Numeričke metode za računanje integrala

Jurić, Dario

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku

Fakultet primijenjene matematike i informatike

Sveučilišni diplomski studij matematike

Modul: matematika i računarstvo

Numeričke metode za računanje integrala

Diplomski rad

Mentor:

Kristian Sabo

Student:

Dario Jurić

Osijek, 2024.

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku
Fakultet primjenjene matematike i informatike
Sveučilišni diplomski studij matematike
Modul: matematika i računarstvo

Student: Dario Jurić

Numeričke metode za računanje integrala

Diplomski rad

Mentor: prof. dr. sc. Kristian Sabo

Osijek, 2024.

Sadržaj

1 | Uvod

U ovom diplomskom radu razmatra se matematička tema *'Numeričke metode za računanje integrala'*. U okviru rada navode se glavne matematičke metode za numeričko računanje određenog integrala

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

Tema je aktualna i popularna kako s matematičkog aspekta, tako i u kontekstu primjena u različitim područjima znanosti. U radu se nastoji što preciznije i zanimljivije objasniti teorijska pozadina numeričkih metoda za računanje integrala. Također, izrađeni su originalni ili su iz literature preuzeti odgovarajući ilustrativni primjeri. Rad se sastoji od sljedećih poglavlja:

- *Motivacija*: u kojoj se daju glavni razlozi za konstrukciju i primjenu numeričkih metoda za računanje integrala.
- *Newton Cotesove formule*: ovo poglavlje predstavlja glavni dio rada. U njemu su predstavljene glavne matematičke metode koje se dalje analiziraju u sljedeća četiri poglavlja.
- *Trapezna formula*: u ovom poglavlju predstavljena je najjednostavnija metoda za numeričku integraciju, koja je temeljena na Newton-Cotesovim formulama s dvije točke.
- *Produljena trapezna formula*: kod produljene trapezne formule je specifično to da početni interval $[a, b]$ podijelimo na n podintervala te na svakom od podintervala primijenimo običnu trapeznu formulu.
- *Simpsonova formula*: ova formula je nešto složenija od trapezne formule, a izvodi se iz Newton-Cotesovih formula s tri točke.
- *Produljena Simpsonova formula*: slično kao i kod produljene trapezne formule, u produljenoj Simpsonovoj formuli početni interval $[a, b]$ podijelimo na podintervale te na svakom od podintervala primijenimo običnu Simpsonovu formulu.
- *Gaussova kvadraturna formula*: za razliku od ovih Newton-Cotesovih formula, kod kojih su točke u kojima se računa vrijednost funkcije zadane, u Gaussovim kvadraturnim formulama te točke potrebno je posebno odrediti temeljem određenih uvjeta.

2 | Motivacija

2.1 Motivacija

Imamo neku neprekidnu funkciju $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ za koju želimo odrediti Riemannov integral na $[a, b] \subset \mathbb{R}$ na numerički način, jer ne možemo odrediti primitivnu funkciju $G : [a, b] \to \mathbb{R}$ funkcije f iz jednog od sljedeća dva razloga:

- podintegralna funkcija f nam je poznata samo u konačno mnogo točaka,
- primitivnu funkciju G ne možemo zapisati u terminima elementarnih funkcija.

Osnovna ideja numeričke integracije sastoji se u tome da funkciju $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ zamijenimo nekom jednostavnijom funkcijom $\varphi : [a, b] \to \mathbb{R}$ (primjerice polinomom) pa integral

$$I = \int_a^b f(x)dx. \tag{2.1}$$

aproksimiramo s jednostavnijim integralom

$$I^* = \int_a^b \varphi(x)\, dx. \tag{2.2}$$

Obično jednostavniju funkciju $\varphi : [a, b] \to \mathbb{R}$ odabiremo tako da ona interpolira funkciju f u $m + 1$ točaka $x_0, \ldots, x_m$ iz intervala $[a, b]$, koje zovemo *čvorovi integracije*. U tom slučaju opća integracijska formula ima oblik:

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k f(x_k), \tag{2.3}$$

gdje brojeve w_k, $k = 0, \ldots, m$ zovemo *težinski koeficijenti*.

Pritom vrijedi

$$I = I_m(f) + E(f). \tag{2.4}$$

U formuli (2.4), $I_m(f)$ nam predstavlja aproksimaciju integrala I, pri čemu je $m + 1$ broj korištenih točaka u kojima poznajemo vrijednost funkcije, a $E_m(f)$ je pritom napravljena pogreška.

