Gaussove kvadraturne formule za numeričku integraciju

Jaganjac, Danijela

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Danijela Jaganjac

Gaussove kvadraturne formule za numeričku integraciju

Završni rad

Osijek, 2017.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Danijela Jaganjac

Gaussove kvadraturne formule za numeričku integraciju

Završni rad

Voditelj: prof. dr. sc. Kristian Sabo

Osijek, 2017.

Sadržaj

Uvod **1**

1. Numeričke metode **2**

1.1 Trapezna formula 2

1.1.1 Produljena trapezna formula 4

1.2 Newton-Cotesove formule 5

1.3 Simpsonova formula 6

1.3.1 Generalizirana Simpsonova formula 6

1.4 Ocjena pogreške kvadraturnih formula 6

2. Gaussove kvadraturne formule **9**

2.1 Opći oblik kvadraturne formule 9

2.2 Gauss-Legendreova formula 10

2.3 Ocjena pogreške Gaussove kvadraturne formule 15

3. Usporedba metoda **15**

Literatura **17**

Sažetak:

Tema ovog završnog rada je numerička integracija. U radu su ukratko pojašnjene trapezna formula, Newton-Cotesove formule i Simpsonova formula te su dane njihove ocjene pogreški. Glavni dio rada je usmjeren na Gaussove kvadraturne formule. Objasnit cemo ideju kojojm su nastale i izvesti njihov opci oblik. Detaljnije ce biti pojašnjena Gauss-Legendreova metoda za koju ćemo, koristeći teoriju Peanove jezgre, dati ocjenu pogreške. Na kraju cemo pomocu nekoliko konkretnih primjera usporediti sve navedene metode.

Ključne riječi: Numeriča integracija, Gaussove kvadraturne formule, Gauss-Legendreove kvadraturne formule, Peanova jezgra, ocjena pogreške

Abstract:

Subject of this final paper is numerical integration. In order to introduce methods for numerical integration, we will briefly describe trapezoidal rule, Newton-Cotes formulas and Simpson's rule, also we will state error bound for each method. Main focus of the paper will be Gaussian quadrature. We will explain the key idea underlying this method and derive general form of it. Gauss-Legendre quadrature will be explained in more detail. Applying Peano kernel theory we will obtain error bounds for this method. To sum up, there will be given few examples to compare how each methods works.

Key words: Numerical integration, Gaussian quadratures, Gauss-Legendre quadrature, Peano kernel, error estimates

Uvod

Ako je funkcija $f : I \to \mathbb{R}$ neprekidna i $F : I \to \mathbb{R}$ bilo koja primitivna funkcija funkcije f na I, onda za svaki segment $[a, b] \subseteq I$ vrijedi

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

Navedena formula se naziva Newton- Leibnizova formula i koristi se za računanje Reimanovog integrala funkcije f na segmentu $[a, b]$. U praksi se pokazalo da primjena Newton-Leibnizove formule vrlo često nije moguća. Razlog tome je što se za veliki broj funkcija ne može odrediti primitivna funkcija na elementaran način ili ju je vrlo teško pronaći. Nadalje, često se u primjeni funkcija f zadaje u obliku tabličnih podataka ili kao rješenje diferencijalne jednadžbe. Kako bismo izračunali integrale takvih funkcija, dolazi do potrebe za uvođenjem numeričkih metoda pomoću kojih aproksimiramo vrijednosti tih integrala.

U nastavku navodimo primjere nekoliko funkcija čije integrale možemo izračunati isključivo primjenom numeričkih metoda.

Primjer 0.1. *U teoriji vjerojatnosti se vrlo često pojavljuju integrali koji se ne daju rješiti eksplicitno nego je potrebno koristiti neke numeričke metode. Jedan od takvih primjera je funkcija distribucije standardne normalne distribucije koja se računa kao:*

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt, \quad x \in \mathbb{R}$$

Primjer 0.2. *Fresnelovi integrali, koji se označavaju kao funkcije $S(x)$ i $C(x)$, a primjena im je u fizici:*

$$S(x) = \int_0^x \sin t^2 dt$$

$$C(x) = \int_0^x \cos t^2 dt$$

Dakle, kada vrijednost integrala ne možemo egzaktno izračunati standardnim postupcima, koristimo numeričke metode.

1. Numeričke metode

Temeljna ideja svih metoda je izračunati aproksimaciju integrala

$$\int_a^b f(x)dx$$

koristeći vrijednosti funkcije u točkama x_i, gdje je $x_i \in [a, b]$ za $i = 0, 1, ..., n$.
Jedan od očiglednih načina rješavanja danog problema je aproksimiranje funkcije f s nekom jednostavnom funkcijom koja se lako integrira, najčešće interpolacijskim polinomom. Oznaka za aprokscimaciju integrala, u ovom radu, će biti I^*, a općenito ju možemo zapisati kao

$$I^* = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

Takav zapis se naziva numerička kvadraturna formula ili numerička integracijska formula. Sljedeći bitan pojam koji se pojavljuje je pogreška aproksimacije. Označavati ćemo ju s

$$E = I - I^*.$$

Za svaku metodu će biti definirana ocjena pogreške. U ovom poglavlju će ukratko biti objašnjeno trapezno pravilo i Newton-Coteseove formule, kako bismo ih nadalje u radu mogli uspoređivati s Gaussovim kvadraturnim formulama.

