

Numerické integrovanie

Pavol ORŠANSKÝ

12. októbra 2023

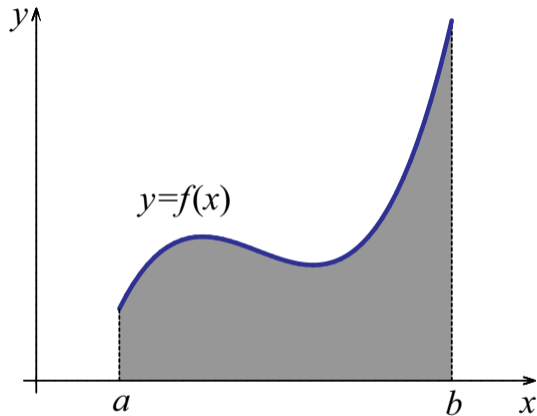
Riešenie určitého integrálu funkcie $f(x)$ na intervale $[a, b]$ pomocou známeho Newton-Leibnitzovho vzorca

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

je známa záležitosť pokiaľ poznáme primitívnu funkciu. V praxi sa často stane, že primitívnu funkciu $F(x)$ k funkcii $f(x)$ nevieme nájsť, či svojou zložitosťou prestáva mať praktické využitie alebo dokonca vôbec neexistuje.

My sa zameriame na problematiku výpočtu určitého integrálu $\int_a^b f(x)dx$ z pohľadu jeho **geometrickej interpretácie**, t. j. tento nám určuje **obsah plochy** vymedzený grafom funkcie $f(x)$ a osou x -ovou v medziach intervalu $[a, b]$ (resp.: $a \leq x \leq b$).

Numerický výpočet tohto integrálu budeme nazývať **numerická kvadratura**.



Obr.: Geometrická interpretácia určitého integrálu $\int_a^b f(x)dx$.

Newton-Cotesova metóda je založená na **nahradení funkcie** $f(x)$ na intervale $[a, b]$ **interpolačným polynómom s ekvidištančnými uzlami patričného stupňa**, ktorý už následne zintegrujeme veľmi ľahko.

Z pohľadu rozmiestnenia určenia polynómu uzlovými bodmi môžeme metódy rozdeliť do dvoch skupín, a to:

- a) **uzavreté vzorce** - krajné body intervalu $[a, b]$ sú zároveň uzlovými,
- b) **otvorené vzorce** - krajné body intervalu $[a, b]$ nie sú uzlovými bodmi a uzly sú rozmiestnené symetricky okolo stredu intervalu $[a, b]$.

My sa budeme v ďalšom zaoberať metódami uzavretými.

Elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Elementárne uzavreté lichobežníkové pravidlo

Funkciu $f(x)$ nahradíme na intervale $[a, b]$ lineárnym interpolačným polynómom

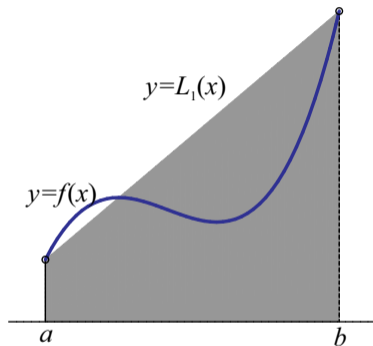
$$L_1(x) = f(a) \cdot \frac{x - b}{a - b} + f(b) \cdot \frac{x - a}{b - a},$$

jeho integráciou, použitím jednoduchých úprav, dostávame pre integrál odhad, tzv. **elementárne uzavreté lichobežníkové pravidlo**

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b L_1(x) dx = \int_a^b \left(f(a) \cdot \frac{x - b}{a - b} + f(b) \cdot \frac{x - a}{b - a} \right) dx \\ &= \dots = \frac{b - a}{2} (f(a) + f(b)). \end{aligned}$$

Elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Elementárne uzavreté lichobežníkovo pravidlo



Obr.: Geometrická interpretácia elementárneho uzavretého lichobežníkovho¹ pravidla.

¹Názov metódy pochádza z nahradenia plochy integrálu lichobežníkom s vrcholmi $a, b, f(b), f(a)$.

Elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Elementárne uzavreté Simpsonovo pravidlo

Nahradením funkcie $f(x)$ kvadratickým interpolačným polynómom

$$L_2(x) = f(a) \cdot \frac{(x-s)(x-b)}{(a-s)(a-b)} + f(s) \cdot \frac{(x-a)(x-b)}{(s-a)(s-b)} + f(b) \cdot \frac{(x-a)(x-s)}{(b-a)(b-s)},$$

kde $s = \frac{a+b}{2}$ je stred intervalu $[a, b]$.

Dosadením a integráciou dostávame **elementárne uzavreté Simpsonovo pravidlo**

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b L_2(x) dx = \dots = \frac{b-a}{6} (f(a) + 4f(s) + f(b)) \\ &= \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right). \end{aligned}$$

Elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Elementárne uzavreté Simpsonovo pravidlo

Elementárne uzavreté Simpsonovo pravidlo pri označení

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

kde

$$f(x_0) = f_0, \quad f(x_1) = f_1, \quad f(x_2) = f_2,$$

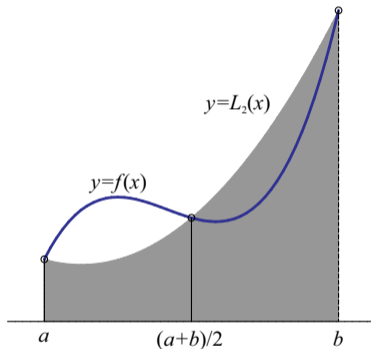
môžeme zapísať v tvare

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} (f_0 + 4f_1 + f_2).$$

Toto pravidlo (vzorec) je trojkroké (druhého stupňa, keďže $n = 2$, $i = 0, 1, 2$).

Elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Elementárne uzavreté Simpsonovo pravidlo



Obr.: Geometrická interpretácia elementárneho uzavretého lichobežníkovho pravidla.

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zovšeobecnený elementárny uzavretý Newton-Cotesov vzorec

Zovšeobecnený elementárny uzavretý Newton-Cotesov vzorec

vznikne nahradením $f(x)$ Lagrangeovým interpolačným polynómom stupňa n

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx = (b-a) \sum_{i=0}^n H_i \cdot f_i,$$

kde H_i sú Cotesove koeficienty a x_i sú uzly, $x_i = a + ih$, kde $h = \frac{b-a}{n}$ je krok pre indexovú množinu $i = 0, 1, \dots, n$, pri označení $f_i = f(x_i)$.

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

stupeň	názov metódy	vzorec
$n = 1$	lichobežníkové	$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} (f_0 + f_1)$
$n = 2$	Simpsonovo	$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} (f_0 + 4f_1 + f_2)$
$n = 3$	3/8 Simpsonovo	$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$
$n = 4$	Booleho	$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90} (7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Chyba Zovšeobecneného elementárneho Newton-Cotesových vzorcov

Chyba Zovšeobecneného elementárneho Newton-Cotesových vzorcov priamo závisí na chybe interpolačného polynómu

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi) (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)dx,$$

kde $\xi \in [a, b]$.

Riešením tohto integrálu dostávame odhad zvlášť pre n párne a n nepárne.

$$\varepsilon(x) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_a^b x(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)dx, \quad \text{pre } n \text{ párne,}$$

$$\varepsilon(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)dx, \quad \text{pre } n \text{ nepárne,}$$

kde $\xi \in [a, b]$.

Zovšeobecnené elementárne uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Chyba zovšeobecneného elementárneho Newton-Cotesových vzorcov

Chyba zovšeobecneného elementárneho Newton-Cotesových vzorcov

Tieto integrály je možné pre konkrétne stupne n vypočítať. V tabuľke uvádzame prehľad chýb elementárnych Newton-Cotesových vzorcov

stupeň	názov metódy	chyba
$n = 1$	lichobežníkové	$\varepsilon(x) = -\frac{(b-a)^3}{12} \cdot f^{(2)}(\xi)$
$n = 2$	Simpsonovo	$\varepsilon(x) = -\frac{(b-a)^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$
$n = 3$	3/8 Simpsonovo	$\varepsilon(x) = -\frac{3(b-a)^5}{80} \cdot f^{(4)}(\xi)$
$n = 4$	Booleho	$\varepsilon(x) = -\frac{8(b-a)^7}{945} \cdot f^{(6)}(\xi)$

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Motivácia pre zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

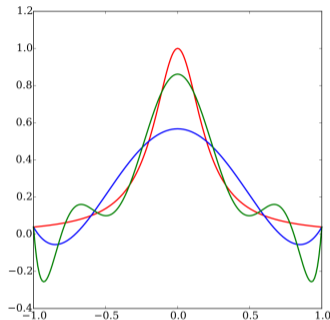
Dalo by sa očakávať, že so zvyšujúcim počtom podintervalov, sa bude presnosť zvyšovať (a chyba znižovať).