Primjer 1. *Pretpostavimo da vrijednosti funkcije $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ poznamo u $m+1$ čvorova, odnosno poznamo*

$$x_0, \dots, x_m \in [a,b],\ x_i \neq x_j,\ i \neq j$$

te poznamo vrijednosti funkcije f u tim čvorovima: $f(x_0), \dots, f(x_m)$. Za funkciju φ koju koristimo u cilju aproksimacije integrala I^* (iz formule (2.2)) možemo uzeti interpolacijski polinom najviše $m-$tog stupnja P_m za kojeg vrijedi:

$$P_m(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \dots, m.$$

Ovakvim izborom funkcije $\varphi(x) = P_m(x)$ dolazimo do Newton-Cotesovih formula, koje opisujemo u Poglavlju 3.

2.2 Interpolacija polinomima

Označimo s Π_m skup svih realnih ili kompleksnih polinoma čiji stupanj ne prelazi m:

$$P_m(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m.$$

Vrijedi sljedeći teorem (vidjeti [4]):

Teorem 1. (*postojanje i jedinstvenost interpolacijskog polinoma*)
Zadano je $m+1$ proizvoljnih točaka

$$(x_i, f_i),\ i = 0, \dots, m,\ x_i \neq x_k,\ i \neq k.$$

Onda postoji jedinstveni polinom $P_m \in \Pi_m$, tako da vrijedi:

$$P_m(x_i) = f_i,\ i = 0, 1, \dots, m.$$

Dokaz. Dokaz se sastoji od dva dijela. U prvom dijelu dokazujemo postojanje, a u drugom jedinstvenost interpolacijskog polinoma.
Postojanje: Neka su $l_i \in \Pi_m,\ i = 0, \cdots, m$ polinomi zadani s

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_m)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_m)}.$$

Uočimo da oni zadovoljavaju ovaj uvjet

$$l_i(x_k) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

Nadalje uočimo da $P_m(x) = \sum_{i=0}^{m} f_i l_i(x)$, zadovoljava uvjet

$$P_m(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, m$$

te je $P_m \in \Pi_m$, čime smo dokazali postojanje interpolacijskog polinoma.

Jedinstvenost: Pretpostavimo suprotno, odnosno da interpolacijski polinom nije jedinstven, odnosno da postoje dva različita polinoma $P_1 \in \Pi_m, P_2 \in \Pi_m$ koji zadovoljavaju uvjet

$$P_1(x_i) = P_2(x_i) = f_i,\ i = 0, 1, \ldots, m,$$

odakle slijedi da je polinom P definiran s $P(x) = P_1(x) - P_2(x)$ stupnja najviše m te ima barem $m+1$ različitih nultočka x_i, $i = 0, \ldots, m$ te posljedično imamo da je

$$P(x) = 0, \quad \forall\, x \in \mathbb{R},$$

odnosno da je $P_1 = P_2$. $\square$

3 | Newton-Cotesove formule

3.1 Zatvorena Newton-Cotesova formula

Newton–Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, pri čemu za prvi čvor uzimamo $x_0 := a$ dok za posljednji čvor uzimamo $x_m := b$ (vidjeti [1] ili [4]). Kod zatvorene Newton–Cotesove formule s $(m+1)$ čvorova, čvorovi glase:

$$x_j = x_0 + jh,\ j = 0, \ldots, m,$$

te je $x_0 = a, x_m = b,\ h = \frac{b-a}{m}$.

Integral funkcije f računamo tako da funciju f interpoliramo polinomom

$$P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} f(x_k) l_k(x),\ l_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \tag{3.1}$$

najviše $m-$tog stupnja, odakle dobivamo

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_m(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m} f(x_k) \int_a^b l_k(x)\,dx = (b-a)\sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k). \tag{3.2}$$

U formuli (3.2) težine w_k imaju oblik:

$$w_k = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_k(x)\,dx.$$

Uz supstituciju $x = a + (b-a)t$, težine w_k postaju jednostavnije:

$$w_k = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{mt - i}{k - i}\,dt.$$

Upotrebu zatvorene Newton Cotesove formule ilustriramo sljedećim primjerom.