1.1 Trapezna formula

Neka je zadana funkcija $f : [a, b] \to \mathbb{R}$. Funkciju f ćemo zamjeniti interpolacijskim polinomom prvog stupnja p_1. Čvorovi interpolacije su krajnje točke segmenta

$$x_0 = a, x_1 = b.$$

Ako točke $(a, f(x))$ i $(b, f(b))$ uvrstimo u jednadžbu pravca, dobijemo sljedeće:

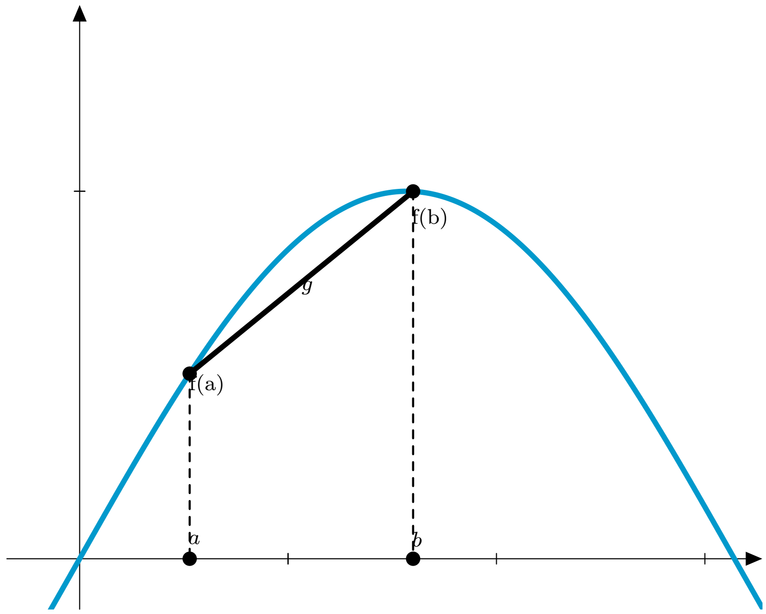
$$p_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a).$$

Tada je točna vrijednost integrala

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

a aproksimacija

$$I^* = \int_a^b p_1(x)dx = \frac{(f(b) - f(a))(b - a)}{2}.$$



Slika 1: Trapezno pravilo

Geometrijski promatrano, vrijednost integrala I^* je površina trapeza ispod pravca, vrijednost integrala I je površina ispod grafa funkcije f, a razlika između te dvije površine je pogreška metode. Kako bismo ocijenili pogrešku, bit će nam potreban sljedeći teorem.

Teorem 1.1 ([6])**.** *Neka je zadana funkcija* $f \in \mathbb{C}^{(n+1)}([a,b])$*, razdioba segmenta* $a = x_0 < x_1 < x_2 < ... < x_n = b$ *i neka za svaki* $i = 0, 1, ..., n$ *vrijedi* $y_i = f(x_i)$*. Neka je* $P_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ *odgovarajući interpolacijski polinom takav da* $P_n(x_i) = y_i$ *za svaki* $i = 0, 1, ..., n$*. Onda za svaki* $\overline{\mathrm{x}} \in [a,b]$ *postoji* $c \in < a, b >$ *takav da je*

$$f(\overline{\mathrm{x}}) - P_n(\overline{\mathrm{x}}) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} w(\overline{\mathrm{x}}),$$

gdje je $w(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$*.*

Dokaz. Ako je $\overline{\mathrm{x}} = x_i$, za neki i, onda slijedi

$$f(\overline{\mathrm{x}}) - p_n(\overline{\mathrm{x}}) = f(x_i) - p_n(x_i) = y_i - y_i = 0.$$

Time smo dokazali ovaj slučaj.
Nadalje, pretpostavimo da je $\overline{\mathrm{x}} \neq x_i$ za svaki $i = 0, 1, ..., n$. Definirajmo funkciju

$$g(x) = f(x) - p_n(x) - kw(x),$$

gdje ćemo konstantu k odrediti tako da je $g(\overline{\mathrm{x}}) = 0$.
Uočimo kako je za svaki $i = 0, 1, ..., n$ vrijedi $g(x_i) = 0$. Dakle funkcija g ima $n+2$ nultočke, prema Rolleovom teoremu g' ima barem $n+1$ nultočku, g'' barem n nultočki, itd. Na kraju dođemo do $(n+1)$-te derivacije funkcije g, koja ima barem jednu nultočku, tj. barem jednu točku $c \in < a, b >$ tako da je $g^{n+1}(c) = 0$.
Kada to uvrstimo u početnu definiciju funkcije g, dobijemo

$$g^{n+1}(c) = f^{n+1}(c) - P_n^{n+1}(c) - (kw(c))^{n+1} = 0.$$

Derivirajući $n+1$ puta, polinom P_n iščezava, a od polinoma w ostaje konstanta. Tako da imamo

$$f^{n+1}(c) - kw^{n+1}(c) = 0,$$

odnosno

$$k = \frac{f^{n+1}(c)}{(n+1)!}.$$

Odredili smo konstantu k tako da vrijedi početna jednakost

$$f(\overline{\mathrm{x}}) - P_n(\overline{\mathrm{x}}) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} w(\overline{\mathrm{x}}).$$

