolacijskom polinomu trebala biti.

1.2.3. Produljene formule

Nije teško pokazati da su sve Newton–Cotesove formule integrali interpolacijskih polinoma na ekvidistantnoj mreži. Ako ne valja dizanje stupnjeva interpolacijskih polinoma na ekvidistantnoj mreži, onda neće biti dobri niti njihovi integrali.

Pokažimo to na primjeru Runge. Prava vrijednost integrala je

$$\int_{-5}^5 \frac{dx}{1+x^2} = 2 \operatorname{arctg} 5 \approx 2.74680153389003172.$$

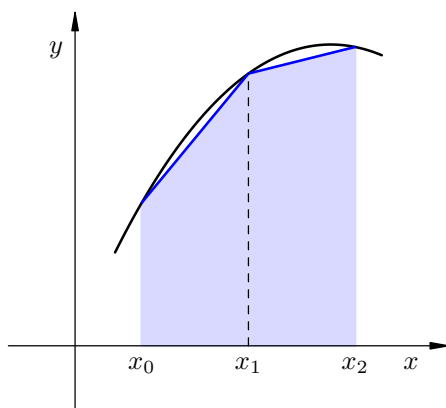
Sljedeća tablica pokazuje aproksimacije integrala izračunate Newton–Cotesovim formulama raznih redova i pripadne greške.

Red formule m	Aproksimacija integrala	Greška
1	0.38461538461538462	2.36218614927464711
2	6.79487179487179487	-4.04807026098176315
3	2.08144796380090498	0.66535357008912674
4	2.37400530503978780	0.37279622885024392
5	2.30769230769230769	0.43910922619772403
6	3.87044867347079978	-1.12364713958076805
7	2.89899440974837875	-0.15219287585834703
8	1.50048890712791179	1.24631262676211993
9	2.39861789784183472	0.34818363604819700
10	4.67330055565349876	-1.92649902176346704
11	3.24477294027858525	-0.49797140638855353
12	-0.31293651575343889	3.05973804964347061
13	1.91979721683238891	0.82700431705764282
14	7.89954464085193082	-5.15274310696189909
15	4.15555899270655713	-1.40875745881652541
16	-6.24143731477308329	8.98823884866311501
17	0.26050944143760372	2.48629209245242800
18	18.87662129010920670	-16.12981975621917490
19	7.24602608588196936	-4.49922455199193763
20	-26.84955208882447960	29.59635362271451140

Očito je da aproksimacije **ne** konvergiraju prema pravoj vrijednosti integrala. Potpunije opravdanje ovog ponašanja dajemo nešto kasnije.

I što sad? Ne smijemo dizati red formula, jer to postaje opasno. Rješenje je vrlo slično onome što smo primijenili kod interpolacije. Umjesto da dižemo red

formule, podijelimo interval $[a, b]$ na više dijelova, recimo, jednake duljine, i na svakom od njih primijenimo odgovarajuću integracijsku formulu niskog reda. Tako dobivene formule zovu se **produljene** formule. Na primjer, za funkciju koju smo već razmatrali, produljena trapezna formula s 2 podintervala izgledala bi ovako.



Općenito, produljenu trapeznu formulu dobivamo tako da cijeli interval $[a, b]$ podijelimo na n podintervala oblika $[x_{k-1}, x_k]$, za $k = 1, \dots, n$, s tim da je

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

i na svakom od njih upotrijebimo “običnu” trapeznu formulu. Znamo da je tada

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

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

Najjednostavniji je slučaj kad su točke x_k ekvidistantne, tj. kad 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

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

pri čemu je $E_n^T(f)$ greška produljene formule. Nju možemo zapisati kao zbroj grešaka osnovnih trapeznih formula na podintervalima

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

Greška ovako napisana nije naročito lijepa i korisna, pa ju je potrebno napisati malo drugačije

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

Izraz u zagradi je aritmetička sredina vrijednosti drugih derivacija u točkama ζ_k . Taj se broj sigurno nalazi između najmanje i najveće vrijednosti druge derivacije funkcije f na intervalu $[a, b]$. Budući da je f'' neprekidna na $[a, b]$, onda je broj u zagradi vrijednost druge derivacije u nekoj točki $\xi \in [a, b]$, pa formulu za grešku možemo pisati kao

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

Iz ove formule izvodimo važnu ocjenu za broj podintervala potrebnih da se postigne zadana točnost za produljenu trapeznu metodu

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{(b-a)h^2}{12} M_2 = \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2, \quad M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|.$$

Želimo li da je $|E_n^T(f)| \leq \varepsilon$, onda je dovoljno tražiti da bude

$$\frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2 \leq \varepsilon,$$

odnosno da je

$$n \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M_2}{12\varepsilon}}, \quad n \text{ cijeli broj.}$$

Na sličan se način izvodi i produljena Simpsonova formula. Primijetite, osnovna Simpsonova formula ima 3 točke, tj. 2 podintervala, pa produljena formula mora imati, također, paran broj podintervala. Pretpostavimo stoga da je n paran broj. Ograničimo se samo na ekvidistantni slučaj. Onda je ponovno

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

Apksimaciju integrala produljenom Simpsonovom formulom dobivamo iz

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^{n/2} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x) dx,$$

tako da na svakom podintervalu $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, duljine $2h$, primijenimo običnu Simpsonovu formulu, za $k = 1, \dots, n/2$. Zbrajanjem izlazi

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 4f_{n-1} + f_n \right) + E_n^S(f),$$

pri čemu je $E_n^S(f)$ greška produljene formule. Nju možemo zapisati kao zbroj grešaka osnovnih Simpsonovih formula na podintervalima

$$E_n^S(f) = \sum_{k=1}^{n/2} -f^{(4)}(\zeta_k) \frac{h^5}{90}.$$

Opet je grešku korisno napisati malo drugačije

$$E_n^S(f) = -\frac{h^5(n/2)}{90} \left(\frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(4)}(\zeta_k) \right).$$

Sličnim zaključivanjem kao kod trapezne formule, izraz u zagradi možemo zamijeniti s $f^{(4)}(\xi)$, $\xi \in [a, b]$, pa dobivamo

$$E_n^S(f) = -\frac{h^5 n}{180} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi).$$

Ponovno, iz ove formule izvodimo ocjenu za broj podintervala potrebnih da se postigne zadana točnost za Simpsonovu metodu

$$|E_n^S(f)| \leq \frac{(b-a)h^4}{180} M_4 = \frac{(b-a)^5}{180n^4} M_4, \quad M_4 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Želimo li da je $|E_n^S(f)| \leq \varepsilon$, onda je dovoljno tražiti da bude

$$\frac{(b-a)^5}{180n^4} M_4 \leq \varepsilon,$$

odnosno da je

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{180\varepsilon}}, \quad n \text{ paran cijeli broj.}$$

1.2.4. Primjeri

Primjer 1.2.1. *Izračunajte vrijednost integrala*

$$\int_1^2 x e^{-x} dx$$

korištenjem (produljene) Simpsonove formule tako da greška bude manja ili jednaka 10^{-6} . Nađite pravu vrijednost integrala i pogreške. Koliko je podintervala potrebno za istu točnost korištenjem (produljene) trapezne formule?

Prvo, moramo ocijeniti pogrešku za produljenu trapeznu i produljenu Simpsonovu formulu. Za to su nam potrebni maksimumi apsolutnih vrijednosti druge i četvrte derivacije na zadanom intervalu. Derivacije su redom

$$\begin{aligned} f^{(1)}(x) &= (1-x)e^{-x}, & f^{(2)}(x) &= (x-2)e^{-x}, & f^{(3)}(x) &= (3-x)e^{-x}, \\ f^{(4)}(x) &= (x-4)e^{-x}, & f^{(5)}(x) &= (5-x)e^{-x}. \end{aligned}$$

Nađimo maksimume apsolutnih vrijednosti derivacija na zadanom intervalu.

Prvo ocijenimo grešku za produljenu trapeznu formulu. Na intervalu $[1, 2]$ je $f^{(3)}(x) > 0$, što znači da $f^{(2)}$ raste. Uočimo još da je na zadanom intervalu $f^{(2)}(x) \leq 0$, pa je maksimum apsolutne vrijednosti druge derivacije u lijevom rubu, tj.

$$M_2 = \max_{x \in [1, 2]} |f^{(2)}(x)| = |f^{(2)}(1)| = e^{-1} \approx 0.367879441171.$$

Broj podintervala n_T za produljenu trapeznu formulu je

$$n_T \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M_2}{12\varepsilon}} = \sqrt{\frac{e^{-1}}{12 \cdot 10^{-6}}} \approx 175.09,$$

pa je najmanji broj podintervala $n_T = 176$.

Sada ocijenimo grešku za produljenu Simpsonovu formulu. Na intervalu $[1, 2]$ je $f^{(5)}(x) > 0$, što znači da $f^{(4)}$ raste. Također je i $f^{(4)}(x) < 0$, što znači da je njen maksimum po apsolutnoj vrijednosti ponovno u lijevom rubu, tj.

$$M_4 = \max_{x \in [1, 2]} |f^{(4)}(x)| = |f^{(4)}(1)| = 3 \cdot e^{-1} \approx 1.103638323514.$$

Za grešku produljene Simpsonove formule imamo

$$n_S \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{180\varepsilon}} = \sqrt[4]{\frac{3 \cdot e^{-1}}{180 \cdot 10^{-6}}} \approx 8.85,$$

tj. treba najmanje $n_S = 10$ podintervala.

Sad možemo upotrijebiti produljenu Simpsonovu formulu s 10 podintervala (11

čvorova). Imamo

k	x_k	$f(x_k)$
0	1.0	0.3678794412
1	1.1	0.3661581921
2	1.2	0.3614330543
3	1.3	0.3542913309
4	1.4	0.3452357495
5	1.5	0.3346952402
6	1.6	0.3230344288
7	1.7	0.3105619909
8	1.8	0.2975379988
9	1.9	0.2841803765
10	2.0	0.2706705665

Sada je

$$S_0 = f(x_0) + f(x_{10}) = 0.63855000765,$$

$$S_1 = 4(f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7) + f(x_9)) = 6.5995485226,$$

$$S_2 = 2(f(x_2) + f(x_4) + f(x_6) + f(x_8)) = 2.6544824628.$$

Vrijednost integrala po Simpsonovoj formuli je

$$I_s = \frac{0.1}{3}(S_0 + S_1 + S_2) = 0.3297526998.$$

U ovom konkretnom slučaju možemo bez puno napora izračunati i egzaktnu vrijednost integrala. Jedina korist od toga je da vidimo koliko je zaista ocjena za Simpsonovu metodu bliska sa stvarnom greškom. Parcijalna integracija daje

$$\begin{aligned} \int_1^2 xe^{-x} dx &= \left\{ \begin{array}{l} u = x, \quad du = dx \\ dv = e^{-x} dx, \quad v = -e^{-x} \end{array} \right\} = -xe^{-x} \Big|_1^2 + \int_1^2 e^{-x} dx \\ &= e^{-1} - 2e^{-2} - e^{-x} \Big|_1^2 = e^{-1} - 2e^{-2} - e^{-2} + e^{-1} \\ &= 2e^{-1} - 3e^{-2} \approx 0.3297530326. \end{aligned}$$

Drugim riječima, prava pogreška je

$$I - I_s = 0.3297530326 - 0.3297526998 = 3.328 \cdot 10^{-7},$$

tj. ocjena greške nije daleko od prave pogreške.

1.2.5. Formula srednje točke (midpoint formula)

Ako u Newton–Cotesovim formulama ne interpoliramo (pa onda niti ne integriramo) jednu ili obje rubne točke, dobili smo otvorene Newton–Cotesove formule. Ako definiramo $x_{-1} := a$, $x_{m+1} := b$ i

$$h_m = \frac{b-a}{m+2},$$

onda otvorene Newton–Cotesove formule imaju oblik

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_m(f) = \sum_{k=0}^m w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m). \quad (1.2.6)$$

Vjerojatno najkorištenija i najpoznatija otvorena Newton–Cotesova formula je ona najjednostavnija za $m = 0$, poznata pod imenom “midpoint formula” (formula srednje točke).

Dakle za bismo odredili midpoint formulu, moramo naći koeficijent $w_0 := w_0^{(0)}$ takav da je

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

egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja.

Za $f(x) = 1$, imamo

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

odakle odmah slijedi da je

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

Greška te integracijske formule je integral greške interpolacijskog polinoma stupnja 0 (konstante), koji interpolira funkciju f u srednjoj točki. Ako definiramo

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

onda koristeći istu tehniku kao kod izvoda greške za Simpsonovu formulu, izlazi da je greška midpoint formule

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

Da bismo izveli produljenu formulu, podijelimo interval $[a, b]$ na n podintervala i na svakom upotrijebimo midpoint formulu. Tada vrijedi

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

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

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

1.3. Rombergov algoritam

Pri izvodu Rombergovog algoritma koristimo se sljedećim principima:

- udvostručavanjem broja podintervala u produljenoj trapeznoj metodi,
- eliminacijom člana greške iz dvije susjedne produljene formule. Ponovljena primjena ovog principa zove se Richardsonova ekstrapolacija.

Asimptotski razvoj ocjene pogreške za trapeznu integraciju daje Euler–MacLaurinova formula.

Teorem 1.3.1. *Neka je $m \geq 0$, $n \geq 1$, m, n cijeli brojevi. Definiramo ekvidistantnu mrežu s n podintervala na $[a, b]$, tj.*

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

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

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

gdje su koeficijenti

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

a ostatak je

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

Ovdje su B_{2i} Bernoullijevi brojevi,

$$B_i = - \int_0^1 B_i(x) dx, \quad i \geq 1,$$

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

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

Ovo je jedan od klasičnih teorema numeričke analize i njegov se dokaz može naći u mnogim knjigama.

Umjesto dokaza, nekoliko objašnjenja. Bernoullijevi polinomi zadani su implicitno funkcijom izvodnicom

$$\frac{t(e^{xt} - 1)}{e^t - 1} = \sum_{i=0}^{\infty} B_i(x) \frac{t^i}{i!}.$$

Prvih nekoliko Bernoullijevih polinoma su:

$$\begin{aligned} B_0(x) &= 0 & B_1(x) &= x & B_2(x) &= x^2 - x \\ B_3(x) &= x^3 - \frac{3x^2}{2} + \frac{x}{2} & B_4(x) &= x^2(1-x)^2. \end{aligned}$$

Uvijek vrijedi $B_i(0) = 0$ za $i \geq 0$. Rekurzivne relacije su

$$B'_i(x) = \begin{cases} iB_{i-1}(x), & \text{za } i \text{ paran i } i \geq 4, \\ i(B_{i-1}(x) + B_{i-1}), & \text{za } i \text{ neparan i } i \geq 3. \end{cases}$$

Iz prethodne se formule integracijom mogu dobiti $B_i(x)$, jer je slobodni član jednak 0.