Primjer 2. *Primjenom zatvorene Newton Cotesove formule treba odrediti numerički integral funkcije $f(x) = x\cos(x)$ na $[0,1]$ pomoću $m+1 = 5$ točaka x_0, x_1, x_2, x_3, x_4. Pritom je: $x_0 = a = 0, x_4 = b = 1, m = 4$ te je*

$$h = \frac{b-a}{m} = 0.25.$$

Čvorovi glase: $x_k = x_0 + k \cdot h = 0.25 \cdot k,\ k = 0, \ldots, 4$, odnosno vrijedi:

k	x_k	$f(x_k)$
0	0	0
1	0.25	0.24223
2	0.5	0.43879
3	0.75	0.54877
4	1	0.54030

Funkciju f iz ovog primjera aproksimiramo pomoću polinoma $4.-$tog stupnja:

$$P(x) = 0.24223 \cdot l_1(x) + 0.43879 \cdot l_2(x) + 0.54877 \cdot l_3(x) + 0.54030 \cdot l_4(x),$$

gdje su

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{m} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}.$$

Odgovarajuće vrijednosti težina w_k glase:

$$w_0 = \frac{7}{90}, w_1 = \frac{16}{45}, w_2 = \frac{2}{15}, w_3 = \frac{16}{45}, w_4 = \frac{7}{90}$$

te je stoga aproksimacija početnog integrala $I = \int_0^1 x\cos(x)dx$ jednaka

$$I_4(f) = \sum_{k=0}^{4} w_k f(x_k) \approx 0.381772.$$

Uočimo da je egzaktna vrijednost integrala

$$I = \int_0^1 x\cos(x)dx = \cos(1) + \sin(1) - 1 \approx 0.381773.$$

Prema tome, apsolutna pogreška $|I - I^*|$ iznosi

$$E_4(f) \;=\; |I - I_4(f)| \;=\; 1.69358 \cdot 10^{-6}.$$

3.2 Otvorena Newton-Cotesova formula

Otvorene Newton–Cotesove formule nemaju početne i krajnje čvorove intervala $[a, b]$ kao čvorove (vidjeti [1]). Prema tome, vrijedi:

$$x_i = x_0 + (i+1)h, \quad i = 0, 1, \ldots, m, \; h = \frac{b-a}{m+2}.$$

Formula kojom numerički izračunavamo integral funkcije f s otvorenom Newton–Cotesovom formulom glasi:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{m} a_i f(x_i),$$

te je ovdje

$$a_i = \int_a^b l_i(x)\,dx.$$

Primjer 3. (*vidjeti* [1]) *Primjenom zatvorene Newton-Cotesove formule i otvorene Newton-Cotesove formule treba aproksimirati integral:*

$$\int_0^{\frac{\pi}{4}} \sin x\,dx, \; \textit{kad je } m = 1, 2, 3\,.$$

Kod zatvorene Newton-Cotesove formule, za integral imamo:

$m = 1$	$I \approx 0.27768$
$m = 2$	$I \approx 0.292932$
$m = 3$	$I \approx 0.292893$

Kod otvorene Newton-Cotesove formule, za vrijednost integrala vrijedi:

$m = 1$	$I \approx 0.297987$
$m = 2$	$I \approx 0.292858$
$m = 3$	$I \approx 0.292869$

4 | Trapezna formula

4.1 Trapezna formula

Trapeznu formulu izvodimo pomoću Newton-Cotesovih formula, pri čemu je $m = 1$. Aproksimacija integrala $I_1(f)$ ima oblik

$$I_1(f) = (b-a)\left(w_0 f(x_0) + w_1 f(x_0 + h_1)\right),$$

pri čemu je $h_1 = \frac{b-a}{1} = b - a = x_1 - x_0$. Iz formule

$$w_k = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{m} \frac{mt-i}{k-i} dt, \; k = 0, 1$$

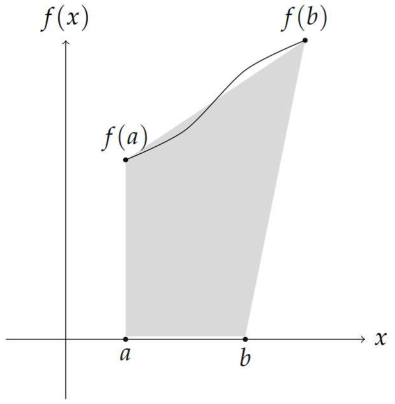
dobivamo $w_0 = w_1 = \frac{1}{2}$. Konačno, to znači da trapezna formula glasi:

$$I_1(f) = (b-a)\left(w_0 f(a) + w_1 f(b)\right) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)). \tag{4.1}$$

te predstavlja aproksimaciju integrala

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

Grafički prikazano, trapezna formula izgleda ovako:



Slika 4.1: Graf integriranja sa trapeznom formulom

Geometrijski, aproksimacija integrala I s trapeznom formulom (4.1) predstavlja površinu trapeza sa vrhovima $(a,0)$, $(b,0)$, $(a,f(a))$ i $(b,f(b))$, kako se vidi na prethodnom grafu.