Na osnovu Teorema 1.1 možemo dati ocjenu pogreške za trapeznu formulu. □

Teorem 1.2 ([6]). *Neka je $f \in \mathbb{C}^2([a,b])$, tada postoji $c \in [a,b]$ takva da je*

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)^3}{12} f''(c).$$

Dokaz. Prema Teoremu 1.1 postoji $c \in [a,b]$ tako da je

$$\begin{aligned} E &= I - I^* \\ &= \int_a^b f(x) - p_1(x)dx \\ &= \int_a^b \frac{f''(c)}{2}(x-a)(x-b)dx. \end{aligned}$$

Integriranjem i sređivanjem izraza dobijemo:

$$E = I - I^* = -\frac{f''(c)}{12}(b-a)^3.$$

Za ocjenu pogreške možemo uzeti

$$I - I^* \leqslant \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \frac{(b-a)^3}{12} = \mathcal{M}_2 \frac{(b-a)^3}{12}.$$

□

1.1.1 Produljena trapezna formula

Neka su pretpostavke iste kao dosad, dakle, imamo funkciju f definiranu na segmentu $[a,b]$. Umjesto da funkciju aproksimiramo jednim pravcem kroz krajnje točke segmenta, podjelimo taj segment na n dijelova i taj postupak ponovimo na svakom podsegmentu. Na taj način ćemo dobiti produljenu trapeznu formulu.
Neka je podjela ekvidistantna, sa h označimo duljinu podsegmenta.

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

Promatramo proizvoljni segment $[x_{i-1}, x_i]$.

$$\begin{aligned} I_i^* &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} (y_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}})(x - x_{i-1})dx \\ &= \frac{h}{2}(y_{i-1} + y_i). \end{aligned}$$

Konačna aproksimacija funkcija je suma svih I_i^*

$$\begin{aligned} I^* &= \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + ... + (y_{n-1} + y_n) \\ &= \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + ... + 2y_{n-1} + y_n). \end{aligned}$$

Analogno navedenome, vrijedi da je ukupna pogreška jednaka zbroju pogrešaka na svakom podintervalu, stoga je

$$E = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(c).$$

1.2 Newton-Cotesove formule

Za ovu metodu potrebno je napraviti ekvidistantnu podjelu segmenta $[a, b]$

$$a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$$

tako da je duljina svakog dijela $h = \frac{b-a}{n}$. Dakle, za svaki $i = 0, ...n$, vrijedi $x_i = a + ih$. Zadanu funkciju $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ interpolirati ćemo u točkama $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), ..., (x_n, f(x_n))$. Koristit ćemo Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma.

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)p_i(x),$$

gdje je

$$p_k(x) = \prod_{i=0, i\neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Tada vrijedi

$$\begin{aligned} I^* &= \int_a^b p_n(x)dx \\ &= \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)p_i(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} \int_a^b f(x_i)p_i(x)dx \\ &= (b-a)\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\frac{1}{b-a}\int_a^b p_i(x)dx. \end{aligned}$$

Označimo $\omega_i = \frac{1}{b-a}\int_a^b p_i(x)dx$. Dakle aproksimacija integrala je

$$I^* = (b-a)\sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i).$$

Napomena 1.1. *Newton-Cotesova formula u slučaju $n = 1$ je trapezna formula.*

1.3 Simpsonova formula

Poseban slučaj Newton-Cotesove formule, kada je $n = 2$ se naziva Simpsonova[1] formula. Točke razdiobe su onda $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$. Polinomi ω_k se izračunaju i dobiju konstante $w_0 = \frac{1}{6}, w_1 = \frac{2}{3}, w_2 = \frac{1}{6}$.
Kada uvrstimo podatke, dobijemo sljedeću formulu

$$\begin{aligned} I^* &= (b-a)(\frac{1}{6}y_0 + \frac{2}{3}y_1 + \frac{1}{6}y_2) \\ &= \frac{(b-a)}{6}(y_0 + 4y_1 + y_2). \end{aligned}$$

1.3.1 Generalizirana Simpsonova formula

Simpsonovo pravilo se može generalizirati tako da se segment $[a, b]$ podijeli na n jednakih dijelova, pri čemu je n paran broj. Tako dobijemo formulu

$$I^* = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + ... + 4y_{n-1} + y_n).$$