Bernoullijevi brojevi također su definirani implicitno

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{i=0}^{\infty} B_i \frac{t^i}{i!},$$

odakle se integracijom na $[0, 1]$ po x u rekurziji za $B_i(x)$ dobiva

$$B_i = - \int_0^1 B_i(x) dx, \quad i \geq 1.$$

Prvih nekoliko Bernoullijevih brojeva:

$$\begin{aligned} B_0 &= 1, & B_1 &= -\frac{1}{2}, & B_2 &= \frac{1}{6}, & B_4 &= -\frac{1}{30}, & B_6 &= \frac{1}{42}, \\ B_8 &= -\frac{1}{30}, & B_{10} &= \frac{5}{66}, & B_{12} &= -\frac{691}{2730}, & B_{14} &= \frac{7}{6}, & B_{16} &= -\frac{3617}{510} \end{aligned}$$

i dalje vrlo brzo rastu po apsolutnoj vrijednosti

$$B_{60} \approx -2.139994926 \cdot 10^{34}.$$

Napomena 1.3.1. U literaturi se može naći i malo drugačija definicija Bernoullijevih polinoma, označimo ih s $B_i^*(x)$. Oni su zadani implicitno funkcijom izvodnicom

$$\frac{te^{xt}}{e^t - 1} = \sum_{i=0}^{\infty} B_i^*(x) \frac{t^i}{i!}.$$

Veza između jednih i drugih Bernoullijevih polinoma je $B_i^*(x) = B_i(x) + B_i$, za $i \geq 0$.

Rombergov algoritam dobivamo tako da eliminiramo član po član iz reda za ocjenu greške na osnovu vrijednosti integrala s duljinom koraka h i $h/2$.

Za podintegralne funkcije koje nisu dovoljno glatke, također, se može (uz blage pretpostavke) asimptotski dobiti razvoj pogreške. Posebno to vrijedi za funkcije s algebarskim (x^α) i/ili logaritamskim ($\ln x$) singularitetima.

Izvedimo sad Rombergov algoritam. Označimo s $I_n^{(0)}$ trapeznu formulu s duljinom intervala $h = (b - a)/n$. Iz Euler–MacLaurinove formule, ako je n paran, za asimptotski razvoj greške imamo

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

Ako prvi razvoj pomnožimo s 4 i oduzmemo mu drugi razvoj, skratit će se prva greška s desne strane $d_2^{(0)}$, tj. dobit ćemo

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

Izlučivanjem 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 možemo uzeti kao bolju, popravljenu aproksimaciju integrala, u oznaci

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

Niz $I_n^{(2)}, I_n^{(4)}, I_n^{(6)}$ je novi integracijski niz. Njegova je greška

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

gdje je

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

Nađimo eksplicitnu formulu za $I_n^{(1)}$. Zbog podjele na odgovarajući broj podintervala, ako je h duljina podintervala za $I_n^{(0)}$, onda je $h_1 := 2h$ duljina podintervala za $I_{n/2}^{(0)}$, pa vrijede sljedeće formule

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

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

Uvrštavanjem u $I_n^{(1)}$, dobivamo

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

$$= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_2 + 2f_4 + \cdots + 4f_{n-2} + f_n),$$

što je Simpsonova formula s n podintervala.

Sličan argument kao i prije možemo upotrijebiti i dalje. Vrijedi

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

Tada je

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

odnosno

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

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

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

Induktivno, ako nastavimo postupak, dobivamo Richardsonovu ekstrapolaciju

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

pri čemu je greška jednaka

$$E_n^{(k)} = I - I_n^{(k)} = \frac{d_{2^{k+2}}^{(k)}}{n^{2^{k+2}}} + \cdots = \beta_k(b-a)h^{2^{k+2}}f^{(2^{k+2})}(\xi), \quad a \leq \xi \leq b.$$

Sada možemo definirati Rombergovu tablicu

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

Ako pogledamo omjere grešaka članova u stupcu, uz pretpostavku dovoljne glatkoće, onda dobivamo

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

tj. omjeri pogrešaka u stupcu se moraju ponašati kao

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

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

Primjer 1.3.1. Rombergovim algoritmom s točnošću 10^{-12} nađite vrijednosti integrala

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

i pokažite kako se ponašaju omjeri pogrešaka u stupcima.

Pogledajmo redom funkcije. Eksponencijalna funkcija ima beskonačno mnogo neprekidnih derivacija, pa bi se računanje integrala morala ponašati po predviđanju. Kao vrijednost, nakon 2^5 podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo umjesto prave vrijednosti integrala I , približnu vrijednost

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

Pokažimo omjere pogrešaka u stupcima,

```

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

```

a zatim samo eksponente omjera pogrešaka (eksponenti od 2, koji bi ako je funkcija glatka morali biti $2k + 2$).

```

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

```

Što je s drugom funkcijom? Funkciji $f(x) = x^{3/2}$ puca druga derivacija u 0, pa bi zanimljivo ponašanje moralo početi veću drugom stupcu (za trapez je funkcija dovoljno glatka za ocjenu pogreške). Kao vrijednost, nakon 2^{15} podintervala u trapeznoj formuli, dobivamo umjesto prave vrijednosti integrala I , približnu vrijednost