Primjer 4. (*Trapezna formula*) *Zadana je funkcija* $f : [-10,10] \to \mathbb{R}$ *s formulom* $f(x) = x^2\cos(x^2)$. *U ovom primjeru vrijedi:*

$$a = -10, b = 10, h = b - a = 20, f(a) = f(b) = 86.23.$$

Na osnovu trapezne formule, integral početne funkcije f *na* [-10,10] *aproksimiramo ovako:*

$$\int_{-10}^{10} x^2\cos(x^2) \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) \approx 20 \cdot 86.23 \approx 1724.6 = I^*.$$

U sljedećem teoremu navodimo ocjenu pogreške trapezne formule.

Teorem 2. ([4]) *Neka je*

$$f : [a,b] \to \mathbb{R} \in \mathbb{C}_{[a,b]}.$$

Tada postoji $c \in (a,b)$, *takav da je*

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) - \frac{(b-a)^3}{12}f''(c).$$

Dokaz. Prema teoremu o ocjeni pogreške interpolacijskog polinoma prvog stupnja (vidi [1]), postoji $\xi \in (a,b)$ (koji ovisi o x), takav da je

$$E = I - I^* = \int_a^b (f(x) - P_1(x))dx \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx.$$

Kako je $(x-a)(x-b) \leq 0$ za sve $x \in [a,b]$, koristeći *poopćeni teorem o srednjoj vrijednosti integralnog računa* (vidi [4]), dobivamo:

$$E = I - I^* = \frac{1}{2}f''(c)\int_a^b (x-a)(x-b)dx.$$

Rješavanjem prethodnog integrala slijedi

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

□

4.2 Produljena trapezna formula

Ako nam se dogodi da aproksimacija integrala I^* inicijalne funkcije $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ značajno odstupa od točne vrijednosti integrala I, možemo primijeniti *produljenu trapeznu formulu.* Tom formulom polazni interval $[\,a,\ b\,]$ funkcije f podijelimo na n dijelova jednake duljine:

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

te na svakom podintervalu $[\,x_{k-1},\ x_k\,],\ k \ = \ 1, \dots, n$ primijenimo običnu trapeznu formulu. Aproksimacija integrala dobivena produljenom trapeznom formulom glasi:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n}\left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n)\right) + E_n^T(f) \quad (4.2)$$

pri čemu je $E_n^T(f)$ pogreška produljene trapezne formule.

Vrijedi sljedeći teorem.

Teorem 3. ([1]) (*Produljena trapezna formula*) *Ako je* $f \in C^2[a,b]$, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_j = a + jh,\ j = 0, 1, \dots, n$. *Tada postoji* $\mu \in [a,b]$ *takav da vrijedi:*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(a) \ + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right] - \frac{b-a}{12}h^2 f''(\mu). \qquad (4.3)$$

U sljedećim primjerima 5 i 6 ilustriramo primjenu produljene trapezne formule:

Primjer 5. (*Produljena trapezna formula*) *Zadana je funkcija* $f : [-10, 10] \to \mathbb{R}$ *formulom* $f(x) = \sin(\cos(x))^2$ *za koju treba odrediti numeričku vrijednost integrala*

$$I = \int_{-10}^{10} f(x)dx,$$

pri čemu je $m = 10$. *Ovdje je:* $a = -10$, $b = 10$, $f(a) = 0.55$, $f(b) = 86.23$ *Podijelimo li domenu od* f *na* 10 *jednakih dijelova i na svakom od njih primijenimo produljenu trapeznu formulu, dobivamo da aproksimacija integrala I glasi:*

$$I^* = \frac{b-a}{10}\left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n)\right) = 7.425.$$

Primjer 6. (*vidjeti* [2]) *Zadana je funkcija* $f : [1,2] \to \mathbb{R}$ *formulom* $f(x) = x\,e^{-x}$, *za koju treba izračunati vrijednost integrala*

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

primjenom produljene trapezne formule tako da pogreška bude manja od 10^{-6}. *Derivacije ove funkcije glase:*

$$f^{(1)}(x) \ = \ (1 \ - x)\,e^{-x},\ f^{(2)}(x) = (x \ - 2)\,e^{-x},\ f^{(3)}(x) = (3 \ - x)\,e^{-x},$$

$$f^{(4)}(x) = (x-4)\,e^{-x},\ f^{(5)}(x) = (5-x)\,e^{-x}.$$

Na intervalu $[1, 2]$ *je* $f^3(x) > 0$ *što znači da* $f^{(2)}$ *raste. Također je na ovom intervalu* $f^2(x) \leq 0$*, pa je maksimum* $|f^{(2)}(x)|$ *u lijevom rubu, odnosno*

$$M_2 = max_{x\in[1,2]}|f^{(2)}(x)| = |f^{(2)}(1)| = e^{-1} \approx 0.36787944$$

Broj podintervala n_T *za produljenu trapeznu formulu je*

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

tako da je najmanji broj podintervala $n_T = 176$.