Za ocjenu pogreške kod generalizirane Simpsonove formule vrijedi

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(b-a)}{180} \cdot h^4 \cdot f^{(4)}(c) \\ &\leq \frac{(b-a)}{180} \cdot h^4 \mathcal{M}_4 \end{aligned}$$

1.4 Ocjena pogreške kvadraturnih formula

Kako bi se dala ocjena za pogreške kvadraturnih formula, koriste se Peanove[2] jezgre. Definirati ćemo i kratko objasniti pojam Peanove jezgre. Za svaku dosad nabrojanu kvadraturnu formulu se posebno računa Peanova jezgra, budući da je postupak dosta složen, izostavit ćemo detalje i koristiti već izračunate Peanove jezgre.
Neka je

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

$$I^*(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

Tada je greška $E(f) = I(f) - I^*(f)$.

Teorem 1.3 ([8]). *Neka je E(p)=0* $\forall p \in \mathcal{P}_n$ *i neka je* $f \in C^{(n+2)}([a, b])$ *tada vrijedi*

$$E(f) = \int_a^b f^{(n+1)}(t)K(t)dt,$$

gdje je K Peanova jezgra definirana sa

$$K(t) = \frac{1}{n!}E_x((x-t)_+^n)$$

[1] Thomas Simpson (1710. – 1761.), britanski matematičar
[2] Giuseppe Peano (1858. – 1932.), talijanski matematičar

i

$$(x-t)_+^n = \begin{cases} (x-t)^n, & za\ x > t \\ 0, & inače \end{cases}$$

Kao što je već navedeno, računanje Peanovih jezgri može biti vrlo komplicirano stoga ćemo navesti samo jedan jednostavan primjer kako bismo bolje objasnili postupak.

Primjer 1.1 ([5]). *U cjelini 1.1. smo definirali metodu trapezne formule i dali ocjenu pogreške za nju, koja je glasila* $E(f) = I - I^* = -\frac{f''(c)}{12}(b-a)^3$.
Koristeći teoriju Peanovih jezgri vrijedi

$$E(f) = \int_a^b f^{(2)}(t)K(t)dt.$$

Zatim,

$$\begin{aligned} K(t)) &= E_x(x-t)_+ \\ &= I(x-t)_+ - I^*(x-t)_+. \end{aligned}$$

Prisjetimo se

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

i

$$I^* = \frac{f(a)(b-a)}{2} + \frac{f(b)(b-a)}{2}.$$

Iz čega slijedi

$$\begin{aligned} I(x-t)_+ - I^*(x-t)_+ &= \int_a^b (x-t)_+ dx - \sum_{i=0}^{1} \alpha_i (x_i - t)_+ \\ &= \frac{1}{2}(x-t)_+^2 \Big|_b^a - \frac{b-a}{2}(a-t)_+ - \frac{b-a}{2}(b-t)_+ \\ &= \frac{1}{2}((b-t)_+^2 - (a-t)_+^2) - \frac{b-a}{2}(a-t)_+ - \frac{b-a}{2}(b-t)_+ \\ &= \frac{1}{2}(b-t)(a-t). \end{aligned}$$

Vratimo se u početnu jednakost

$$\begin{aligned} E(f) &= \int_a^b f^{(2)}(t)K(t)dt \\ &= \int_a^b f^{(2)}(t)\frac{1}{2}(b-t)(a-t)dt \\ &= -\frac{f^{(2)}}{12}(b-a)^3. \end{aligned}$$

Uočimo kako smo dobili istu ocjenu pogreške kao i u prethodnom poglavlju.

Na kraju nam ostaje još dati ocjenu pogreške za Newton-Cotesovu metodu.

Teorem 1.4 ([4])**.** *Neka je zadana podjela segmenta* $[a, b]$ *na* n *jednakih dijelova gdje je* n *paran broj. Neka je* $f \in C^{n+2}([a, b])$. *Tada za pogrešku Newton-Cotesove formule vrijedi*

$$E(f) = \frac{K_n}{(n+2)!} f^{(n+2)}(c), \quad a < c < b;$$

gdje je

$$K_n = \int_a^b x\omega(x)dx < 0.$$

Teorem 1.5 ([4])**.** *Neka je zadana podjela segmenta* $[a, b]$ *na* n *jednakih dijelova gdje je* n *neparan broj. Neka je* $f \in C^{n+1}([a, b])$. *Tada za pogrešku Newton-Cotesove formule vrijedi*

$$E(f) = \frac{K_n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(c), \quad a < c < b;$$

gdje je

$$K_n = \int_a^b \omega(x)dx < 0.$$

2. Gaussove kvadraturne formule

U dosadašnjim metodama smo pomoću zadanih n čvorova točno računali vrijednosti integrala polinoma najviše $n-tog$ stupnja. Tako npr. trapezno pravilo računa točno površinu ispod pravca, a Simpsonova formula točno računa površinu ispod grafa polinoma 2. stupnja. Zanima nas možemo li konstruirati formule pomoću kojih točno računamo integrale polinoma stupnja višeg od interpolacijskog polinoma. Upravo to svojstvo će imati Gaussove kvadrature.