$$I_{15} = 0.400000000000004512$$

$$I = 2/5 = 0.400000000000000000$$

$$I - I_{15} = -0.000000000000004512.$$

Primijetite da je broj intervala poprilično velik! 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
5 3.9381 5.6484 5.6568 5.6568 5.6569 1.0000
6 3.9567 5.6539 5.6568 5.6569 ... 5.6569 1.0000
⋮ ⋮ ⋮ ⋮ ⋮ ⋮
15 3.9981 5.6569 ... 5.6569 1.0000

```

Primjećujemo da su se nakon prvog stupca omjeri pogrešaka stabilizirali. Bit će nam mnogo lakše provjeriti što se događa ako napišemo samo eksponente 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		
5	1.9775	2.4978	2.5000	2.5000	2.5000	1.0000	
6	1.9843	2.4992	2.5000	2.5000	2.5000	2.5000	1.0000
⋮	⋮	⋮				⋮	⋮
15	1.9993	2.5000	⋯			⋯	2.5000 1.0000

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

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 (što je ograničenje zbog veličine polja u programu), ne dobivamo željenu točnost

$$I_{15} = 0.66666665510837633$$

$$I = 2/3 = 0.66666666666666667$$

$$I - I_{15} = 0.00000001155829033.$$

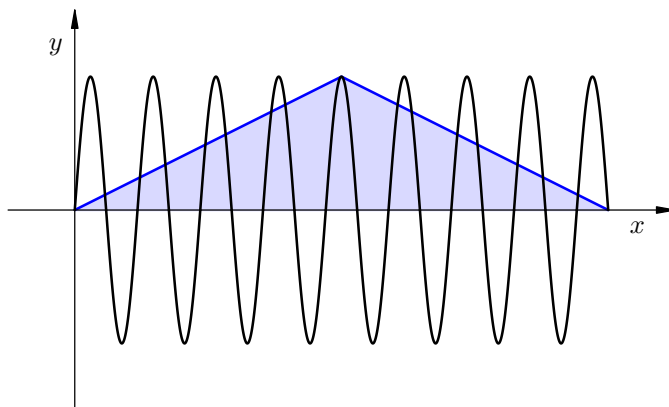
Omjeri pogrešaka u tablici su:

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		
5	2.7854	2.8284	⋯	⋯	2.8284	1.0000	
⋮	⋮	⋮				⋮	⋮
15	2.8271	2.8284	⋯			⋯	2.8284 1.0000

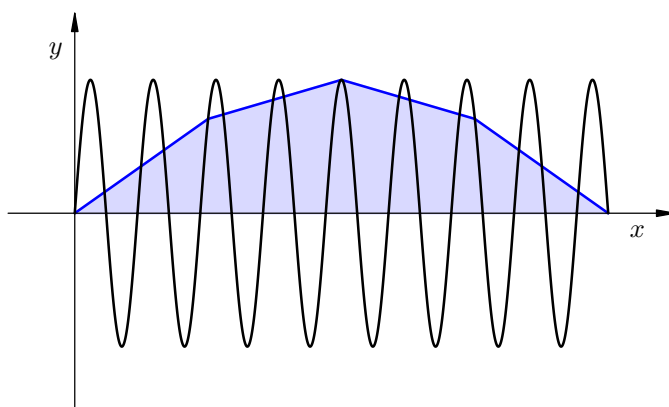
Pripadni eksponenti su

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		
5	1.4779	1.5000	⋯	⋯	1.5000	1.0000	
⋮	⋮	⋮				⋮	⋮
15	1.4993	1.5000	⋯			⋯	1.5000 1.0000

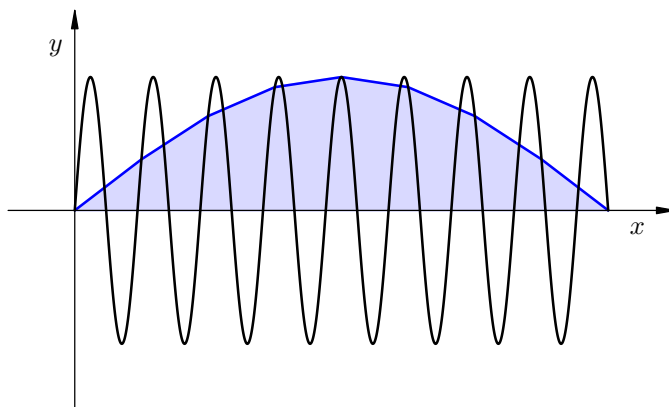
Što je razlog stabilizacije oko jedne, pa oko druge vrijednosti? Nedovoljan broj podintervala u trapezu, koji ne opisuju dobro ponašanje funkcije.



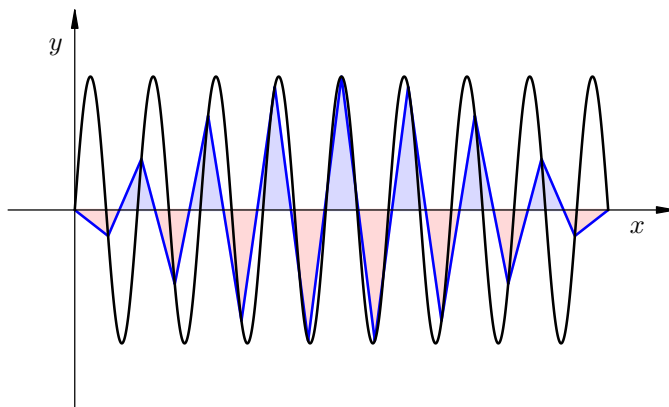
Produljena trapezna formula s 2 podintervala.



Produljena trapezna formula s 4 podintervala.



Produljena trapezna formula s 8 podintervala.



Produljena trapezna formula sa 16 podintervala.

1.4. Težinske integracijske formule

Dosad smo detaljno analizirali samo nekoliko osnovnih Newton–Cotesovih integracijskih formula s malim brojem točaka i pripadne produljene formule. U ovom odjeljku napraviti ćemo opću konstrukciju i analizu točnosti za neke klase integracijskih formula, uključujući opće Newton–Cotesove i Gaussove formule.

Želimo (približno) izračunati vrijednost integrala

$$I_w(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx, \quad (1.4.1)$$

gdje je w pozitivna (ili barem nenegativna) “težinska” funkcija za koju pretpostavljamo da je integrabilna na (a, b) , s tim da dozvoljavamo da w nije definirana u rubovima a i b . Interval integracije može biti konačan, ali 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. Katkad koristimo i skraćenu oznaku $I(f)$, umjesto $I_w(f)$, za integral u (1.4.1), ako je $w(x) = 1$ na cijelom $[a, b]$, ili kad je težinska funkcija jasna iz konteksta, da skratimo pisanje.

Kao i ranije, ovaj integral aproksimiramo “težinskom” sumom funkcijskih vrijednosti funkcije f na konačnom skupu točaka. Za razliku od ranijih oznaka, ovdje je zgodnije točke numerirati od 1, a ne od 0. Dakle, opća težinska integracijska ili kvadratura formula za aproksimaciju integrala $I_w(f)$ ima oblik

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n w_k^{(n)} f(x_k^{(n)}), \quad (1.4.2)$$

gdje je n prirodni broj. Kao i prije, gornje indekse (n) za čvorove i težine često ne pišemo, ako su očiti iz konteksta, ali ne treba zaboraviti na ovisnost o n .

Dakle, sasvim općenito možemo pisati

$$I_w(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx = I_n(f) + E_n(f), \quad (1.4.3)$$

gdje je $E_n(f)$ greška aproksimacije.

Osnovnu podlogu za konstrukciju integracijskih formula i ocjenu greške $E_n(f)$ daje sljedeći rezultat.

Teorem 1.4.1. *Ako je $I_w(f)$ iz (1.4.1) Riemannov integral, i ako je \hat{f} bilo koja druga funkcija za koju postoji $I_w(\hat{f})$, onda vrijedi ocjena*

$$|I_w(f) - I_w(\hat{f})| \leq \|w\|_1 \|f - \hat{f}\|_\infty, \quad (1.4.4)$$

i postoji funkcija \hat{f} za koju se ova ocjena dostiže.

Dokaz:

Prvo uočimo da w ne mora biti nenegativna, jer je riječ o Riemannovom integralu, ali zato treba pretpostaviti da je $|w|$ integrabilna.

Ocjena izlazi direktno iz osnovnih svojstava Riemannovog integrala jer podintegralne funkcije moraju biti ograničene. Dobivamo

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

Iskoristimo ocjenu

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

i definiciju L_1 norme funkcije w (koja je apsolutno integrabilna po pretpostavci)

$$\|w\|_1 = \int_a^b |w(x)| dx,$$

pa dobivamo traženu ocjenu. Ako za perturbiranu funkciju \hat{f} uzmemo

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

gdje je $c > 0$ bilo koja konstanta, onda u ocjeni (1.4.4) dobivamo jednakost, uz $\|f - \hat{f}\|_\infty = c$. ■

U ovoj formulaciji, za klasični Riemannov integral, domena $[a, b]$ integracije mora biti konačna. Teorem onda kaže da je apsolutni broj uvjetovanosti za $I_w(f)$ upravo jednak $\|w\|_1$ i ne ovisi o f , već samo o I_w .

Ovaj rezultat može se proširiti i na nepravne Riemannove integrale (beskonačna domena, singulariteti funkcija), i tada više ne vrijedi zaključak o broju uvjetovanosti. Međutim, trenutno nam to nije bitno, već je ključna malo drugačija interpretacija ocjene (1.4.4).

Zamislimo da je \hat{f} neka aproksimacija (a ne perturbacija) funkcije f , koju želimo iskoristiti za približno računanje integrala. Onda (1.4.4) daje ocjenu (apsolutne) pogreške u integralu, preko greške aproksimacije funkcije u uniformnoj (L_∞) normi na $[a, b]$.

Ono što stvarno želimo dobiti je **niz** aproksimacija integrala koji konvergira prema $I_w(f)$. Jedan od puteva da to postignemo je izbor odgovarajućeg niza aproksimacija \hat{f}_n , $n \in \mathbb{N}$, za funkciju f . Prethodna ocjena upućuje na to da, u ovisnosti o n , za aproksimacijske funkcije \hat{f}_n treba uzimati takve funkcije za koje znamo da možemo postići po volji dobru **uniformnu** aproksimaciju funkcije f , jer tada

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

Uočimo da ove aproksimacije, naravno, ovise o konkretnoj funkciji f . Da ne bismo za svaki novi f posebno konstruirali odgovarajući niz aproksimacija, poželjno je da bilo koju funkciju f , za koju postoji integral $I_w(f)$, možemo dovoljno dobro aproksimirati nekim prostorom funkcija. Tj. umjesto niza pojedinačnih aproksimacija, koristimo niz vektorskih prostora aproksimacijskih funkcija V_n , a za svaki pojedini f nađemo pripadnu aproksimaciju $\hat{f}_n \in V_n$.

Weierstrašov teorem o uniformnoj aproksimaciji neprekidnih funkcija polinomima na konačnom intervalu $[a, b]$ sugerira da treba uzeti V_n kao prostor polinoma \mathcal{P}_d stupnja manjeg ili jednakog d , gdje d ovisi o n (i raste s n). Kao što ćemo vidjeti, korisno je dozvoliti da bude $d \neq n$.

Isti princip koristimo i za beskonačne domene, samo treba osigurati da su polinomi integrabilni s težinom w . To postizemo dodatnim zahtjevom na težinsku funkciju w , tako da pretpostavimo da svi momenti težinske funkcije

$$\mu_k := \int_a^b x^k w(x) dx, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (1.4.5)$$

postoje i da su konačni. U nastavku pretpostavljamo da težinska funkcija w zadovoljava ovu pretpostavku. Takve težinske funkcije obično zovemo (polinomno) dopustivima.

Napomenimo odmah da se ovaj pristup može generalizirati i na bilo koji drugi sustav funkcija aproksimacijskih funkcija $\{\hat{f}_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ koji je gust u prostoru $C[a, b]$ neprekidnih funkcija na $[a, b]$. Pripadni prostori V_n generirani su početnim komadima ovog sustava funkcija (kao linearne ljuske).

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

$$I_w(f) = I_n(f) \quad \text{ili} \quad E_n(f) = 0, \quad \text{za sve } f \in V_n.$$

Iz relacija (1.4.3) i (1.4.4) odmah dobivamo i ocjenu greške pripadne integracijske formule $I_n(f)$, za bilo koji f

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

1.5. Gaussove integracijske formule

Kao što smo već rekli, Gaussove formule imaju dvostruko više slobodnih parametara nego Newton–Cotesove, pa bi zbog toga trebale egzaktno integrirati polinome približno dvostruko većeg stupnja od Newton–Cotesovih.

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

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

u kojima točke integracije x_i nisu unaprijed poznate, nego se izračunaju tako da greška takve formule bude najmanja. Motivirani praktičnim razlozima, promatrat ćemo malo općenitije integracijske formule oblika

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

gdje je w **težinska funkcija**, pozitivna na otvorenom intervalu (a, b) . Koeficijente w_i zovemo **težinski koeficijenti** ili, skraćeno, **težine** integracijske formule. Gornji specijalni slučaj u kojem je $w \equiv 1$ čine formule koje se zovu **Gauss–Legendrove**. Težinska funkcija u općem slučaju utječe na težine i točke integracije, ali se ne pojavljuje eksplicitno u Gaussovoj formuli.

Bitno je znati da se za neke težinske funkcije na određenim intervalima, čvorovi

i težine standardno tabeliraju u priručnicima. To su

težinska funkcija w	interval	formula Gauss–
1	$[-1, 1]$	Legendre
$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$[-1, 1]$	Čebišev
$\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	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 integracije x_i nultočke polinoma koji su ortogonalni na intervalu (a, b) obzirom na težinsku funkciju w , a težine w_i mogu se eksplicitno izračunati po formuli

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

Pritom je ℓ_i poseban polinom Lagrangeove baze kojeg smo razmatrali u poglavlju o polinomnoj interpolaciji, definiran uvjetom $\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$. Primijetimo samo da je kod numeričke integracije zgodnije čvorove numerirati od x_1 do x_n , (za razliku od numeracije x_0 do x_n u poglavlju o interpolaciji), pa je i ℓ_i polinom stupnja $n - 1$.

Kao što se Newton–Côtesove formule mogu dobiti integracijom Lagrangeovog interpolacijskog polinoma, tako se i Gaussove formule mogu dobiti integracijom Hermiteovog interpolacijskog polinoma. Takav pristup ekvivalentan je s pristupom u kojem zahtijevamo da Gaussove formule integriraju egzaktno polinome što je moguće višeg stupnja, tj. da vrijedi

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

Mogli bismo iskoristiti ovu relaciju da napišemo $2n$ jednadžbi za $2n$ nepoznanica x_i i w_i , međutim nepoznanice x_i ulaze u sistem nelinearno, pa je ovakav pristup teži. Čak i dokaz da taj nelinearni sistem ima jedinstveno rješenje nije jednostavan.

Napišimo još jednom formulu za Hermiteov interpolacijski polinom h_{2n-1} , stupnja $2n - 1$, koji u čvorovima integracije x_i interpolira vrijednosti $f_i = f(x_i)$

i $f'_i = f'(x_i)$, za $i = 1, \dots, n$ (vidjeti poglavlje o interpolacijskim polinomima)

$$\begin{aligned} h_{2n-1}(x) &= \sum_{i=1}^n (h_{i,0}(x) f_i + h_{i,1}(x) f'_i) \\ &= \sum_{i=1}^n ([1 - 2(x - x_i)\ell'_i(x_i)] \ell_i^2(x) f_i + (x - x_i) \ell_i^2(x) f'_i). \end{aligned}$$

Integracijom dobijemo

$$\int_a^b w(x) h_{2n-1}(x) dx = \sum_{i=1}^n (A_i f_i + B_i f'_i), \quad (1.5.1)$$

gdje su

$$\begin{aligned} A_i &= \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_i)\ell'_i(x_i)] \ell_i^2(x) dx, \\ B_i &= \int_a^b w(x) (x - x_i) \ell_i^2(x) dx. \end{aligned} \quad (1.5.2)$$

Integracijska formula (1.5.1) sliči na Gaussovu integracijsku formulu, osim što ima dodatne članove $B_i f'_i$, koji koriste i derivacije funkcije f u čvorovima integracije.

Kad bi, kao u Newton–Cotesovim formulama, čvorovi x_i bili unaprijed zadani, iz uvjeta egzaktnosti integracije polinoma trebalo bi odrediti $2n$ parametara — težinskih koeficijenata A_i , B_i . Zato očekujemo da ovakva formula egzaktno integrira polinome do stupnja $2n - 1$ (dimenzija prostora je $2n$). No, za upotrebu ove formule trebamo znati ne samo funkcijske vrijednosti $f(x_i)$ u čvorovima, već i vrijednosti derivacije $f'(x_i)$ funkcije u tim čvorovima.

Zato je ideja da probamo izbjeći korištenje derivacija, tako da izborom čvorova x_i **poništimo** koeficijente B_i uz derivacije f'_i . Točnost integracijske formule mora ostati ista (egzaktna integracija polinoma stupnja do $2n - 1$), ali tako dobivena formula koristila bi samo funkcijske vrijednosti u čvorovima, tj. postala bi Gaussova integracijska formula.

Zaista, odgovarajućim izborom čvorova x_i može se postići da težinski koeficijenti B_i uz derivacije budu jednaki nula. Da bismo to dokazali, uvodimo posebni “polinom čvorova” (engl. “node polynomial”) ω_n , koji ima nultočke u svim čvorovima integracije