5 | Simpsonova formula

5.1 Simpsonova formula

Simpsonovu formulu izvodimo pomoću Newton-Cotesove formule za $m = 2$ ([2], [4]). U ovom slučaju je:

$$x_0 = a, \quad x_1 = a + \frac{b-a}{2}, \quad x_2 = b, \quad h = \frac{b-a}{2}$$

te imamo ove koeficijente: w_0, w_1 *i* w_2 (težine w_i):

$$\begin{aligned} w_0 &= \frac{1}{2}\int_0^1 (2t-1)(2t-2)\,dt = \frac{1}{6}, \\ w_1 &= -\int_0^1 2t(2t-2)\,dt = \frac{2}{3}, \\ w_2 &= \frac{1}{2}\int_0^1 2t(2t-1)\,dt = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Odakle slijedi kako *Simpsonova formula* glasi:

$$I^* = \int_a^b P_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right). \tag{5.1}$$

Može se pokazati (vidjeti [5]) da je pogreška aproksimacije zadana s:

$$E = I - I^* = -\frac{(b-a)^5}{90} f^{(4)}(c),\ c \in (a,b).$$

U primjerima 7, 8 ilustriramo primjene Simpsonovih formula:

Primjer 7. (*Simpsonova formula*) *Zadana je funkcija* $f : [10, 15] \to \mathbb{R}$, *formulom* $f(x) = \sin(e^x) + x^2$. *U ovom primjeru je:*

$$a = 10,\ b = 15,\ f(a) = 99.31,\ f(b) = 225.99.$$

Prema Simpsonovoj formuli, integral od f *aproksimiramo s*

$$I^* = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))\right) = 795.12\,.$$

Primjer 8. *(vidjeti [6]) Zadana je funkcija* $f : \left[\frac{1}{4}, \frac{5}{4}\right] \rightarrow \mathbb{R}$*, formulom* $f(x) = \frac{1}{2} + \sin(\pi x)$. *Prema tome, za funkciju* f *nad domenom* $\left[\frac{1}{4}, \frac{5}{4}\right]$ *vrijedi:*

$$S_2 = \frac{\frac{1}{2}}{3}\left(\frac{1}{2} + \sin(\frac{1}{4}\pi) + 4\left(\frac{1}{2} + \sin(\frac{3}{4}\pi)\right) + \frac{1}{2} + \sin(\frac{5}{4}\pi)\right) =$$

$$\frac{1}{6}\left(3 + \frac{1}{2}\sqrt{2} + 2\sqrt{2} - \frac{1}{2}\sqrt{2}\right) = 0.97140452.$$

Točna vrijednost integrala $I(f) = 0.950158$*, što pokazuje da je numerička aproksimacija integrala funkcije* f *primjenom Simpsonove formule pristojno točna.*

5.2 Produljena Simpsonova formula

Na sličan način kao i produljenu trapeznu formulu, izvodimo i produljenu Simpsonovu formulu. Pretpostavimo da je n paran prirodni broj. Polazni interval $[a, b]$ s čvorovima $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ podijelimo na n dijelova jednake duljine te na svakom podintervalu primijenimo osnovnu Simpsonovu formulu. Dobivamo (vidi primjerice [2]):

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(b)\right] \tag{5.2}$$

Vrijedi sljedeći teorem.

Teorem 4. ([1]) *Neka je n paran broj te $h = \frac{b-a}{n}$, $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \ldots, n$. Ako je $f \in C^4[a, b]$, onda postoji $\mu \in (a, b)$ takav da vrijedi:*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(b)\right] - \frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\mu).$$

Za *produljenu Simpsonovu formulu* vrijedi da je pogreška $O(h^4)$, dok za *standardnu Simpsonovu formulu* vrijedi da je pogreška $O(h^5)$. Svakako, za *standardnu Simpsonovu formulu* vrijedi da je $h = \frac{b-a}{2}$, dok za *produljenu Simpsonovu formulu* vrijedi da je $h = \frac{b-a}{n}$, te n treba biti paran cijeli broj. To znači da ove dvije $Simpsonove formule$ nisu usporedive i da češće koristimo *produljenu Simpsonovu formulu*. Više detalja o *produljenoj Simpsonovoj formuli* može se pronaći u [1] i [2].