2.1 Opći oblik kvadraturne formule

Gaussove integracijske formule, općenito su oblika

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

gdje je w težinska funkcija, pozitivna ili barem nenegativna i integrabilna na $[a,b]$, w_i su težinski koeficijenti, a x_i čvorovi integracije. U radu ćemo koristiti specijalni slučaj, kada je $w \equiv 1$. Ovisno o izboru težinske funkcije, Gaussova formula poprima drugačiji oblik i naziv.

Tablica 1: Težinske funkcije.

težinska funkcija w	interval	formula
1	[-1,1]	Gauss-Legendre
$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	[-1,1]	Gauss-Chebyshev
e^{-t}	$[0,\infty\rangle$	Gauss-Laguerre
e^{-t^2}	$\langle -\infty,\infty\rangle$	Gauss-Hermit

Definicija 2.1. *Stupanj preciznosti kvadraturne formule je najveći broj $m \in \mathbb{N}$ takav da je $E(x^k) = 0$, za svaki $k = 0,1,...,m$, ali je $E(x^k+1) \neq 0$.*

Vrijednost integrala $I = \int_a^b f(x)dx$ aproksimiramo kvadraturnom formulom koja je općenito oblika

$$I^* = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

Želimo da je ta formula stupnja preciznosti m, dakle da vrijedi

$$\int_a^b x^k dx - \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^k = 0, \quad \text{za svaki} \quad k = 0,1,...,m.$$

Iz gornje jednakosti, dobijemo sustav s $m+1$ jednadžbom, i $2n$ nepoznanica, nepoznanice su koeficijenti w_i i čvorovi x_i. Kako bi sustav imao jedinstveno rješenje, želimo da broj jednadžbi bude jednak broju nepoznanica. Ako uzmemo da je $m = 2n-1$, dobijemo takav sustav. Stupanj preciznosti Gaussove kvadraturne formule će biti $2n-1$. Uočimo kako, razliku od prethodnih metoda, ovdje nemamo unaprijed zadane čvorove, nego ih računamo iz sustava.

Napomena 2.1. *Iz linearnosti integrala slijedi da ako formula točno računa potencije do $m-tog$ onda će točno računati i njihove linearne kombinacije, tj. polinome do $m-tog$ stupnja.*

Primjer 2.1. *Neka je $n = 2$, na segmentu $[-1, 1]$ izračunajmo kvadraturnu formulu. Sustav je zadan sa*

$$\int_{-1}^{1} x^k dx - w_1 x_1^k - w_2 x_2^k = 0, \quad za \quad k = 0, 1, 2, 3.$$

Za $k = 0$ imamo $w_1 + w_2 = 2$,
$k = 1$, $w_1 x_1 + w_2 x_2 = 0$,
$k = 2$, $w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 = \frac{2}{3}$,
$k = 3$, $w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 = 0$.

Rješavanjem gornjeg sustavam dobijemo $w_1 = w_2 = 1$, $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, x_2 = \frac{-1}{\sqrt{3}}$

Vidimo kako već za $n = 2$ rješavanje sustava nije trivijalno, tj. općenito sustavi neće biti linearni, stoga se umjesto standardnog rješavanja sustava koristi ideja koju je uveo C.F.Gauss[3].

2.2 Gauss-Legendreova formula

U tablici 1 je vidljivo kako, ovisno o izboru težinske funkcije i intervala, formula poprima drugačiji oblik. Koristit ćemo familiju koju čine Legendreovi polinomi, definirani na segmentu $[-1, 1]$. Kako postupak općenito ne bi ovisio o području integracije, koristit ćemo supstituciju

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{b+a}{2}$$

Iz čega slijedi

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(\frac{b-a}{2} t + \frac{b+a}{2})dt.$$

Uvest ćemo oznaku

$$\phi(t) = f(\frac{b-a}{2} t + \frac{b+a}{2}).$$

Koristeći navedene oznake i formulu (1) vrijedi

$$I^* = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i \phi(t_i).$$

Kao što smo već rekli, koeficijenti w_i i čvorovi t_i su nam nepoznanice. Čvorove ćemo računati kao nultočke Legendreovih polinoma.

Napomena 2.2. *Skup svih neprekidnih funkcija f na segmentu $[a, b]$ čini vektorski prostor s obzirom na standardne operacije zbrajanja i množenja funkcija skalarom. Neka su $f, g : [a, b] \to \mathbb{R}$ neprekidne, definirajmo preslikavanje koje svakom paru funkcija pridružuje skalar na sljedeći način*

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

Lako se provjeri kako ovako definirano preslikavanje zadovoljava sva svojstva skalarnog produkta.