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

Taj polinom smo već susreli u poglavlju o Lagrangeovoj interpolaciji. Sljedeći rezultat govori o tome kako treba izabrati čvorove.

Lema 1.5.1. *Ako je $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$ ortogonalna s težinom w na sve polinome nižeg stupnja, tj. ako vrijedi*

$$\int_a^b w(x) \omega_n(x) x^k dx = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad (1.5.3)$$

onda su svi koeficijenti B_i u (1.5.2) jednaki nula.

Dokaz:

Lagano provjerimo identitet

$$(x - x_i) \ell_i(x) = \frac{\omega_n(x)}{\omega_n'(x_i)}. \quad (1.5.4)$$

Supstitucijom u izraz (1.5.2) za B_i slijedi

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

Kako je ℓ_i polinom stupnja $n-1$, i po pretpostavci je ω_n ortogonalna s težinom w na sve takve polinome, tvrdnja slijedi. ■

Lako se vidi da vrijedi i obrat ove tvrdnje, tj. da su svi koeficijenti $B_i = 0$ u (1.5.1), ako i samo ako je polinom čvorova ω_n ortogonalan na sve polinome nižeg stupnja (do $n-1$), s težinskom funkcijom w . Razlog tome je što su funkcije ℓ_i , $i = 1, \dots, n$, Lagrangeove baze zaista baza prostora \mathcal{P}_{n-1} .

Iz ranijih rezultata o ortogonalnim polinomima znamo da ortogonalni polinom stupnja n obzirom na w postoji i jednoznačno je određen do na (recimo) vodeći koeficijent. Da bismo dobili Gaussovu integracijsku formulu u (1.5.1), polinom čvorova ω_n mora biti ortogonalni polinom s vodećim koeficijentom 1, tj. ω_n postoji i jedinstven je.

Nadalje, uvjet ortogonalnosti (1.5.3) **jednoznačno** određuje raspored čvorova za Gaussovu integraciju. Iz teorema o ortogonalnim polinomima slijedi da ω_n ima n jednostrukih nultočaka u otvorenom intervalu (a, b) (što nam baš odgovara za integraciju). Njegove nultočke x_1, \dots, x_n možemo samo permutirati (drugačije indeksirati), a uz standardni dogovor $x_1 < \dots < x_n$, 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 možemo izračunati iz (1.5.2), budući da je tada $w_i = A_i$, za $i = 1, \dots, n$.

Iskoristimo li pretpostavku ortogonalnosti iz leme 1.5.1., možemo pojednostavniti i izraze za koeficijente $w_i = A_i$ u (1.5.2). Sasvim općenito, koristeći relaciju za B_i , koeficijent A_i možemo napisati u obliku

$$A_i = \int_a^b w(x) [1 - 2(x - x_i)\ell'_i(x_i)] \ell_i^2(x) dx = \int_a^b w(x) \ell_i^2(x) dx - 2\ell'_i(x_i)B_i.$$

Uz uvjet ortogonalnosti (Gaussova integracija) je $B_i = 0$ i $A_i = w_i$, pa je

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

Podintegralna funkcija je nenegativna i ℓ_i^2 je polinom stupnja $2(n - 1)$ koji nije nul-polinom, pa desna strana mora biti pozitivna. Dakle, slijedi da su svi težinski koeficijenti u Gaussovoj integraciji pozitivni, $w_i > 0$, za $i = 1, \dots, n$, što je vrlo bitno za numeričku stabilnost i konvergenciju.

Pokažimo još da vrijedi i

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

Očito, to je isto kao i dokazati

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

Ali polinom $\ell_i(x) - 1$ se poništava u točki $x = x_i$, po definiciji polinoma ℓ_i , jer je $\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$. Znači da $\ell_i(x) - 1$ mora sadržavati $x - x_i$ kao faktor, tj. možemo napisati

$$\ell_i(x) - 1 = (x - x_i)q(x),$$

gdje je q neki polinom stupnja $n - 2$, za jedan manje od stupnja polinoma ℓ_i . Dakle,

$$\ell_i(x) (\ell_i(x) - 1) = \frac{\omega_n(x)}{\omega'_n(x_i)(x - x_i)} (\ell_i(x) - 1) = \frac{1}{\omega'_n(x_i)} \omega_n(x) q(x),$$

pa je zbog ortogonalnosti ω_n na sve polinome nižeg stupnja

$$\int_a^b w(x) \ell_i(x) (\ell_i(x) - 1) dx = \frac{1}{\omega'_n(x_i)} \int_a^b w(x) \omega_n(x) q(x) dx = 0.$$

■

Pokazali smo da Gaussovu integracijsku formulu možemo dobiti kao integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma, uz odgovarajući izbor čvorova, a za težinske koeficijente vrijedi

$$w_i = \int_a^b w(x) \ell_i(x) dx. \quad (1.5.5)$$

Primijetimo da je ova formula za koeficijente ista kao i ona u Newton–Côtesovim formulama, što je ovdje posljedica pretpostavke o ortogonalnosti. U oba slučaja do integracijskih formula dolazimo interpolacijom funkcije u čvorovima.

Pokažimo i primjerom da ortogonalnost produkta korijenskih faktora, tj. funkcije $\omega_n(x)$ na sve polinome nižeg stupnja zapravo određuje točke integracije x_i .

Primjer 1.5.1. *Neka je $w(x) = 1$ i $n = 3$. Odredimo točke integracije iz uvjeta ortogonalnosti. Uobičajeno je da za interval integracije uzmemo $(-1, 1)$, budući da integrale na drugim intervalima možemo lagano računati, ako podintegralnu funkciju transformiramo linearnom supstitucijom. Problem se dakle svodi na to da odredimo nultočke kubične funkcije $\omega_3(x) = a + bx + cx^2 + x^3$ za koju vrijedi*

$$\int_{-1}^1 \omega_3(x) x^k dx = 0, \quad k = 0, 1, 2.$$

Nakon integracije dobivamo sustav jednadžbi za koeficijente a , b , c

$$2a + \frac{2}{3}c = 0, \quad \frac{2}{3}b + \frac{2}{5} = 0, \quad \frac{2}{3}a + \frac{2}{5}c = 0,$$

odakle nađemo $a = c = 0$ i $b = -3/5$. Dobivamo

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

odakle slijedi da su točke integracije $x_i = -\sqrt{3/5}, 0, \sqrt{3/5}$.

Teorijski, ovaj pristup možemo iskoristiti za sve moguće intervale integracije i razne težinske funkcije. Za veće n potrebno je odrediti nule polinoma visokog stupnja, što je egzaktno nemoguće, a numerički u najmanju ruku neugodno. Stoga je potrebno za specijalne težine i intervale integracije doći do dodatnih informacija o ortogonalnim polinomima. Na kraju, bilo bi dobro izračunati formulom i težinske faktore w_i u Gaussovima formulama. Analitički je moguće doći do ovakvih rezultata za mnoge specijalne težine $w(x)$ koje se pojavljuju u primjenama. Riješimo na početku važnu situaciju $w \equiv 1$, $a = -1$, $b = 1$. Pripadne formule nazvali smo Gauss–Legendreovima; u gornjem primjeru izračunali smo točke integracije za Gauss–Legendreovu formulu reda 3.

Zadatak 1.5.1. *Iz uvjeta egzaktnosti i poznatih točaka integracije za $n = 3$ izračunajte težinske koeficijente w_i . Primijetite da je sustav jednadžbi linearan, pa stoga računanje ovih faktora ne predstavlja veće probleme.*

1.5.1. Gauss–Legendreove integracijske formule

Prepostavimo u daljnjem da je $w \equiv 1$ na intervalu $(-1, 1)$ i izvedimo specijalnu Gaussovu formulu, tj. Gauss–Legendre-ovu formulu

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i).$$

Kao što znamo, Legendreov polinom stupnja n definiran je **Rodriguesovom formulom**

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

Tako definirani polinomi čine **ortogonalnu bazu** u prostoru polinoma stupnja n , tj. oni su linearno nezavisni i ortogonalni obzirom na skalarni produkt

$$\langle P, Q \rangle := \int_{-1}^1 P(x) Q(x) dx. \quad (1.5.6)$$

Pojavljaju se prirodno u parcijalnim diferencijalnim jednačbama, kod metode separacije varijabli za Laplaceovu jednačbu u kugli. Za nas je bitno samo jedno specijalno svojstvo, iz kojeg slijede sva ostala:

Lema 1.5.2. *Legendreov polinom stupnja n ortogonalan je na sve potencije x^k nižeg stupnja, tj. vrijedi*

$$\int_{-1}^1 x^k P_n(x) dx = 0, \quad \text{za } k = 0, 1, \dots, n-1,$$

i vrijedi

$$\int_{-1}^1 x^n P_n(x) dx = \frac{2^{n+1} (n!)^2}{(2n+1)!}.$$

Dokaz:

Uvrštavanjem Rodriguesove formule, nakon k ($k < n$) parcijalnih integracija dobivamo

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 x^k \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n dx &= \underbrace{x^k \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n \Big|_{-1}^1}_{=0} - \int_{-1}^1 kx^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx \\ &= \dots = (-1)^k k! \int_{-1}^1 \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} (x^2 - 1)^n dx = 0, \end{aligned}$$

pa smo dokazali prvu formulu. Za $k = n$, na isti način imamo

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 x^n \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n dx &= (-1)^n n! \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx = 2n! \int_0^1 (1 - x^2)^n dx \\ &= \{x = \sin t\} = 2n! \int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} t dt. \end{aligned}$$

Za zadnji integral parcijalnom integracijom izlazi

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} t dt &= \underbrace{\frac{\cos^{2n} t \sin t}{2n+1} \Big|_0^{\pi/2}}_{=0} + \frac{2n}{2n+1} \int_0^{\pi/2} \cos^{2n-1} t dt \\ &= \dots = \frac{2n(2n-2) \cdots 2}{(2n+1)(2n-1) \cdots 3} \int_0^{\pi/2} \cos t dt, \end{aligned}$$

pa je stoga

$$\int_{-1}^1 x^n \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n dx = 2n! \frac{2n(2n-2) \cdots 2}{(2n+1)(2n-1) \cdots 3}.$$

Pomnožimo li brojnik i nazivnik s $2n(2n-2) \cdots 2 = 2^n n!$, a zatim, zbog definicije Legendreovog polinoma P_n , sve podijelimo s $2^n n!$, slijedi

$$\int_{-1}^1 x^n P_n(x) dx = \frac{1}{2^n n!} 2n! \frac{2^n n! \cdot 2^n n!}{(2n+1)!} = \frac{2^{n+1} (n!)^2}{(2n+1)!}.$$

■

Lema 1.5.3. Legendreovi polinomi su ortogonalni na intervalu $(-1, 1)$ obzirom na skalarni produkt (1.5.6)

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = 0, \quad \text{za } m \neq n.$$

Norma Legendreovog polinoma je

$$\|P_n\|^2 := \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}.$$

Dokaz:

Prva tvrdnja je direktna posljedica dokazane ortogonalnosti na potencije nižeg

stupnja. Druga tvrdnja slijedi iz

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2^n n!} \frac{(2n)!}{n!} x^n + \dots \right] P_n(x) dx.$$

Potencije manje od x^n ne doprinose integralu, pa druga tvrdnja leme 1.5.2. povlači

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \frac{2^{n+1} (n!)^2}{(2n+1)!} = \frac{2}{2n+1}.$$

■

Lema 1.5.4. Legendreovi polinomi P_n imaju n nultočaka, koje su sve realne i različite, i nalaze se u otvorenom intervalu $(-1, 1)$.

Dokaz:

Dokaz ide iz definicije Legendreovih polinoma

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

induktivnom primjenom Rolleovog teorema. Polinom $(x^2 - 1)^n$ je stupnja $2n$ i ima višestruke (n -terostruke) nultočke u rubovima intervala ± 1 . Prema Rolleovom teoremu, prva derivacija ima jednu nultočku u intervalu $(-1, 1)$. Međutim, prva derivacija je, također, nula u ± 1 , pa ukupno mora imati tri nultočke u zatvorenom intervalu $[-1, 1]$. Druga derivacija stoga ima dvije unutarne nule po Rolleovom teoremu, i dvije u ± 1 , pa ima ukupno četiri nule u $[-1, 1]$. I tako redom, vidimo da $n - 1$ -a derivacija ima $n - 1$ unutarnju nultočku i još dvije u ± 1 . Na kraju zaključimo da n -ta derivacija, koja je do na multiplikativni faktor jednaka P_n , ima n unutarnjih nultočaka. ■

Na taj način smo zapravo našli točke integracije u Gauss–Legendreovoj formuli i bez eksplicitnog rješavanja nelinearnog sistema jednadžbi za w_i i x_i , iz uvjeta egzaktne integracije potencija najvećeg mogućeg stupnja. Taj rezultat rezimiran je u sljedećem teoremu.

Teorem 1.5.1. Čvorovi integracije u Gauss–Legendreovoj formuli reda n su nultočke Legendreovog polinoma P_n , za svaki n .

Dokaz:

Znamo da su točke integracije x_i nultočke polinoma ω_n po konstrukciji. Zbog uvjeta ortogonalnosti (1.5.3) polinom ω_n , s vodećim koeficijentom 1, proporcionalan je Legendreovom polinomu P_n . Vodeći koeficijent u P_n lako izračunamo iz Rodriguesove formule, odakle je

$$\omega_n(x) = \frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(x),$$

pa vidimo da su sve nultočke polinoma ω_n zapravo nultočke od P_n (lema 1.5.4). ■

Primjer 1.5.2. *Iz Rodriguesove formule možemo izračunati nekoliko prvih Legendreovih polinoma.*

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= \frac{1}{2} \frac{d}{dx}(x^2 - 1) = x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{8} \frac{d^2}{dx^2}(x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{48} \frac{d^3}{dx^3}(x^2 - 1)^3 = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \\ P_4(x) &= \frac{1}{16 \cdot 24} \frac{d^4}{dx^4}(x^2 - 1)^4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \\ P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x), \\ P_6(x) &= \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5), \\ P_7(x) &= \frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x), \\ P_8(x) &= \frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35). \end{aligned}$$

Vidimo, na primjer, da su nultočke od P_3 identične s točkama integracije koje smo dobili u primjeru 1.5.1., direktno iz uvjeta ortogonalnosti.