Primjer 9. (*vidjeti* [2]) *Izračunajmo vrijednost integrala*

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

korištenjem produljene Simpsonove formule tako da pogreška bude $\leq 10^{-6}$. Također potrebno je pronaći pravu vrijednost integrala i pogrešku integriranja. Prvo, trebamo ocijeniti pogrešku za produljenu Simpsonovu formulu u ovom primjeru. Za to su nam potrebni maksimumi apsolutnih vrijednosti druge i četvrte derivacije na zadanom intervalu. Derivacije funkcije f su ove:

$$f^{(1)}(x) = (1-x)e^{-x},\ f^{(2)}(x) = (x-2)e^{-x},\ f^{(3)}(x) = (3-x)e^{-x},$$

$$f^{(4)}(x) = (x-4)e^{-x},\ f^{(5)}(x) = (5-x)e^{-x}.$$

Prvo nas zanima greška produljene Simpsonove formule. Na intervalu $[1, 2]$ je $f^{(5)} > 0$, što znači da $f^{(5)}$ raste. Također je $f^{(4)} < 0$ što znači da je njen maksimum po apsolutnoj vrijednosti u lijevom rubu, odnosno da vrijedi:

$$M_4 = max_{x\in[1,2]}|f^4(x)| = |f^4(1)| = 3 \cdot e^{-1} \approx 1.10363832$$

Za pogrešku produljene Simpsonove formule na intervalu $[\,1,\,2\,]$ *imamo da je:*

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

odnosno, nam treba najmanje $n_s = 10$ *podintervala. Zatim, za* $n_s = 10$ *podintervala vrijede ove početne vrijednosti za* k, x_k, $f(x_k)$*:*

k	x_k	$f(x_k)$
0	1.0	0.36787944
1	1.1	0.36615819
2	1.2	0.36143305
3	1.3	0.35429133
4	1.4	0.34523574
5	1.5	0.33469524
6	1.6	0.32303442
7	1.7	0.31056199
8	1.8	0.29753799
9	1.9	0.28418037
10	2.0	0.27067056

Vrijedi da je:

$$\begin{aligned} S_0 &= f(x_0) + f(x_{10}) = 0.63855 \\ S_1 &= 4\,f(x_1) + f(x_3) = 6.5995485 \\ S_2 &= 2\,(f(x_2) + f(x_4) + f(x_6) + f(x_8)) = 2.65448246\,. \end{aligned}$$

Vrijednost integrala po Simpsonovoj formuli je:

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

6 | Gaussove kvadraturne formule

6.1 Gaussova kvadraturna formula

Općenito, Gaussove kvadraturne formule imaju oblik:

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

pri čemu je $w : [a,b] \to \mathbb{R}$, $w(x) > 0$ težinska funkcija, koja je integrabilna na $[a,b]$, w_i su težinski koeficijenti, dok su x_i čvorovi integracije. Za razliku od prethodnih metoda ovdje čvorovi integracije x_i nisu unaprijed poznati, nego ih izračunamo tako da pogreška formule bude najmanja.

Ako je specijalno $w(x) = 1$, onda za govorimo o Gauss-Legendreovim kvadraturnim formulama. U sljedećoj tablici navedeni su nazivi kvadraturnih formula u ovisnosti o izboru težinske funkcije i intervala, pri čemu je interval odgovarajućom supstitucijom moguće transformirati u proizvoljni interval $[a,b]$.

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

Čvorove integracije te težinske koeficijente želimo odrediti tako da je kvadraturna formula egzaktna za polinome što većeg stupnja. Pokazat će se da čvorove integracije x_i možemo uzeti tako da su oni nultočke ortogonalnih polinoma na intervalu (a,b), obzirom na težinsku funkciju w te da se težine w_i mogu izračunati po sljedećoj formuli ([2]):

$$w_i = \int_a^b w(x)\, l_i(x)\, dx, \; i = 1,\ldots,n.$$

Funkcije l_i su *funkcije Lagrangeove baze*, za koje vrijedi

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Slično kao što se Newton-Cotessove formule mogu dobiti korištenjem Lagrangeovog oblika interpolacijskog polinoma, za dobivanje Gaussovih kvadraturnih formula koristimo Hermiteov interpolacijski polinom (vidjeti primjerice [4]) h_{2n-1} stupnja najviše $2n-1$, koji u čvorovima integracije x_i interpolira vrijednosti $f_i = f(x_i)$ i $f_i' = f'(x_i)$ za $i = 1,\ldots,n$, a koji glasi (vidjeti primjerice [2]):

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

Direktnim integriranjem dobivamo:

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

pri čemu su

$$A_i = \int_a^b w(x)[1-2(x-x_i)l_i'(x_i)] l_i^2(x) dx, \tag{6.1}$$

$$B_i = \int_a^b w(x)[(x-x_i) l_i^2(x)] dx. \tag{6.2}$$

Trebamo odrediti parametre težinskih koeficijenata A_i, B_i te očekujemo da ova formula egzaktno integrira polinome do stupnja $2n-1$. No, za upotrebu ove formule trebamo poznavati funkcijske vrijednosti $f(x_i)$ u čvorovima x_i te vrijednosti derivacije $f'(x_i)$. Kako bismo izbjegli računanje vrijednosti derivacije, čvorove x_i izabiremo tako da poništimo koeficijente B_i iz derivacije f_i'. Integracijska formula treba nam ostati egzaktna za polinome stupnja do $2n-1$ (dimenzija prostora je $2n$). Ovako dobivena formula koristila bi funkcijske vrijednosti u čvorovima, odnosno imala bi oblik *Gausove integracijske formule.*

Kao što je ranije navedeno odgovarajućim izborom čvorova x_i možemo postići da težinski koeficijenti B_i uz derivacije budu jednaki nula. Za to uvodimo posebni "polinom čvorova" w_n, koji ima nultočke u čvorovima integracije te glasi:

$$w_n(x) := (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n). \tag{6.3}$$

Sljedeća lema govori o tome kako trebamo izabrati čvorove:

Lema 1. ([2]) *Ako je $w_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$ ortogonalna s težinom w za sve polinome nižeg stupnja, tj. ako vrijedi*

$$\int_a^b w(\,x\,) w_n(\,x\,)\, x^k dx = 0,\; k = 0,1,\ldots,n-1, \tag{6.4}$$

onda su koeficijenti od B_i iz (6.2) jednaki nula.

6.2 Gauss–Legendreove integracijske formule

U specijalnom slučaju za w kada je $w \equiv 1$ na intervalu $(-1,1)$ izvodimo specijalnu Gauss–Legendre-ovu formulu:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i). \tag{6.5}$$

Legendreov polinom stupnja n definiran je Rodriguesovom formulom

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{2x^n}(x^2-1)^n. \tag{6.6}$$

Ovako definirani polinomi P_n čine ortogonalnu bazu u prostoru polinoma stupnja n, tj. ovi polinomi su linearno nezavisni i ortogonalni obzirom na skalarni produkt

$$< P, Q >:= \int_{-1}^{1} P(x)Q(x)dx. \tag{6.7}$$

Nama su bitna sljedeća specijalna svojstva, iz kojeg slijede ostala:

Lema 2. ([2]]) *Legendreov polinom stupnja n je ortogonalan na sve potencije x^k nižeg stupnja te vrijedi*

$$\int_{-1}^{1} x^k P(x)dx = 0, \ \ za \ \ k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Lema 3. ([2]) *Legendreovi polinomi su ortogonalni na intervalu $(-1,1)$ obzirom na skalarni produkt (6.7), odnosno vrijedi*

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

Norma Legendreovog polinoma glasi:

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

Lema 4. ([2]) *Legendreovi polinomi P_n imaju n nultočaka, koje su sve realne i različite i nalaze se u otvorenom intervalu $(-1,1)$.*

Još nam je bitan sljedeći teorem, koji nam govori o čvorovima integracije u *Gauss-Legendreovoj* formuli reda n:

Teorem 5. ([2]) *Čvorovi integracije u Gauss–Legendreovoj formuli reda n su nultočke Legendreovog polinoma P_n, za svaki n.*

Dokaz Vrijedi da su točke integracije x_i nultočke polinoma P_n, po konstrukciji. Zbog uvjeta ortogonalnosti, polinom w_n, s vodećim koeficijentom 1, proporcionalan je Legendreovom polinomu P_n. Vodeći koeficijent u P_n izračunamo iz Rodriguesove formule, te vrijedi

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

tako da su sve nultočke polinoma w_n nultočke polinoma P_n.