[3]Carl Friedrich Gauss (1777 – 1855), njemački matematičar

Napomena 2.3. *Za dvije funkcije, $f, g : [a, b] \to \mathbb{R}$, kažemo da su međusobno ortogonalne ako vrijedi*

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

Jedna od metoda konstruiranja Legendreovih polinoma je Gram-Schmidtovim postupkom ortogonalizacije kanonske baze $1, t, t^2, ...$
Tako dobiveni polinomi su

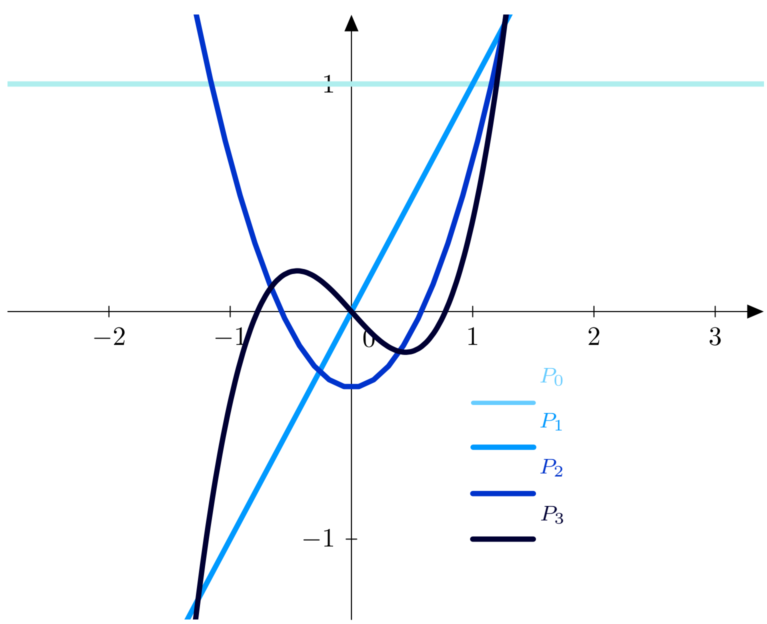
$$P_0(t) = 1$$

$$P_1(t) = t - \frac{(t, P_0)}{(P_0, P_0)} \cdot P_0(t) = t$$

$$P_2(t) = t^2 - \frac{(t^2, P_0)}{(P_0, P_0)} \cdot P_0(t) - \frac{(t^2, P_1)}{(P_1, P_1)} \cdot P_1(t) = ... = t^2 - \frac{1}{3}$$

$$P_3(t) = t^2 - \frac{(t^3, P_0)}{(P_0, P_0)} \cdot P_0(t) - \frac{(t^3, P_1)}{(P_1, P_1)} \cdot P_1(t) - \frac{(t^3, P_2)}{(P_2, P_2)} \cdot P_2(t) = ... = t^3 - \frac{3t}{5}$$

Čvorove integracije x_i računamo kao nultočke polinoma.



Slika 2: Grafički prikaz prva četiri Legendreova polinoma

Primjer 2.2. *Izračunajmo čvorove integracije za $n = 3$. Tražimo nultočke Legeondreovog polinoma P_3.*

$$P_3 = 0$$

$$t^3 - \frac{3t}{5} = 0$$

$$t(t^2 - \frac{3}{5}) = 0$$

Nultočke, odnosno čvorovi integracije su $t_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, t_2 = 0, t_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$.

Preostalo nam je još izračunati težinske koeficijente, w_i.
Neka su $x_i \in [-1, 1]$ i neka je

$$p_{n-1,i} = \frac{(x - x_1)...(x - x_{i-1})(x - x_{x+1})...(x - x_n)}{(x_i - x_1)...(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{1+1})...(x_i - x_n)}.$$

p_{n-1}, i su polinomi koji se pojavjuju u Lagrangeovoj interpolaciji, njihov stupanj je $n-1$, stoga Gaussova kvadraturna formula računa točno njihove integrale.

$$\int_{-1}^{1} p_{n-1,i} dx = \sum_{i=1}^{n} w_i p_{n-1,i}.$$

Vrijedi

$$p_{n-1,i}(x_j) = \delta_{i,j}$$

Iz čega slijedi

$$\int_{-1}^{1} p_{n-1,i} dx = w_i$$

Primjer 2.3. *Za $n = 3$ u primjeru 2.2 smo izračunali čvorove, izračunajmo sada težinske koeficijente prema formuli ...*

$$w_1 = \int_{-1}^{1} p_{2,1} dx = \int_{-1}^{1} \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} dx = \frac{5}{6} \int_{-1}^{1} (x^2 - \sqrt{\frac{3}{5}} x) dx = ... = \frac{5}{9}$$

$$w_2 = \int_{-1}^{1} \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} dx = \frac{-5}{3} \int_{-1}^{1} (x^2 \frac{3}{5}) dx = ... = \frac{8}{9}$$

$$w_3 = \int_{-1}^{1} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} dx = \frac{5}{6} \int_{-1}^{1} (x^2 - \sqrt{\frac{3}{5}} x) dx = ... = \frac{5}{9}$$

Napomena 2.4. *Čvorovi integracije su smješteni u simetričnim točkama s obzirom na ishodište, a koeficijenti simatričnih čvorova su jednaki.*

Lema 2.1 ([8])**.** *Svaki Legendreov polinom stupnja n ortogonalan je na polinome stupnja $<$ n.*

Lema 2.2 ([8])**.** *Neka su težinski koeficijenti zadani formulom*

$$w_i = \int_{-1}^{1} p_{n-1,i} dx.$$

Tada je kvadraturna formula točna za polinome stupnja n-1.