Računanje nultočaka Legendreovih polinoma (na mašinsku točnost!) nije jednostavan problem, budući da egzaktne formule postoje samo za male stupnjeve. Napomenimo za sad samo toliko, da postoje specijalni algoritmi, te da je dovoljno tabelirati te nultočke jednom, pa brzina algoritma nije važna, nego samo preciznost. Tabelirane nultočke (kao i težine w_i) moguće je naći u gotovo svim standardnim knjigama i tablicama iz područja numeričke analize.

Postoji lakši način za računanje $P_n(x)$, zasnovan na činjenici da Legendreovi polinomi zadovoljavaju tročlanu rekurziju, čiji se koeficijenti mogu eksplicitno izračunati. Ova rekurzivna formula igra važnu ulogu i u konstrukciji spomenutog specijalnog algoritma za traženje nultočaka.

Lema 1.5.5. *Legendreovi polinomi zadovoljavaju rekurzivnu formulu*

$$(n + 1)P_{n+1}(x) = (2n + 1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad n \geq 1,$$

s početnim vrijednostima $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$.

Dokaz:

Kako je $xP_n(x)$ polinom stupnja $n + 1$ i $\{P_i\}_{i=0}^{n+1}$ baza za prostor polinoma stupnja do $n + 1$, postoje koeficijenti c_i tako da vrijedi

$$xP_n(x) = \sum_{i=0}^{n+1} c_i P_i(x).$$

Pomnožimo li obje strane s $P_k(x)$ i integriramo od -1 do 1 , zbog ortogonalnosti (lema 1.5.3.) slijedi

$$\int_{-1}^1 xP_k(x) P_n(x) dx = c_k \int_{-1}^1 P_k^2(x) dx. \quad (1.5.7)$$

Ali za $k < n - 1$ je $xP_k(x)$ polinom stupnja manjeg ili jednakog $n - 1$, pa je $P_n(x)$ ortogonalan na njega (lema 1.5.2.). Stoga je $c_k = 0$ za $k < n - 1$, a u sumi za $xP_n(x)$ ostaju samo zadnja tri člana

$$xP_n(x) = c_{n+1}P_{n+1}(x) + c_nP_n(x) + c_{n-1}P_{n-1}(x). \quad (1.5.8)$$

Treba još izračunati koeficijente c_{n+1} , c_n i c_{n-1} . Kako je

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \omega_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} x^n + \text{niže potencije od } x,$$

usporedimo li koeficijente uz x^{n+1} u (1.5.8), dobivamo da je

$$\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} = c_{n+1} \frac{(2n+2)!}{2^{n+1}[(n+1)!]^2},$$

odakle slijedi da je

$$c_{n+1} = \frac{n+1}{2n+1}.$$

Lagano se vidi (iz Rodriguesove formule) da se u Legendreovim polinomima pojavljuju samo alternirajuće potencije, tj. P_{2n} je linearna kombinacija parnih potencija x^{2k} , $k = 0, \dots, n$, a P_{2n+1} je linearna kombinacija neparnih potencija x^{2k+1} , $k = 0, \dots, n$. Iz rekurzije (1.5.8) na osnovu toga zaključimo da je $c_n = 0$, pa preostaje samo izračunati c_{n-1} . Za $k = n - 1$, iz (1.5.7) imamo da je

$$\int_{-1}^1 xP_{n-1}(x) P_n(x) dx = c_{n-1} \int_{-1}^1 P_{n-1}^2(x) dx.$$

Zbog

$$xP_{n-1}(x) = \frac{(2(n-1))!}{2^{n-1}[(n-1)!]^2} x^n + \text{niže potencije od } x$$

i ortogonalnosti P_n na sve niže potencije od x , dobivamo

$$\frac{(2n-2)!}{2^{n-1}[(n-1)!]^2} \int_{-1}^1 x^n P_n(x) dx = c_{n-1} \int_{-1}^1 P_{n-1}^2(x) dx.$$

Ovi integrali su poznati (lema 1.5.2. i lema 1.5.3.), pa slijedi

$$c_{n-1} = \frac{n}{2n+1}.$$

Tako smo našli sve nepoznate koeficijente u linearnoj kombinaciji (1.5.8), odakle odmah slijedi tročlana rekurzija. Primijetimo da smo usput dokazali i formulu

$$\int_{-1}^1 x P_{n-1}(x) P_n(x) dx = \frac{n}{2n+1} \frac{2}{2n-1} = \frac{2n}{4n^2-1}. \quad (1.5.9)$$

■

Zadatak 1.5.2. *Budući da Legendreovi polinomi zadovoljavaju tročlanu rekurziju, moguće je napisati algoritam za brzu sumaciju parcijalnih suma redova oblika*

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

poznat pod nazivom **generalizirana Hornerova shema**. Koristeći rekurziju iz leme 1.5.5., napišite eksplicitno taj algoritam. Razvoji po Legendreovim polinomima pojavljuju se često kod rješavanja Laplaceove jednadžbe u sfernim koordinatama.

Sljedeće dvije leme korisne su za dobivanje eksplicitnih formula za težine u Gauss–Legendreovim formulama.

Lema 1.5.6. (Christoffel–Darbouxov identitet) *Za Legendreove polinome P_n vrijedi*

$$(t-x) \sum_{k=0}^n (2k+1) P_k(x) P_k(t) = (n+1) [P_{n+1}(t) P_n(x) - P_n(t) P_{n+1}(x)].$$

Dokaz:

Pomnožimo li rekurziju iz leme 1.5.5. (uz zamjenu $n \mapsto k$) s $P_k(t)$, dobijemo

$$(2k+1)x P_k(x) P_k(t) = (k+1) P_{k+1}(x) P_k(t) + k P_{k-1}(x) P_k(t).$$

Zamijenimo li x i t imamo

$$(2k+1)t P_k(t) P_k(x) = (k+1) P_{k+1}(t) P_k(x) + k P_{k-1}(t) P_k(x).$$

Odbijanjem prve relacije od druge, slijedi

$$(2k+1)(t-x)P_k(x)P_k(t) = (k+1)[P_{k+1}(t)P_k(x) - P_k(t)P_{k+1}(x)] \\ - k[P_k(t)P_{k-1}(x) - P_{k-1}(t)P_k(x)].$$

Sumiramo li po k od 1 do n , sukcesivni članovi u sumi na desnoj strani se krate, pa ostaju samo prvi i zadnji

$$(t-x) \sum_{k=1}^n (2k+1)P_k(x)P_k(t) = (n+1)[P_{n+1}(t)P_n(x) - P_n(t)P_{n+1}(x)] - (t-x).$$

Zadnji član možemo prebaciti na lijevu stranu kao multi član u sumi, a to je baš Christoffel–Darbouxov identitet. ■

Lema 1.5.7. *Derivacija Legendreovih polinoma može se rekurzivno izraziti pomoću samih Legendreovih polinoma, formulom*

$$(1-x^2)P'_n(x) + nxP_n(x) = nP_{n-1}(x), \quad n \geq 1.$$

Dokaz:

Polinom $(1-x^2)P'_n + nxP_n$ je očito stupnja manjeg ili jednakog od $n+1$. Napišimo P_n kao linearnu kombinaciju potencija od x (pojavljuje se samo svaka druga potencija)

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-2} x^{n-2} + \dots,$$

pa je

$$P'_n(x) = na_n x^{n-1} + (n-2)a_{n-2} x^{n-3} + \dots.$$

No, onda je

$$(1-x^2)P'_n(x) + nxP_n(x) = (-na_n + na_n)x^{n+1} + O(x^{n-1}),$$

tj. polinom $(1-x^2)P'_n + nxP_n$ je zapravo stupnja $n-1$. Kao i u dokazu rekurzivne formule, moraju postojati koeficijenti c_i takovi da vrijedi

$$(1-x^2)P'_n(x) + nxP_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i P_i(x).$$

Pomnožimo ovu relaciju s $P_k(x)$ i integriramo od -1 do 1 . Zbog ortogonalnosti, na desnoj strani ostaje samo jedan član

$$\frac{2}{2k+1} c_k = \int_{-1}^1 (1-x^2) P'_n(x) P_k(x) dx + n \int_{-1}^1 x P_n(x) P_k(x) dx.$$

Prvi integral integriramo parcijalno, pa kako se faktor $(1 - x^2)$ poništava na graničama integracije, slijedi

$$\frac{2}{2k+1} c_k = - \int_{-1}^1 P_n(x) \frac{d}{dx} [(1-x^2)P_k(x)] dx + n \int_{-1}^1 x P_n(x) P_k(x) dx.$$

Za $k < n - 1$, oba integranda su oblika $P_n(x) \times$ (polinom stupnja najviše $n - 1$), pa su svi ovi integrali jednaki nula (lema 1.5.2.), tj. $c_k = 0$ za $k < n - 1$. Za $k = n - 1$ treba izračunati dva integrala u prethodnoj relaciji. Drugi je jednostavan

$$n \int_{-1}^1 x P_n(x) P_{n-1}(x) dx = (1.5.9) = \frac{2n^2}{4n^2 - 1}.$$

U prvom integralu

$$- \int_{-1}^1 P_n(x) \frac{d}{dx} [(1-x^2)P_{n-1}(x)] dx,$$

zbog prve tvrdnje u lemi 1.5.2. (ortogonalnost), doprinos daje samo vodeći član u $(1 - x^2)P_{n-1}(x)$, pa je taj integral jednak

$$\int_{-1}^1 P_n(x) \frac{d}{dx} \left\{ x^2 \frac{(2n-2)!}{2^{n-1}[(n-1)!]^2} x^{n-1} \right\} dx,$$

a zbog druge tvrdnje u lemi, integral se svodi na

$$\frac{(2n-2)!}{2^{n-1}[(n-1)!]^2} (n+1) \frac{2^{n+1}(n!)^2}{(2n+1)!} = \frac{2n(n+1)}{(2n+1)(2n-1)}.$$

Na kraju je

$$c_{n-1} = \frac{2n-1}{2} \left[\frac{2n(n+1)}{(2n+1)(2n-1)} + \frac{2n^2}{(2n+1)(2n-1)} \right] = n,$$

što smo i htjeli dokazati. ■

Lema 1.5.8. *Težinski faktori u Gauss–Legendreovim formulama mogu se eksplicitno izračunati formulama*

$$w_i = \frac{2(1-x_i^2)}{n^2[P_{n-1}(x_i)]^2},$$

gdje su x_i , $i = 0, \dots, n$, nultočke Legendreovog polinoma P_n .

Dokaz:

Neka je x_i nultočka polinoma P_n . Stavimo li $t = x_i$ u Christoffel–Darbouxov identitet (lema 1.5.6.), dobivamo

$$\frac{(n+1)P_{n+1}(x_i)P_n(x)}{x-x_i} = -\sum_{k=0}^n (2k+1)P_k(x)P_k(x_i).$$

Kad integriramo ovu jednakost od -1 do 1 i uzmemo u obzir da je k -ti Legendreov polinom ortogonalan na konstantu $P_k(x_i)$, na desnoj strani preostane samo član za $k=0$

$$\int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{(x-x_i)} dx = \frac{-2}{(n+1)P_{n+1}(x_i)}.$$

Tročlana rekurzija iz leme 1.5.5. u nultočki x_i Legendreovog polinoma P_n ima oblik $(n+1)P_{n+1}(x_i) = -nP_{n-1}(x_i)$, pa je stoga

$$\int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{(x-x_i)} dx = \frac{2}{nP_{n-1}(x_i)}.$$

Za težinske koeficijente w_i vrijede relacije (1.5.5) i (1.5.4)

$$w_i = \int_{-1}^1 \ell_i(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{\omega_n(x)}{\omega'_n(x_i)(x-x_i)} dx = \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{P'_n(x_i)(x-x_i)} dx,$$

pa je dakle

$$w_i = \frac{2}{nP'_n(x_i)P_{n-1}(x_i)}. \quad (1.5.10)$$

Primijetimo da je Christoffel–Darbouxov identitet potreban jedino zato da se izračuna neugodan integral

$$\int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{(x-x_i)} dx,$$

u kojem podintegralna funkcija ima uklonjivi singularitet.

Na kraju, iskoristimo rekurzivnu formulu za derivacije Legendreovog polinoma iz leme 1.5.7. u specijalnom slučaju kada je $x = x_i$. Dobivamo da vrijedi

$$(1-x_i^2)P'_n(x_i) = nP_{n-1}(x_i).$$

Uvrstimo li taj rezultat u (1.5.10), tvrdnja slijedi. ■

U dokazu prethodne leme 1.5.8. pokazali smo (usput) da u nultočki x_i Legendreovog polinoma P_n vrijedi

$$(1-x_i^2)P'_n(x_i) = nP_{n-1}(x_i) = -(n+1)P_{n+1}(x_i).$$

Ovu relaciju možemo iskoristiti na različite načine u (1.5.10), što daje pet raznih formula za težinske koeficijente u Gauss–Legendreovim formulama

$$\begin{aligned} w_i &= \frac{2(1-x_i^2)}{[nP_{n-1}(x_i)]^2} = \frac{2(1-x_i^2)}{[(n+1)P_{n+1}(x_i)]^2} \\ &= \frac{2}{nP'_n(x_i)P_{n-1}(x_i)} = -\frac{2}{(n+1)P'_n(x_i)P_{n+1}(x_i)} \\ &= \frac{2}{(1-x_i^2)[P'_n(x_i)]^2}. \end{aligned} \quad (1.5.11)$$

Sljedeći teorem rezimira prethodne rezultate, i ujedno daje ocjenu greške za Gauss–Legendreovu integraciju.

Teorem 1.5.2. *Za funkciju $f \in C^{2n}[-1, 1]$ Gauss–Legendreova formula integracije glasi*

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + E_n(f),$$

gdje su x_i nultočke Legendreovog polinoma P_n i koeficijenti w_i dani u (1.5.11). Za grešku $E_n(f)$ vrijedi

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

Dokaz:

Treba samo dokazati formulu za ocjenu greške. Kako je Gauss–Legendreova formula zapravo integral Hermiteovog interpolacijskog polinoma, treba integrirati grešku kod Hermiteove interpolacije, koju smo procijenili u teoremu o Hermiteovoj interpolaciji, i uvrstiti odgovarajući ω_n . Integracijom i primjenom teorema srednje vrijednosti za integrale, dobivamo

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_{-1}^1 \omega_n^2(x) dx,$$

za neki $\xi \in (-1, 1)$. Kako je

$$\omega_n(x) = \frac{2^n(n!)^2}{(2n)!} P_n(x),$$

zbog poznatog kvadrata norme Legendreovog polinoma (lema 1.5.3.), imamo

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \left[\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!} \right]^2 \frac{2}{2n+1} = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi).$$

Navedeni izraz za grešku nije lagano primijeniti, budući da je potrebno naći neku ogradu za vrlo visoku derivaciju funkcije f (red derivacije je dva puta veći nego kod Newton–Côtesovih formula). Član uz $f^{(2n)}(\xi)$ vrlo brzo pada s porastom n . Na primjer, za $n = 6$, greška je oblika

$$1.6 \cdot 10^{-12} f^{(12)}(\xi).$$

Da ocjena greške za Gaussove formule može biti previše pesimistična, pokazuje sljedeći primjer.

Primjer 1.5.3. *Primijenimo Gauss–Legendreovu formulu na integral*

$$\int_0^{\pi/2} \log(1+t) dt = \left(1 + \frac{\pi}{2}\right) \left[\log\left(1 + \frac{\pi}{2}\right) - 1\right] + 1.$$

Zamjena varijable $t = \pi(x+1)/4$ prebacuje integral na standardnu formu

$$\int_{-1}^1 \frac{\pi}{4} \log\left(1 + \frac{\pi(x+1)}{4}\right) dx.$$

U ovom slučaju možemo lagano izračunati bilo koju derivaciju podintegralne funkcije, koja raste s faktorijelima. Zapravo, sve ocjene greške formula za numeričku integraciju pokazuju slično ponašanje (usporedite, na primjer, trapeznu i Simpsonovu formulu), ali Gaussove formule naročito, budući da uključuju visoke derivacije. Tako je, na primjer, osma derivacija, koja je potrebna za Gaussovu formulu s četiri točke jednaka

$$\left(\frac{\pi}{4}\right)^9 \cdot \frac{-7!}{(1+t)^8},$$

pa je greška 7! puta veća nego da smo, recimo, integrirali trigonometrijsku funkciju \sin ili \cos , koje imaju ograničene derivacije. Ipak, lagano vidimo da već sa šest točaka dobivamo 6 znamenaka točno, iako ocjena greške uključuje faktor od 11!. Simpsonovoj formuli treba 64 točke za istu točnost. Možemo slutiti, da je za analitičke funkcije moguća bolja ocjena greške.

Korolar 1.5.1. (Uvjeti egzaktnosti) *Gauss–Legendreova formula egzaktno integrira polinome stupnja $2n - 1$.*

Dokaz:

Očito, budući da se greška, koja uključuje $2n$ -tu derivaciju, poništava na takvim polinomima. ■

Svojstvo iz gornjeg korolara može se upotrijebiti za alternativni dokaz teorema 1.5.2., kao što smo napomenuli na početku. Hermiteova interpolacija poslužila

je kao “trik”, da izbjegnemo rješavanje nelinearnog sistema koji proizilazi iz uvjeta egzaktnosti.

Rekurziju za derivacije Legendreovih polinoma iz leme 1.5.7. možemo koristiti i za računanje vrijednosti $P'_n(x)$