Primjer 10. (*Legendreovi polinomi*) *Iz Rodriguesove formule možemo izračunati nekoliko prvih Legendreovih polinoma:*

$$
\begin{aligned}
P_0(x) &= 1,\\
P_1(x) &= \frac{1}{2}\frac{d}{dx}(\,x^2-1\,) = x,\\
P_2(x) &= \frac{1}{8}\frac{d^2}{dx^2}(\,x^2-1\,)^2 = \frac{1}{2}(3\,x^2\;-\;1),\\
P_3(x) &= \frac{1}{48}\frac{d^3}{dx^3}(\,x^2-1\,)^3 = \frac{1}{2}(5\,x^3\;-\;3\,x),\\
P_4(x) &= \frac{1}{384}\frac{d^4}{dx^4}(\,x^2-1\,)^4 = \frac{1}{8}(\,35\,x^4\;-\;30\,x^2\;+\;3\,),\\
P_5(x) &= \frac{1}{8}(\,63\,x^2\;-\;70\,x^3\;+\;15\,x\,),\\
P_6(x) &= \frac{1}{16}(\,231\,x^6\;-\;315\,x^4\;+\;105\,x^2\;-\;5\,),\\
P_7(x) &= \frac{1}{16}(\,429\,x^7\;-\;693\,x^5\;+\;315\,x^3\;-\;35\,x\,),\\
P_8(x) &= \frac{1}{128}(\,6435\,x^8\;-\;12012\,x^6\;+\;6930\,x^4\;-\;1260\,x^2\;+\;35\,).
\end{aligned}
$$

Primjer 11. (*Gaussova kvadratna formula*) *Odredimo čvorove integracije za $n = 4$. U tu svrhu pronađimo nultočke Legendrovog polinoma $P_4(x) = \frac{1}{8}(\,35\,x^4\;-\;30\,x^2\;+\;3\,)$. Dobivamo:*

$$x_1 = -\sqrt{\frac{1}{35}(15-2\sqrt{30})}, x_2 = \sqrt{\frac{1}{35}(15-2\sqrt{30})},$$

$$x_3 = -\sqrt{\frac{1}{35}(15+2\sqrt{30})} x_4 = \sqrt{\frac{1}{35}(15+2\sqrt{30})}$$

Pritom se odgovarajuće težine mogu dobiti eksplicitno (*vidi* [2]) *iz*

$$w_i = \frac{2(1-x_i^2)}{n^2(P_3(x_i))^2}, \; i = 1,2,3,4.$$

7 | Sažetak

Tema ovog diplomskog rada su *'Numeričke metode za računanje integrala'*. Rad se sastoji od teorijskog dijela i praktičnih primjera. U teorijskom dijelu objašnjene su numeričke metode za aproksimativno računanje integrala. Kod praktičnog dijela dani su numerički primjeri kroz koje su ilustrirane prethodno opisane metode.

8 | Abstract

The topic of this thesis is *'Numerical methods for calculating integrals'*. The paper consists of a theoretical part and practical examples. In the theoretical part, numerical methods for the approximate calculation of integrals are explained. In the practical part, numerical examples are given through which the previously described methods are illustrated.

Bibliografija

[1] R. Burden, D. Faires, *Numerical Analysis*, Brooks / Cole, 2011.

[2] Z. Drmač, V.Hari, M. Marušić, M. Rogina, S. Singer, S. Singer, *Numerička analiza*, PMF Sveučilišta u Zagrebu, 2003.

[3] J. F. Epperson, *Introduction to Numerical Methods and Analysis*, Wiley, 2013.

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

[5] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, 1993.

[6] Š. Ungar, *Uvod u TEX s naglaskom na LaTeX 2ϵ*, Odjel za matematiku Sveučilišta u Osijeku, 2019.

[7] *LaTeX Tutorial Start and Advanced, Overleaf*, https://www.overleaf.com/learn/latex/Tutorials

9 | Životopis

Zovem se Dario Jurić. Trenutno sam po zanimanju sveučilišni prvostupnik matematike. Imam završen preddiplomski sveučilišni studij u Zagrebu u Hrvatskoj i ostvarenih 200 ECTS bodova. To sam završio u Republici Hrvatskoj, na Sveučilištu u Zagrebu na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu, 2012. godine. Trenutno izučavam matematiku i računarstvo na Sveučilišnom diplomskom studiju matematike na Sveučilištu Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku u Hrvatskoj. U životu me zanimaju matematika i računarstvo i smatram ta područja u znanosti zanimljivim, konstruktivnim i kreativnim, u matematici, računarstvu i sličnim znanstvenim područjima.

10 | Biography

My name is Dario Jurić. I am currently a university bachelor by profession mathematics. I have completed undergraduate university studies in Zagreb, in Croatia and achieved 200 ECTS points. I finished that in the Republic of Croatia, at the University of Zagreb at the Faculty of Science and Mathematics in Zagreb, in 2012. I am currently studying mathematics and computer science at the University graduate studies in mathematics at Josip Juraj Strossmayer University in Osijek in Croatia. In my life I am interested in mathematics and computer science and I consider those areas in science interesting, constructive and creative, in mathematics, computing and similar scientific fields.