Teorem 2.1 ([8]). *Neka se težinski koeficijenti kvadraturne formule računaju po Lemi 2.2 i neka su čvorovi te formule nultočke Legendreovog polinoma $P_n(x)$. Tada je ta formula egzaktna za polinome stupnja $2n-1$.*

Dokaz. Neka je p_{2n-1} proizvoljni polinom stupnja $2n-1$.Podijelimo ga Legendreovim polinomom P_n. Prema teoremu o dijeljenju s ostatkom postoje jedinstveni polinomi q_{n-1} i r_{n-1} takvi da je

$$p_{2n-1} = q_{n-1}P_n + r_{n-1}.$$

Koristeći Lemu 1. vrijedi

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} p_{2n-1}(x)dx &= \int_{-1}^{1} q_{n-1}(x)P_n(x)dx + \int_{-1}^{1} r_{n-1}(x)dx \\ &= \int_{-1}^{1} r_{n-1}(x)dx. \end{aligned} \tag{2}$$

Kako su x_i , $i = 1, 2, ..., n$ nultočke polinoma $P_n(x)$ vrijedi

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} w_i p_{2n-1}(xi) &= \sum_{i=1}^{n} w_i P_n(xi) q_{n-1}(x_i) + \sum_{i=1}^{n} w_i r_{n-1}(xi) \\ &= \sum_{i=1}^{n} w_i r_{n-1}(xi). \end{aligned} \tag{3}$$

Prema jednakosti 2 vrijedi da je

$$\int_{-1}^{1} p_{2n-1}(x)dx = \int_{-1}^{1} r_{n-1}(x)dx.$$

Prema Lemi(2) vrijedi da je

$$\int_{-1}^{1} r_{n-1}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i r_{n-1}(xi).$$

Na kraju iz jednakosti 3 dokažemo tvrdnju teorema

$$\int_{-1}^{1} p_{2n-1}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i p_{2n-1}(xi).$$

□

Definicija 2.2 ([8]). *Kvadraturna formula iz gornjeg teorema čiji su čvorovi korijeni Legenreovog polinoma $P_n(x)$, a težinski koeficijenti se biraju po ... i koja je egzaktna za polinome stupnja $2n-1$, naziva se Gaussovom kvadraturnom formulom.*

U tablici su navedene vrijednosti čvorova integracije i težina za nekoliko slučajeva.

Tablica 2: Gauss-Legendreova formula

n=2	
$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$	$w_1 = 1$
$x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$	$w_2 = 1$
n=3	
$x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}$	$w_1 = \frac{5}{9}$
$x_2 = 0$	$w_2 = \frac{8}{9}$
$x_3 = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}$	$w_3 = \frac{5}{9}$
n=4	
$x_1 = -0.861136$	$w_1 = 0.347855$
$x_2 = -0.339981$	$w_2 = 0.652145$
$x_3 = 0.339981$	$w_3 = 0.652145$
$x_4 = 0.861136$	$w_4 = 0.347855$
n=5	
$x_1 = -0.90618$	$w_1 = 0.236927$
$x_2 = -0.538469$	$w_1 = 0.478629$
$x_3 = 0$	$w_2 = 0.568889$
$x_4 = 0.538469$	$w_3 = 0.478629$
$x_5 = 0.90618$	$w_4 = 0.236927$

Primjer 2.4. *Izračunajmo integral funkcije $f(x) = \sqrt{1+3x}$ na segmentu $[0,1]$ koristeći Gauss-Legendreovu metodu u 3 točke integracije.*
Računamo

$$I = \int_0^1 \sqrt{1+3x}dx.$$

Kako smo Gauss-Legendreovu metodu definirali na segmentu $[-1,1]$, napravimo supstituciju

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}.$$

Tako da je

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \sqrt{1+3x} \cdot dx \\ &= \frac{1}{2}\int_{-1}^1 \sqrt{\frac{5}{2}+\frac{3}{2}t} \cdot dt \\ &\approx \sum_{i=1}^3 w_i \sqrt{\frac{5}{2}+\frac{3}{2}x_i}. \end{aligned}$$

Uvrstimo podatke iz Tablice 2 i kao rezultat dobijemo $I^* = 1.55561$. Točna vrijednost integrala je $I = \frac{14}{9} \approx 1.55556$.