$$(1 - x^2)P'_n(x) = n(P_{n-1}(x) - xP_n(x)), \quad n \geq 1.$$

Nažalost, ova formulu ne možemo upotrijebiti u rubnim točkama $x = \pm 1$, zbog dijeljenja s nulom. Međutim, Legendreovi polinomi zadovoljavaju i mnoge druge rekurzivne relacije. Neke od njih dane su u sljedećem zadatku.

Zadatak 1.5.3. *Dokažite da za Legendreove polinoma vrijedi $P_n(1) = 1$, za $n \geq 0$, što opravdava izbor normalizacije. Također, dokažite da za $n \geq 1$ vrijede rekurzivne relacije*

$$\begin{aligned} P'_n(x) - xP'_{n-1}(x) &= nP_{n-1}(x), \\ xP'_n(x) - P'_{n-1}(x) &= nP_n(x), \\ P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x) &= (2n+1)P_n(x) \\ \int_{-1}^x P_n(t) dt &= \frac{1}{2n+1} (P_{n+1}(x) - P_{n-1}(x)). \end{aligned}$$

Na kraju, primijetimo da Gaussove formule možemo shvatiti i kao rješenje optimizacijskog problema: naći točke integracije tako da egzaktno integriramo polinom što većeg stupnja sa što manje čvorova. Rezultat su formule visoke točnosti, koje se lagano implementiraju, i imaju vrlo mali broj izvrednjavanja podintegralne funkcije. Cijenu smo platili time što ocjena greške zahtijeva vrlo glatku funkciju, ali također i time što upotreba takvih formula na “finijoj” mreži zahtijeva ponovno računanje funkcije u drugim čvorovima, koji s čvorovima formule nižeg reda nemaju ništa zajedničko. Kod profinjavanja mreže čvorova za formule Newton–Côtesovog tipa (na primjer, raspolavljanjem h), naprotiv, jedan dio čvorova ostaje zajednički, pa već izračunate funkcijske vrijednosti možemo iskoristiti (kao u Rombergovom algoritmu).

1.5.2. Druge Gaussove integracijske formule

U praksi se često javljaju specijalni integrali koji uključuju težinske funkcije poput e^{-x} , e^{-x^2} i mnoge druge, na specijalnim intervalima, često neograničenim. Jednostavnom linearnom supstitucijom nije moguće takve intervale i/ili težinske funkcije prebaciti na interval $(-1, 1)$ i jediničnu težinsku funkciju — situaciju u kojoj možemo primijeniti Gauss–Legendreove formule.

Alternativa je iskoristiti odgovarajuće Gaussove formule s “prirodnom” težinskom funkcijom. Iz prethodnog odjeljka znamo da za čvorove integracije treba uzeti

multočke funkcije $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$, s tim da vrijede relacije ortogonalnosti (1.5.3). Težine w_i onda možemo odrediti rješavanjem linearnog sistema, a možda u specijalnim slučajevima možemo doći i do eksplicitnih formula, kao što smo to učinili u slučaju Gauss–Legendreovih formula. Postavlja se pitanje da li možemo doći do formula za polinome koji su ortogonalni (obzirom na težinsku funkciju w) na polinome nižeg stupnja, uključivo i ostale formule na koje smo se oslanjali, poput tročlane rekurzije i slično (v. lema 1.5.2.).

U mnogim važnim slučajevima, ali ne i uvijek, moguće je analitički doći do formula sličnim onima u slučaju Gauss–Legendreove integracije. U drugim slučajevima, koji nisu pokriveni egzaktnim formulama, u principu je moguće generirati ortogonalne polinome i numerički. Poznati postupci (Stieltjesov i Čebiševljev algoritam) ne pokrivaju, međutim, sve moguće situacije, tj. nisu uvijek numerički stabilni, što ostavlja postora za daljnja istraživanja. Slučajevi tzv. **klasičnih ortogonalnih polinoma** uglavnom se mogu karakterizirati na osnovu sljedeća dva teorema, od kojih je prvi egzistencijalni, i vezan uz teoriju rubnih problema za obične diferencijalne jednačbe.

Teorem 1.5.3. (Generalizirana Rodriguesova formula)

Na otvorenom intervalu (a, b) postoji, do na multiplikativnu konstantu, jedinstvena funkcija $U_n(x)$ koja zadovoljava diferencijalnu jednačbu

$$D^{n+1} \left(\frac{1}{w(x)} D^n U_n(x) \right) = 0$$

i rubne uvjete

$$\begin{aligned} U_n(a) &= DU_n(a) = \cdots = D^{n-1}U_n(a) = 0, \\ U_n(b) &= DU_n(b) = \cdots = D^{n-1}U_n(b) = 0. \end{aligned}$$

Ovdje opet koristimo oznaku D za operator deriviranja funkcije f jedne varijable, kad je iz konteksta očito po kojoj varijabli se derivira, jer ta oznaka znatno skraćuje zapis nekih dugih formula. Onda n -tu derivaciju funkcije f u točki x možemo pisati u bilo kojem od sljedeća tri oblika

$$D^n f(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x) = f^{(n)}(x).$$

Budući da nas interesiraju rješenja koja se mogu eksplicitno konstruirati, nećemo dokazivati ovaj teorem. U svakom konkretnom slučaju, za zadane a , b i $w(x)$, konstruirat ćemo funkciju U_n formulom. Napomenimo još da teorem 1.5.3. vrijedi i na neograničenim i poluograničenim intervalima, tj. u slučajevima $a = -\infty$ i/ili $b = \infty$.

Funkcije U_n iz prethodnog teorema generiraju familiju ortogonalnih polinoma na (a, b) s težinskom funkcijom w .

Teorem 1.5.4. *Uz pretpostavke teorema 1.5.3., funkcije*

$$p_n(x) = \frac{1}{w(x)} D^n U_n(x)$$

su polinomi stupnja n koji su ortogonalni na sve polinome nižeg stupnja na intervalu (a, b) obzirom na težinsku funkciju $w(x)$, tj. vrijedi

$$\int_a^b w(x) p_n(x) x^k dx = 0, \quad \text{za } k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Dokaz:

Funkcija p_n je očito polinom stupnja n , jer je $D^{n+1}p_n(x) = 0$. Da dokažemo ortogonalnost, pretpostavimo da je $n \geq 1$. Za $k = 0$ imamo odmah po Newton–Lebnitzovoj formuli

$$\int_a^b w(x) p_n(x) dx = \int_a^b D^n U_n(x) dx = (n \geq 1) = D^{n-1} U_n(x) \Big|_a^b = 0,$$

zbog rubnih uvjeta $D^{n-1}U_n(a) = D^{n-1}U_n(b) = 0$.

Za $1 \leq k \leq n-1$, integriramo parcijalno k puta i iskoristimo opet rubne uvjete koje zadovoljava funkcija U_n . Dobivamo redom

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) p_n(x) x^k dx &= \int_a^b x^k D^n U_n(x) dx \\ &= \underbrace{x^k D^{n-1} U_n(x) \Big|_a^b}_{=0} - k \int_a^b x^{k-1} D^{n-1} U_n(x) dx \\ &= -k \left(\underbrace{x^{k-1} D^{n-2} U_n(x) \Big|_a^b}_{=0} - (k-1) \int_a^b x^{k-2} D^{n-2} U_n(x) dx \right) \\ &= \dots = (-1)^{k-1} k(k-1) \dots 2 \left(\underbrace{x D^{n-k} U_n(x) \Big|_a^b}_{=0} - \int_a^b D^{n-k} U_n(x) dx \right) \\ &= (-1)^k k(k-1) \dots 2 \cdot 1 \left(\underbrace{D^{n-k-1} U_n(x) \Big|_a^b}_{=0} \right) = 0, \end{aligned}$$

jer je $n-k-1 \geq 0$. Primijetimo da smo za dokaz ortogonalnosti iskoristili sve rubne uvjete na funkciju U_n . ■

Ovaj teorem u mnogim slučajevima omogućava efektivnu konstrukciju ortogonalnih polinoma.

Primjer 1.5.4. Neka je $w(x) = 1$ na intervalu $(-1, 1)$. Nađimo pripadne ortogonalne polinome. Prema teoremu 1.5.3., prvi korak je rješavanje diferencijalne jednadžbe

$$D^{n+1}(D^n U_n(x)) = D^{2n+1}U_n(x) = 0,$$

uz rubne uvjete

$$U_n(\pm 1) = DU_n(\pm 1) = \dots = D^{n-1}U_n(\pm 1) = 0.$$

Polinom $2n$ -tog stupnja koji se poništava u krajevima mora, zbog simetrije, biti oblika $U_n(x) = C_n(x^2 - 1)^n$, gdje je C_n proizvoljna multiplikativna konstanta (različita od nule). Tradicionalno, konstanta C_n uzima se u obliku

$$C_n = \frac{1}{2^n n!}.$$

Pripadni ortogonalni polinomi su tada, prema teoremu 1.5.4., dani formulom

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} D^n(x^2 - 1)^n,$$

tj. dobivamo, očekivano, Legendreove polinome.

Zadatak 1.5.4. Pokažite da je multiplikativna konstanta C_n odabrana tako da vrijedi $P_n(1) = 1$, za svako n . Također, pokažite da vrijedi $|P_n(x)| \leq 1$, za svaki $x \in [-1, 1]$ i svaki $n \geq 0$. To znači da P_n dostiže ekstreme u rubovima intervala, što je dodatno opravdanje za izbor normalizacije, jer je $\|P_n\|_\infty = 1$ na $[-1, 1]$.

Primjer 1.5.5. Neka je $w(x) = e^{-\alpha x}$ na intervalu $(0, \infty)$, za neki $\alpha > 0$. Nađimo pripadne ortogonalne polinome. Prema teoremu 1.5.3., trebamo prvo riješiti diferencijalnu jednadžbu

$$D^{n+1}(e^{\alpha x} D^n U_n(x)) = 0,$$

uz rubne uvjete

$$\begin{aligned} U_n(0) &= DU_n(0) = \dots = D^{n-1}U_n(0) = 0, \\ U_n(\infty) &= DU_n(\infty) = \dots = D^{n-1}U_n(\infty) = 0. \end{aligned}$$

Očito je rješenje oblika

$$U_n(x) = e^{-\alpha x} (c_0 + c_1 x + \dots + c_n x^n) + d_0 + d_1 x + \dots + d_{n-1} x^{n-1}.$$

Rubni uvjet u točki ∞ povlači $d_0 = \dots = d_{n-1} = 0$, a rubni uvjet u točki 0 povlači $c_0 = \dots = c_{n-1} = 0$, pa je

$$U_n(x) = C_n x^n e^{-\alpha x}.$$

Polinomi za koje je $\alpha = 1$ i $C_n = 1$ zovu se tradicionalno **Laguerreovi polinomi**, u oznaci \tilde{L}_n . Njihova Rodriguesova formula je dakle

$$\tilde{L}_n(x) = e^x D^n(x^n e^{-x}).$$

U općem slučaju, za $\alpha \neq 1$, uz $C_n = 1$, lagano vidimo da je $p_n(x) = \tilde{L}_n(\alpha x)$. Tada vrijede relacije ortogonalnosti

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x} \tilde{L}_m(\alpha x) \tilde{L}_n(\alpha x) dx = 0, \quad m \neq n.$$

Napomenimo još da oznaku L_n koristimo za ortonormirane Laguerreove polinome. Njih dobivamo izborom normalizacijske konstante $C_n = 1/n!$, pa su \tilde{L}_n i L_n vezani relacijom $\tilde{L}_n(x) = n! L_n(x)$.

Primjer 1.5.6. Neka je $w(x) = e^{-\alpha^2 x^2}$ na intervalu $(-\infty, \infty)$, za neki $\alpha \neq 0$. Nađimo pripadne ortogonalne polinome. Prema teoremu 1.5.3., trebamo prvo riješiti diferencijalnu jednadžbu

$$D^{n+1}(e^{\alpha^2 x^2} D^n U_n(x)) = 0,$$

uz rubne uvjete

$$U_n(\pm\infty) = DU_n(\pm\infty) = \dots = D^{n-1}U_n(\pm\infty) = 0.$$

Lagano pogodimo da je

$$U_n(x) = C_n e^{-\alpha^2 x^2}.$$

Odaberemo li $\alpha^2 = 1$ i multiplikativnu konstantu $C_n = (-1)^n$, dolazimo do klasičnih polinoma, koji nose ime **Hermiteovi polinomi**, u oznaci H_n , s Rodriguesovom formulom

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} D^n(e^{-x^2}).$$

U općem slučaju, za $\alpha^2 \neq 1$, uz $C_n = (-\alpha)^n$, lagano vidimo da su polinomi koje tražimo oblika

$$p_n(x) = H_n(\alpha x) = (-\alpha)^n e^{\alpha^2 x^2} D^n(e^{-\alpha^2 x^2}).$$

Pripadne relacije ortogonalnosti su

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) dx = 0, \quad m \neq n.$$

U literaturi se ponekad može naći još jedna definicija za klasične Hermiteove polinome, koja odgovara izboru $\alpha^2 = 1/2$, uz $C_n = (-1)^n$.

Svi ortogonalni polinomi zadovoljavaju tročlane rekurzije (v. izvod Stieltjesovog algoritma uz metodu najmanjih kvadrata). Za Laguerreove i Hermiteove polinome mogu se analitički izračunati koeficijenti u rekurziji, postupkom koji je vrlo sličan onom kojeg smo u detalje proveli u slučaju Legendreovih polinoma. Primijetimo, također, da i Čebiševljevi polinomi prve vrste zadovoljavaju relacije ortogonalnosti i tročlanu rekurziju, i da smo taj slučaj do kraja proučili. Kako su čvorovi Gaussove

formule integracije reda n nultočke odgovarajućeg ortogonalnog polinoma p_n , preostaje još samo izračunati težine w_i po formuli (1.5.5). Sasvim općenito, može se pokazati da vrijedi

$$w_i = \int_a^b w(x) \ell_i(x) dx = \frac{1}{p_n'(x_i)} \int_a^b w(x) \frac{p_n(x)}{x - x_i} dx,$$

gdje su ℓ_i polinomi Lagrangeove baze, i te integrale treba naći egzaktno. Formule za težine mogu se dobiti za cijeli niz klasičnih ortogonalnih polinoma, ali njihovo računanje ovisi o specijalnim svojstvima, posebnim rekurzijama i identitetima oblika Christoffel–Darbouxovog. Obzirom na duljinu ovih izvoda, zadovoljimo se s kratkim opisom nekoliko najpoznatijih Gaussovih formula.

Gauss–Laguerreove formule

Formule oblika

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

zovu se **Gauss–Laguerreove formule**. Čvorovi integracije su nultočke polinoma \tilde{L}_n definiranih Rodriguesovom formulom

$$\tilde{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}),$$

a težine u Gaussovoj formuli su

$$\begin{aligned} w_i &= \frac{[(n-1)!]^2 x_i}{[n\tilde{L}_{n-1}(x_i)]^2} = \frac{(n!)^2 x_i}{[\tilde{L}_{n+1}(x_i)]^2} \\ &= -\frac{[(n-1)!]^2}{\tilde{L}'_n(x_i) \tilde{L}_{n-1}(x_i)} = \frac{(n!)^2}{\tilde{L}'_n(x_i) \tilde{L}_{n+1}(x_i)} \\ &= \frac{(n!)^2}{x_i [\tilde{L}'_n(x_i)]^2}. \end{aligned}$$

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

Formule oblika

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

zovu se **Gauss–Hermiteove formule**. Čvorovi integracije su nultočke polinoma H_n definiranih Rodriguesovom formulom

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

a težine u Gaussovoj formuli su

$$\begin{aligned} w_i &= \frac{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}{n[H_{n-1}(x_i)]^2} = \frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{[H_{n+1}(x_i)]^2} \\ &= \frac{2^n(n-1)! \sqrt{\pi}}{H'_n(x_i) H_{n-1}(x_i)} = -\frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{H'_n(x_i) H_{n+1}(x_i)} \\ &= \frac{2^{n+1}n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_i)]^2}. \end{aligned}$$

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

Formule oblika

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

zovu se **Gauss–Čebiševljeve formule**. Čvorovi integracije su nultočke Čebiševljevih polinoma $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$. Izuzetno, te se nultočke mogu eksplicitno izračunati

$$x_i = \cos\left(\frac{(2i-1)\pi}{2n}\right).$$

Sve težine w_i su jednake

$$w_i = \frac{\pi}{n}.$$

Greška kod numeričke integracije dana je formulom

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

Zadatak 1.5.5. Neka je težinska funkcija $w(x) = (x-a)^\alpha(b-x)^\beta$ na intervalu (a, b) , gdje su $\alpha > -1$ i $\beta > -1$. Nađite funkciju U_r i napišite Rodriguesovu formulu! Pridruženi ortogonalni polinomi zovu se **Jacobijevi polinomi**. Legendreovi i Čebiševljevi polinomi specijalni su slučaj.

Pomoću Gaussovih formula možemo jednostavno računati neke određene integrale analitički, kao što se vidi iz sljedećih primjera.

Primjer 1.5.7. *Ako Gauss–Laguerreovom formulom reda $n = 1$ računamo integral*

$$\int_0^{\infty} e^{-x} dx,$$

imamo približnu formulu

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx \approx f(1),$$

budući da je $\tilde{L}_1(x) = 1 - x$, pa je $x_1 = 1$ i $w_1 = 1/[\tilde{L}'(1)]^2 = 1$. Kako formula egzaktno integrira konstante, za $f(x) = 1$ imamo

$$\int_0^{\infty} e^{-x} dx = f(1) = 1.$$

Slično, za $f(x) = ax + b$, budući da formula egzaktno integrira i linearne funkcije,

$$\int_0^{\infty} e^{-x} (ax + b) dx = f(1) = a + b.$$

Primjer 1.5.8. *Ako Gauss–Čebiševljevom formulom računamo*

$$\int_{-1}^1 \frac{x^4}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

zgodno je upotrijebiti formulu Gauss–Čebiševa reda 3, koja zahtijeva nultočke polinoma $T_3(x) = 4x^3 - 3x$, a to su $x_1 = 0$, $x_{2,3} = \pm\sqrt{3}/2$. Formula vodi na egzaktn rezultat

$$\int_{-1}^1 \frac{x^4}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{3} \left(0 + \frac{9}{16} + \frac{9}{16} \right) = \frac{3\pi}{8}.$$

2. Metode za rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi

2.1. Uvod

Promatrat ćemo inicijalni (početni ili Cauchyjev) problem za običnu diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{dy}{dx} = f(y, x), \quad y(x_0) = y_0, \quad (2.1.1)$$

pri čemu pretpostavljamo da je funkcija $f(y, x)$ neprekidna na vremenskom intervalu $x_0 \leq x \leq b$ i za $-\infty < y < \infty$.

Ideja numeričkog rješavanja je zamjena neprekidnog rješenja u vremenskom intervalu $[x_0, b]$ približnim rješenjima u konačnom skupu točaka $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$. Obzirom na to iz koliko prethodnih točaka računamo novu aproksimaciju y_i u točki x_i , razlikujemo

- (a) jednokoračne metode (takve su na primjer Runge–Kutta metode) – aproksimacija u y_i računa se samo iz vrijednosti aproksimacije u x_{i-1} ;
- (b) višekoračne metode (takvi su na primjer prediktor–korektor parovi: Adams–Bashfort metoda kao prediktor, Adams–Moulton kao korektor) – aproksimacija u y_i računa se iz vrijednosti u više prethodnih točaka $x_k, x_{k+1}, \dots, x_{i-1}$.

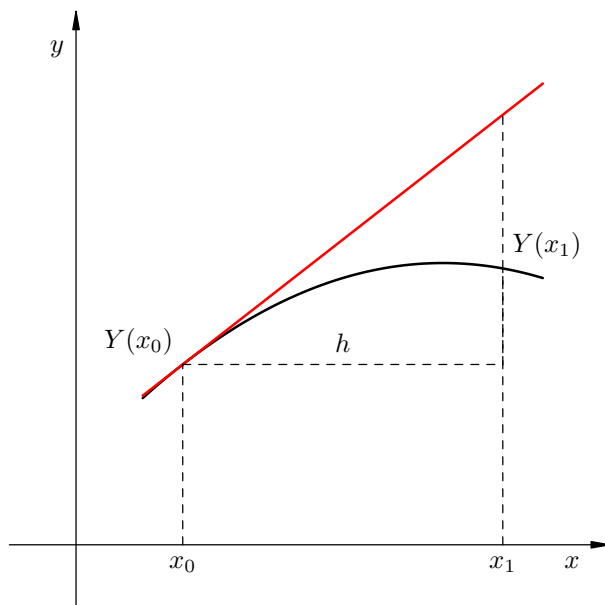
Označimo s $Y(x)$ pravo rješenje diferencijalne jednadžbe, a s $y(x)$ aproksimaciju rješenja. Bez smanjenja općenitosti, za izvod metoda možemo koristiti da su točke x_j ekvidistantne, tj. da vrijedi $h = x_j - x_{j-1}$, odnosno

$$x_j = x_0 + jh, \quad j = 0, 1, \dots,$$

2.2. Runge–Kutta metode

Najjednostavnija metoda iz obitelji Runge–Kutta metoda je Runge–Kutta metoda prvog reda, poznatija po imenom Eulerova metoda. Izvod Eulerove metode

može se napraviti na (barem) dva načina. Prvi je lako shvatljiv, jer ima geometrijsku pozadinu, a generalizacija drugog načina dat će nam ideju za izvod Runge–Kutta metoda viših redova.



Povucimo u točki x_0 tangentu na pravo rješenje $Y(x)$. Koristeći vrijednost te tangente u x_1 dobit ćemo željenu aproksimaciju u x_1 . Imamo

$$\frac{\Delta Y}{h} = \frac{Y(x_1) - Y(x_0)}{h} \approx Y'(x_0) = f(x_0, y_0),$$

ili na drugi način zapisano:

$$Y(x_1) - Y(x_0) \approx hY'(x_0) = hf(x_0, y_0).$$

Jasno je da će se na sličan način dobivati i aproksimacije za rješenja u točkama x_2, \dots, x_N .

Dakle, Eulerova metoda glasi:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots,$$

Također je jasno da ako su točke x_j neekvidistantne, u prethodnoj formuli umjesto h treba pisati h_n – varijabilna duljina koraka.

Eulerova metoda se, kao što smo već rekli može izvesti i na drugi način. Funkcija Y razvije se u Taylorov red (do prvog člana) oko točke x_n :

$$Y(x) = Y(x_n) + Y'(x_n)(x - x_n) + Y''(\xi_n) \frac{(x - x_n)^2}{2},$$

pri čemu točka ξ_n se nalazi između x_n i x . Uvrštavanjem točke x_{n+1} u prethodnu formulu dobivamo:

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + hY'(x_n) + Y''(\xi_n)\frac{h^2}{2}, \quad x_n \leq \xi_n \leq x_{n+1}.$$

Primijetimo da odavde slijedi da je greška aproksimacije u jednom koraku Eulerove metode $\mathcal{O}(h^2)$. Primijenimo li više koraka metode, greška se “nakupi” do $\mathcal{O}(h)$ – dakle maksimalan red metode je 1 (eksponent od h).

Općenito, Runge–Kutta metode imaju oblik

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^p w_i k_i \tag{2.2.1}$$

gdje su w_i konstante, a k_i je

$$k_i = h_n f(x_n + \alpha_i h_n, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j),$$

pri čemu je $\alpha_1 = 0$. Ostali w_i , α_i , β_{ij} određuju se tako da formula što bolje aproksimira rješenje diferencijalne jednadžbe. Razvijemo li lijevu i desnu stranu u (2.2.1) u Taylorov red oko točke x_n i ako izjednačavamo prvih m koeficijenata uz h_n^r , dobivamo da ne možemo izjednačiti više od $m = p$ prvih koeficijenata. Rezultirajuća formula zove se RK (Runge–Kutta) metoda reda m . Uglavnom se promatraju RK metode do reda $m = 4$ zbog toga što je

$$\frac{\text{broj računanja funkcije}}{\text{maksimalan red metode}} \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ \hline 1 & 2 & 3 & 4 & 4 & 5 & 6 & 6 \\ \hline \end{array}.$$

Za fiksni m može postojati više RK metoda. Tako za $m = 2$ dobivamo uvjete

$$w_1 + w_2 = 1, \quad \alpha_2 w_2 = \frac{1}{2}, \quad \beta_{21} = \alpha_2.$$

Interesantne RK–2 metode imaju $\alpha_2 = \frac{1}{2}, \frac{2}{3}$ i 1. Mi ćemo koristiti samo onu za $\alpha = 1$, koja glasi

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

gdje je

$$\begin{aligned} k_1 &= h_n f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h_n f(x_n + h_n, y_n + k_1). \end{aligned}$$

Pogreška za jedan korak RK–2 metode je $\mathcal{O}(h^3)$, dok je za više koraka $\mathcal{O}(h^2)$.

Na sličan način, može se pokazati da postoji više RK metoda četvrtog reda, od kojih je najpoznatija

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

gdje je

$$\begin{aligned} k_1 &= h_n f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= h_n f(x_n + h_n, y_n + k_3). \end{aligned}$$

Pogreška za jedan korak RK–4 metode je $\mathcal{O}(h^5)$, dok je za više koraka $\mathcal{O}(h^4)$.

2.2.1. Varijabilni korak za Runge–Kutta metode

Slično kao kod Rombergovog algoritma, promatra se RK metoda s korakom h i $h/2$. Nakon toga, napravi se 1 korak RK metode s korakom h i 2 koraka metode s korakom $h/2$ (da se dođe u istu točku). Ideja je napraviti slijedeće:

- (a) ako se vrijednosti tako dobivenih aproksimacija “dosta razlikuju”, onda se korak smanji na $h = h/2$ i procedura se ponovi za $h/2$ i $h/4$ (oprez od neprekidnog smanjivanja koraka!!);
- (b) ako su vrijednosti tako dobivenih aproksimacije bliske, prihvaća se tako izračunata vrijednost, a iz ocjene pogreške predviđa se h za slijedeći korak metode.

Korist od varijabilnog koraka je da se za neke funkcije s puno manje računanja može dobiti rješenje na zadovoljavajuću točnost, nego kod fiksnog koraka (koji ne kontrolira točnost).

2.2.2. Runge–Kutta metode za sustave jednadžbi

Runge–Kutta metode mogu se koristiti za približno rješavanje sistema diferencijalnih jednadžbi i za približno rješavanje diferencijalnih jednadžbi viših redova.

Treba samo primijetiti da u slučaju sistema diferencijalnih jednadžbi, veličine y_n , k_i i $f(x, y)$ imaju ulogu vektora, a ostale veličine su skalari. Može se pokazati da se jednostavnim zamjenama varijabli svaka diferencijalna jednadžba višeg reda može svesti na sistem prvog reda.

Primjer 2.2.1. Svedite na sistem diferencijalnih jednadžbi prvog reda i riješite RK–2 metodom s korakom $h = 0.1$ diferencijalnu jednadžbu

$$y'' + 2y' + 3x = 5, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 2$$

u točki $x = 0.1$.

Označimo s $z = y'$. Deriviranjem i uvrštavanjem u polaznu jednadžbu dobivamo sistem diferencijalnih jednadžbi

$$\begin{aligned} y' &= z \\ z' &= 5 - 2z - 3x \end{aligned}$$

uz početne uvjete $y(0) = 1$, $z(0) = 2$. Rješenje zadatka dobivamo odmah u prvom koraku

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} k_{11} \\ k_{12} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} k_{21} \\ k_{22} \end{bmatrix} \right).$$

Uočimo da je

$$\begin{bmatrix} y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ 5 - 2z - 3x \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} y(0) \\ z(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Odatle, po formuli za RK–2 slijedi

$$\begin{bmatrix} k_{11} \\ k_{12} \end{bmatrix} = 0.1 \begin{bmatrix} 2 \\ 5 - 2 \cdot 2 - 3 \cdot 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.1 \end{bmatrix}.$$

Jednako tako, imamo

$$\begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} k_{11} \\ k_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.2 \\ 2.1 \end{bmatrix},$$

odakle izračunavamo k_2

$$\begin{bmatrix} k_{21} \\ k_{22} \end{bmatrix} = 0.1 \begin{bmatrix} 2.1 \\ 5 - 2 \cdot 2.1 - 3 \cdot 0.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.21 \\ 0.05 \end{bmatrix}.$$

Sve zajedno daje

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.21 \\ 0.05 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 1.205 \\ 2.075 \end{bmatrix},$$

što znači $y(0.1) \approx 1.205$ i $z(0.1) = y'(0.1) \approx 2.075$.

2.3. Višekoračne metode

Koriste se jer zahtijevaju manje izvrednjavanja funkcije nego RK metode. Na primjer, jedan prediktor–korektor (PC) par (samo ime mu kaže i ulogu) reda 4 je:

prediktor

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24}(55f(x_n, y_n) - 59f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 37f(x_{n-2}, y_{n-2}) - 9f(x_{n-3}, y_{n-3}))$$

korektor

$$y_{n+1}^{(j)} = y_n + \frac{h}{24}(9f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}) - 19f(x_n, y_n) - 5f(x_{n-1}, y_{n-1}) + f(x_{n-2}, y_{n-2})).$$

Ako se korektor koristi jednom (očito je moguća i višestruka upotreba), onda se za novi korak računaju točno dvije funkcijske vrijednosti: $f(x_n, y_n)$ i $f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)})$, a sve ostale su već morale biti izračunane u prethodnim koracima. (Uočite da odgovarajuća RK-4 ima 4 izvrednjavanja funkcije.) Neugoda korištenja višekoračnih metoda su točke potrebne za start metode. U našem slučaju PC para reda 4 za start metode potrebno je znanje funkcijskih vrijednosti u točkama x_0, x_1, x_2 i x_3 .

2.4. Krute (stiff) diferencijalne jednadžbe

Najvažnija upotreba višekoračnih metoda je rješavanje (sistema) krutih diferencijalnih jednadžbi. Najpoznatija metoda poznata je kao Gearova metoda (po Williamu C. Gear-u) i sastoji se od Adams prediktora i korektora varijabilnog reda i varijabilnog koraka.

Za diferencijalnu jednadžbu reći ćemo da je kruta, ako mala perturbacija početnih uvjeta dovede do velike perturbacije u rješenju problema.

Primjer 2.4.1. *Zadana je diferencijalna jednadžba*

$$y' = 10(y - x) - 9, \quad y(0) = 1.$$

Opće rješenje ove diferencijalne jednadžbe je

$$y(x) = ce^{10x} + x + 1.$$

Partikularno rješenje za ovaj početni uvjet je

$$y = x + 1.$$

Ako malo perturbiramo početni uvjet na $y(0) = 1 + \varepsilon$, onda je partikularno rješenje te jednadžbe

$$y = \varepsilon e^{10x} + x + 1.$$

Primijetite da je prvi faktor s desne strane dominirajući za malo veće x . Što će se u računalu dogoditi s tom jednadžbom? Greške zaokruživanja i pogreške u svakom koraku metode djelovat će kao perturbacija početnih uvjeta, pa će se RK i slične metode “raspasti” – rezultati neće imati nikakve veze s pravim rješenjem.

3. Rubni problem za obične diferencijalne jednađbe

Iz tradicionalnih razloga, kod rubnih problema za diferencijalne jednađbe varijable se označavaju s x (prostorna) i t (vremenska dimenzija).

Pretpostavimo da je zadana diferencijalna jednađba drugog reda

$$\ddot{x} - p(t)\dot{x} - r(t)x = q(t) \quad (3.0.1)$$

uz rubne uvjete

$$\begin{aligned} x(a) &= x_a \\ x(b) &= x_b. \end{aligned}$$

3.1. Egizstencija i jedinstvenost rješenja