2.3 Ocjena pogreške Gaussove kvadraturne formule

Teorem 2.2. *Neka je zadana funkcija $f \in C^{2n}([a,b])$. Tada postoji točka $c \in [a,b]$ takva da za ocjenu pogreške Gauss-Legendreove metode integracije vrijedi*

$$E_n = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{2n}(c).$$

Primjer 2.5. *Za n=3 vrijedi*

$$\begin{aligned} E_3 &= \frac{(b-a)^7(3!)^4}{(7)(6!)^3} f^6(c) \\ &= \frac{(b-a)^7}{2016000} f^6(c) \end{aligned}$$

3. Usporedba metoda

Primjer 3.1 ([9])**.** *Neka je zadana funkcija $f(x) = x \cdot e^{2x}$ na segmentu $[0,4]$. Primjenom Newton-Leibnizove formule, dobije se*

$$\begin{aligned} I &= \int_0^4 x \cdot e^{2x} \\ &= \frac{7}{4}e^8 + \frac{1}{4} \\ &\approx 5216.92648. \end{aligned}$$

Primjenit ćemo Gaussovu i Newton-Cotesovu formulu, kako bismo vidjeli nakon koliko koraka možemo dobiti rezultat s greškom manjom od 1%.

n	Gauss-Legendre	Newton-Cotes
1	436.785	23847.66390
2	3477.54	8240.41143
3	4967.11	6819.20880
4	5197.54	5499.67970
5	5215.99	5386.62015
6	5216.9	5239.58047
7	5216.93	5231.31978
8	5216.93	5218.33122
9	5216.93	5217.84756
10	5216.93	5216.99337

Kod Gaussovih kvadraturnih formula, za n=4, imamo pogrešku od 0.37%*, dok kod Newton-Cotesove formule se tek za n=6 postiže pogreška od manja od* 1%*, tj.* 0.43%

Primjer 3.2. *Neka je zadana funkcija $f(x) = e^{-\frac{x}{2}}$ na segmentu $[0,4]$. Funkcija f je primjer funkcije čiji se integral ne može egzaktno izračunati.*
Koristeći ocjene pogreški za produljenu trapeznu i Simpsonovu formulu, izračunajmo broj potrebnih koraka za postizanje preciznosti od $\varepsilon = 0.001$.
Produljena trapezna formula:

$$E_n = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(c) \leq -\frac{h^2}{12}(b-a)\mathcal{M}_2.$$

Iz čega slijedi

$$n > (b-a)\sqrt{\frac{\mathcal{M}_2(b-a)}{12\varepsilon}} = 4 \cdot \sqrt{\frac{0.25 \cdot 4}{12 \cdot 0.001}} \approx 36.51.$$

Najmanji n *za koji se postiže tražena preciznost je* $n = 37$.
Generalizirana Simpsonova formula:

$$E_n = \frac{(b-a)}{180} \cdot h^4 \cdot f^4(c) \leq \frac{(b-a)}{180} \cdot h^4 \mathcal{M}_4.$$

Iz čega slijedi

$$n > (b-a)\sqrt[4]{\frac{\mathcal{M}_4(b-a)}{180\varepsilon}} = 4\sqrt[4]{\frac{0.063 \cdot 4}{180\varepsilon}} \approx 4.35.$$

Najmanji n *za koji se postiže tražena preciznost je* $n = 5$.
Gauss-Legendreova formula:

$$E_n = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{2n}(c).$$

Za n=3 slijedi

$$E_3 \leq \frac{4^7(3!)^4}{7(6!)^3} \cdot \mathcal{M}_6 \approx 0.00025.$$

Gauss-Legendreovom metodom za n=3 postižemo traženu preciznost.

Vidimo kako s Gauss-Legendreovom kvadraturnom formulom, u oba slučaja, puno brže postižemo traženu preciznost.

Literatura

[1] M. Abramowitz, L.A. Stegun (Eds.), *Handbook of Mathematical Functions with Formulae, Graphs and Mathematical Tables, Applied Math. Series 55, National Bureau of Standards, 4th printing*, Washington, 1965.

[2] S. Adjerid, *Notes for Numerical Analysis Math 5466*, Virginia Polytechnic Institute and State University. Dosupno na: `http://www.math.vt.edu/people/adjerids/homepage/teaching/S05/Math5466/ode.pdf` [8. rujna 2017.]

[3] Å. Björck, G. Dahlquist, *Numerical Methods*, Prentice-Hall, Inc., 1974., New Jersey

[4] E. Isaacson, H.B. Keller, *Analysis Of Numerical Methods*, Dover, 1994., New York

[5] J. Pečarić, N. Ujević, *A representation of the Peano kernel for some quadrature rules and applications*, Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 462, No. 2073 (2006), 2817-2832.

[6] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Odjel za matematiku Sveučilišta u Osijeku, Osijek, 2004.

[7] M. Schatzman, *Numerical Analysis A mathematica introduction* , Clarendon Press, 2002., Oxford

[8] N. Ujević, *Uvod u numeričku matematiku*, skripta PMF-a, Split, 2004.

[9] Gaussian Quadratures, *University of Maryland Institute for Advanced Computer Studies.* Dostupno na: `http://www.umiacs.umd.edu/~ramani/cmsc460/Lecture16_integration.pdf` [8. rujna 2017.]