Za rubni problem nije osigurana niti egzistencija niti jedinstvenost rješenja. Pokađimo to na jednostavnom primjeru koji znamo egzaktno riješiti.

Primjer 3.1.1. *Zadana je diferencijalna jednađba*

$$\ddot{x} + x = 0$$

uz rubne uvjete

$$\begin{aligned} x(0) &= 1 \\ x(\pi) &= 0. \end{aligned}$$

Opće rješenje zadane ODJ je

$$x(t) = a \cos t + b \sin t.$$

Uvrštavanjem rubnih uvjeta dobivamo kontradikciju,

$$\begin{aligned} x(0) &= 1 = a \\ x(\pi) &= 0 = -a, \end{aligned}$$

pa očito ovaj problem nema rješenja. Ako rubne uvjete promijenimo u

$$x(0) = 0$$

$$x(\pi) = 0$$

uočimo da su rješenja ovog rubnog problema oblika

$$x(t) = b \sin t, \quad b \in \mathbb{R}.$$

3.2. Metoda gađanja za linearne diferencijalne jednačbe 2. reda

Svaku diferencijalnu jednačbu drugog reda možemo zapisati kao sistem jednačbi prvog reda, tako da se uvede $\dot{x} = y$. Tada jednačba (3.0.1) glasi

$$\dot{x} = y$$

$$\dot{y} = p(t)y + r(t)x + q(t)$$

a odgovarajući rubni uvjeti su

$$x(a) = x_a$$

$$y(a) = \dot{x}(a) = ???.$$

Očito je da taj rubni uvjet treba izvući iz informacije $x(b) = x_b$.

Pretpostavimo da prvi puta za $\dot{x}(a)$ stavimo

$$\dot{x}(a) = s_1, \quad s_1 \in \mathbb{R} \quad \text{proizvoljan}$$

i da uz tu pretpostavku riješimo inicijalni problem i njegovo rješenje označimo s $v(t)$. Drugi puta za $\dot{x}(a)$ stavimo

$$\dot{x}(a) = s_2, \quad s_2 \in \mathbb{R} \quad \text{proizvoljan}$$

i da uz tu pretpostavku riješimo inicijalni problem i njegovo rješenje označimo s $w(t)$. Zbog linearnosti jednačbe, linearna kombinacija rješenja v i w je opet rješenje, pa odaberimo takvu kombinaciju da vrijedi $x(b) = x_b$. Uočimo da oba rješenja poštuju da je $x(a) = x_a$, pa linearnu kombinaciju rješenja možemo pisati u obliku

$$x(t) = \lambda v(t) + (1 - \lambda)w(t)$$

Ako uvrstimo

$$x_b = x(b) = \lambda v(b) + (1 - \lambda)w(b)$$

dobivamo

$$\lambda = \frac{x_b - w(b)}{v(b) - w(b)}$$

i time je zadovoljen rubni uvjet $x(b) = x_b$.

3.3. Nelinearna metoda gađanja

Ako imamo nelinearnu jednadžbu 2. reda, na pr.:

$$\ddot{x} - \left(1 - \frac{t}{2}\right)\dot{x}x = t \quad (3.3.1)$$

uz rubne uvjete

$$x(1) = 2$$

$$x(3) = -1$$

zapišimo je, također u obliku sistema ODJ. Ponovno, kao i kod linearne metode gađanja, pretpostavimo da je

$$\begin{aligned} \dot{x}(1) &= s_1 \quad \text{rješenje } v(t) \\ \dot{x}(1) &= s_2 \quad \text{rješenje } w(t). \end{aligned}$$

Zbog nelinearnosti više ne vrijedi argument linearne kombinacije rješenja, pa se do pravog rješenja može stići iterativno.

U točki 3 rješenja su za $(s_1, v(3))$ i $(s_2, w(3))$, a mi želimo da bude $(s_t, -1)$. Nakon toga, ako $v(3)$ ili $w(3)$ nije -1 , napravi se linearna interpolacija kroz točke $(s_1, v(3))$ i $(s_2, w(3))$

$$y - v(3) = \frac{w(3) - v(3)}{s_2 - s_1}(s - s_1).$$

Želimo da bude $y = -1$, pa odatle izračunamo s , što je nova aproksimacija za s_t , tj. uzme se $\dot{x}(1) = s$. Ovaj proces, ako se ponovi, može, ali i ne mora konvergirati.

3.4. Metoda konačnih razlika

Pretpostavimo da je ponovno zadana ODJ (3.0.1) uz rubne uvjete

$$x(a) = x_a = \text{oznaka} = x_0$$

$$x(b) = x_b = \text{oznaka} = x_n.$$

Izaberimo mrežu ekvidistantnih točaka $t_0 = a, t_1, \dots, t_n = b$ u kojima želimo aproksimirati rješenje rubnog problema. Označimo te aproksimacije s x_0, x_1, \dots, x_n .

Prva derivacija aproksimira se simetričnom (centralnom) razlikom

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} \Big|_{t=t_i} = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h}$$

gdje je $h = (b - a)/n$.

Objasnimo zašto je simetrična razlika bolja nego obična podijeljena razlika. Ako su točke t_i ekvidistantne, onda Taylorov razvoj u okolini t_i glasi

$$x(t) = x(t_i) + \dot{x}(t_i)(t - t_i) + \ddot{x}(t_i)\frac{(t - t_i)^2}{2!} + x^{(3)}(\xi)\frac{(t - t_i)^3}{3!}, \quad (3.4.1)$$

gdje je ξ neka točka između t i t_i . Uvrštavanjem u taj razvoj redom $t = t_{i+1} = t_i + h$, a zatim $t = t_{i-1} = t_i - h$ dobivamo

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + \dot{x}(t_i)h + \ddot{x}(t_i)\frac{h^2}{2!} + x^{(3)}(\xi)\frac{h^3}{3!} \\ x(t_{i-1}) &= x(t_i) - \dot{x}(t_i)h + \ddot{x}(t_i)\frac{h^2}{2!} - x^{(3)}(\xi)\frac{h^3}{3!}, \end{aligned}$$

pa oduzimanjem i dijeljenjem s $2h$ dobivamo

$$\frac{x(t_{i+1}) - x(t_{i-1})}{2h} = \dot{x}(t_i) + \mathcal{O}(h^2).$$

Da smo u istu formulu (3.4.1) uvrstili samo t_i i t_{i+1} , dobili bismo

$$\frac{x(t_{i+1}) - x(t_i)}{h} = \dot{x}(t_i) + \mathcal{O}(h),$$

što je za red veličine lošije!

Drugu derivaciju aproksimiramo drugom podijeljenom razlikom (podijeljena razlika dvije susjedne prve podijeljene razlike).

$$\begin{aligned} \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_i} &= \frac{x_{i+1} - x_i}{h} \\ \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_{i-1}} &= \frac{x_i - x_{i-1}}{h}. \end{aligned}$$

Tada je

$$\ddot{x} = \left. \frac{d^2x}{dt^2} \right|_{t=t_i} = \frac{\dot{x}(t = t_i) - \dot{x}(t = t_{i-1})}{h} = \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2}.$$

Oдавde se, uvrštavanjem u diferencijalnu jednadžbu i sređivanjem po x_{i-1} , x_i i x_{i+1} dobije trodijagonalni linearni sistem za točke t_i , $i = 1, \dots, n - 1$

$$\frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2} - p(t_i)\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h} - r(t_i)x_i = q(t_i).$$

Greška metode je $c \cdot h^2$, $c \in \mathbb{R}$, dok greška metode kod metode gađanja ovisi o izabranom RK metodi (RK-4 – greška $c \cdot h^4$).

4. Rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednađbi

4.1. Paraboličke PDJ — Provođenje topline

Parabolička diferencijalna jednađba ima oblik

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{c\rho}{k} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (4.1.1)$$

uz rubne uvjete

$$u(0, t) = c_1(t)$$

$$u(L, t) = c_2(t)$$

i početni uvjet

$$u(x, 0) = f(x) \quad \text{ili} \quad \frac{\partial u}{\partial x}(x, 0) = g(x).$$

4.1.1. Eksplicitna metoda

Kao i kod rubnog problema za ODJ, aproksimirajmo derivacije na slijedeći način:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_i, t=t_j} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2}$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x=x_i, t=t_j} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t}.$$

Uvrštavanjem dobivamo

$$u_i^{j+1} = \frac{k\Delta t}{c\rho(\Delta x)^2}(u_{i+1}^j + u_{i-1}^j) + \left(1 - \frac{2k\Delta t}{c\rho(\Delta x)^2}\right)u_i^j.$$

Rješenje u $j + 1$ -om trenutku računa se eksplicitno iz onog u j -tom.

Označimo s

$$r = \frac{k\Delta t}{c\rho(\Delta x)^2}.$$

Zbog stabilnosti rješenja dif. jednadžbe nužno je uzeti $r \leq 1/2$. Ovime se određuje omjer vremenskih i prostornih koraka. Ako je početni uvjet glatka funkcija, može se pokazati da je pogreška najmanja ako se uzma $r = 1/6$.

Primjer 4.1.1. *Pretpostavimo da dvije velike željezne ploče debele 1 cm s linearno rasprostranjenom temperaturom od 0° – 100° naglo spojimo toplijim krajevima, a rubove tih ploča držimo na 0° . Što će se s pločom događati tokom vremena?*

U početnom trenutku ploče su zagrijane tako da je raspodjela temperature (po debljini)

$$f(x, 0) = \begin{cases} 100x & \text{za } 0 \leq x \leq 1, \\ 100(2 - x) & \text{za } 1 \leq x \leq 2. \end{cases}$$

Na krajevima ploča vrijede rubni uvjeti $u(0, t) = 0$ i $u(2, t) = 0$.

Fizikalno je jasno da će se na krajevima toplina gubiti, a temperatura polako ravnomjerno raspoređivati širom ploče. Ovakvo stanje ploče opisivat će jednadžba provođenja (4.1.1). Veličine c , ρ i k su konstante željeza: k vodljivost, c toplinski kapacitet i ρ gustoća materijala.

Jednadžbu ćemo riješiti eksplisitnom metodom. Budući da početni uvjet nije glatka funkcija (ima lom derivacije u 1), može se pokazati da je na pr. $r = 0.4$ točnije rješenje nego za $r = 1/6$.

Primjer 4.1.2. *Pretpostavimo da je $k = c = \rho = 1$ u (4.1.1), tj. da rješavamo paraboličku jednadžbu (4.1.1) uz uvjete uz rubne uvjete*

$$u(0, t) = 0$$

$$u(\pi, t) = 0$$

i početni uvjet

$$u(x, 0) = \sin x,$$

što je glatka funkcija. Tada će najbolji r biti $r = 1/6$. Osim toga, za ovu jednadžbu poznato je i pravo rješenje

$$u(x, t) = e^{-t} \sin x$$

pa se mogu uspoređivati greške.

4.1.2. Crank–Nicolsonova metoda

Razmatra se jednadžba provođenja uz iste rubne i početne uvjete kao i prije. Ako derivacije u (4.1.1) zamijenimo na slijedeći način

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \right) = \frac{c\rho}{k} \left(\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} \right)$$

dobili smo Crank–Nicolsonovu metodu. Ako r označimo istu konstantu kao i prije, može se pokazati da je ova metoda stabilna za razne r , pa se može uzeti $r = 1$. Tada se metoda pojednostavljuje na

$$-u_{i-1}^{j+1} + 4u_i^{j+1} - u_{i+1}^{j+1} = u_{i-1}^j + u_{i+1}^j$$

što daje trodijagonalni sistem (za vremenski korak). Rješenja ovom metodom nešto lošija po točnosti od najbolje eksplicitne, ali se metoda jednostavno može poboljšati (Douglasova shema).

4.2. Hiperboličke PDJ — Valna jednadžba

Hiperbolička diferencijalna jednadžba ima oblik

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{Tg}{w} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.2.1)$$

uz rubne uvjete

$$u(0, t) = c_1(t)$$

$$u(L, t) = c_2(t)$$

i početni položaj i početnu brzinu

$$u(x, 0) = f(x)$$

$$\frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = g(x)$$

gdje je g težina žice, T napetost i w linearna gustoća. Katkada se konstanta Tg/w označava s c^2 .

4.2.1. Eksplicitna metoda

Derivacije se aproksimiraju na isti način kao i kod parabolike PDJ. Uvrštavanjem u jednadžbu dobivamo:

$$\frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{(\Delta t)^2} = c^2 \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2}.$$

Označimo s

$$r = \frac{c^2(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2}.$$

Može se pokazati da je ova shema stabilna, pa se može uzeti $r = 1$ (tada je $\Delta x = c\Delta t$). U tom slučaju prethodno eksplicitno rješenje se pojednostavi na

$$u_i^{j+1} = u_{i+1}^j + u_{i-1}^j - u_i^{j-1} \quad (4.2.2)$$

uz početne uvjete

$$u_i^0 = f(x_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Uočite da nam je za start sistema potrebno i u_i^{-1} . To se može naći na jedan od slijedećih načina:

(a) brzina se aproksimira prvom centralnom razlikom, pa je

$$u_i^{-1} = u_i^1 - 2g(x_i)\Delta t$$

(b) zna se egzaktno rješenje jednadžbe iz početnih uvjeta (D'Alembertova formula)

$$u(x, t) = \frac{1}{2}[f(x - ct) + f(x + ct)] + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(\tau) d\tau.$$

Ako se uvaži da je $\Delta x = c\Delta t$ i da je u prvom trenutku t jednak $t = \Delta t$, može se izračunati u_i^1 . Uvrštavanjem u prethodnu formulu dobiva se

$$\begin{aligned} u_i^1 = u(x_i, \Delta t) &= \frac{1}{2}[u_{i-1}^0 + u_{i+1}^0] + \frac{1}{2c} \int_{x_i - \Delta x}^{x_i + \Delta x} g(\tau) d\tau \\ &= \frac{1}{2}[u_{i-1}^0 + u_{i+1}^0] + \frac{1}{2c} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} g(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

Posljednji integral može se aproksimirati Simpsonovom formulom. Primijetite da sada možemo startati računanje u_i^2 , jer imamo u_i^0 i u_i^1 . Drugim riječima, ovdje nam u_i^{-1} uopće nije potreban.

Primjer 4.2.1. *Žica bendža dugačka je 80 cm, teška 1 g. Napeta je silom jednakom težini mase od 40 kg. Cijelo vrijeme je učvršćena na oba kraja. U točki udaljenoj 20 cm od lijevog kraja iz ravnotežnog položaja povučemo žicu 0.6 cm prema gore. Nađite otklon žice u svakom trenutku t , nađite koliko joj je vremena potrebno za jedan kompletan period. Nađite frekvenciju titranja!*

Žica očito zadovoljava jednadžbu (4.2.1) uz uz rubne uvjete

$$\begin{aligned} u(0, t) &= 0 \\ u(80, t) &= 0 \end{aligned}$$

i početni položaj i početnu brzinu

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= \begin{cases} 0.03x & \text{za } 0 \leq x \leq 20 \\ -0.01x + 0.8 & \text{za } 20 \leq x \leq 80, \end{cases} \\ \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} &= 0. \end{aligned}$$

Primjer 4.2.2. *Neka je $c = 2$ u jednadžbi (4.2.1). Ako žicu dugu 9 jedinica udarimo u ravnotežnom položaju brzinom (vidi dolje), dobivamo uvjete*

$$u(0, t) = 0$$

$$u(9, t) = 0$$

i

$$u(x, 0) = 0$$

$$\frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = 3 \sin \frac{\pi x}{9}.$$

Ponovno, zgodno je promatrati greške u rješenju, jer se zna da je pravo rješenje jednako

$$u(x, t) = \frac{27}{8\pi} \left(\cos \left(\frac{\pi x}{9} - \frac{4\pi t}{9} \right) - \cos \left(\frac{\pi x}{9} + \frac{4\pi t}{9} \right) \right).$$