Opak je však pravdou. I z predošlej tabuľky je vidno, že vyšší stupeň interpolačného polynómu nezaručuje vo všeobecnosti vyššiu presnosť, skôr naopak. Spomeňme tiež tendenciu polynómov vyšších rádov oscilovať mimo uzlových bodov, tzv. *Rungeho paradox*.

To viedlo k myšlienke **rozdelenia intervalu $[a, b]$ na sieť podintervalov a na jednotlivých podintervaloch použiť elementárne Newton-Cotesove vzorce.**

Pri zachovaní ekvidištantnosti siete, týmto dostávame tzv. **zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce.**

Rungeho paradox



Obr.: Ukážka Rungeho paradoxu pri aproximácii Rungeho funkcie $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$, ktorá je vykreslená červenou krivkou. Modrá krivka je interpolačnou polynóm rádu $n = 5$ (používa šesť ekvidištantných uzlových bodov). Zelená krivka je interpolačnou polynóm rádu $n = 9$ (používa desať ekvidištantných uzlov).

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zložené uzavreté lichobežníkové pravidlo

Rozdelíme interval $[a, b]$ na **sieť** m (indexová množina bude odteraz $i = 0, 1, 2, \dots, m$.) ekvidižtantných podintervalov dĺžky $h = \frac{b-a}{m}$, teda pre uzlové body platí $x_{i+1} - x_i = h$

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_m = b.$$

Na každom z týchto podintervalom aplikujeme elementárne lichobežníkové pravidlo.

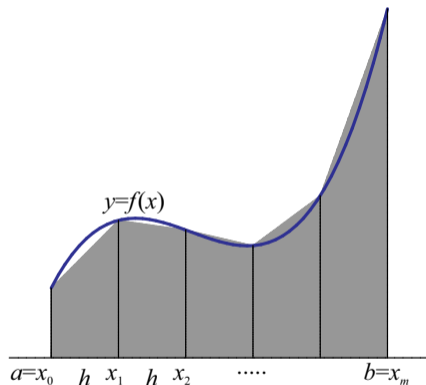
$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{m-1}}^{x_m} f(x) dx \\ &\approx \frac{h}{2} (f_0 + f_1) + \frac{h}{2} (f_1 + f_2) + \dots + \frac{h}{2} (f_{m-1} + f_m), \end{aligned}$$

po úprave dostávame **zložené uzavreté lichobežníkové pravidlo**

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \cdot \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{m-1} + \frac{1}{2} f_m \right).$$

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zložené uzavreté lichobežníkové pravidlo



Obr.: Grafická interpretácia zloženého uzavretého lichobežníkovho pravidla

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Chyba zloženého uzavretého lichobežníkovho pravidla

Chyba na každom z podintervalov $[x_{i+1}, x_i]$ je daná vzťahom

$$\varepsilon_i(x) = -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_i),$$

čo pre celkovú chybu predstavuje

$$\varepsilon(x) = -\frac{h^3}{12} \left(f^{(2)}(\xi_1) + f^{(2)}(\xi_2) + \dots + f^{(2)}(\xi_m) \right)$$

Pre spojitú funkciu $f(x)$ na intervale $[a, b]$ existuje také $\xi \in [a, b]$, že platí

$$m \cdot f^{(2)}(\xi) = f^{(2)}(\xi_1) + f^{(2)}(\xi_2) + \dots + f^{(2)}(\xi_m).$$

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Chyba zloženého uzavretého lichobežníkovho pravidla

A teda pre odhad chyby zloženého lichobežníkového pravidla platí

$$\varepsilon(x) = -\frac{h^3}{12} m \cdot f^{(2)}(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12m^3} m \cdot f^{(2)}(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f^{(2)}(\xi).$$

Pre praktické účely je však vhodnejšie použiť horný odhad, teda **odhad chyby zloženého lichobežníkového pravidla** je

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

kde $M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(2)}(x)|$.

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Zložené uzavreté Simpsonovo pravidlo

Podobným spôsobom môžeme odvodiť **zložené uzavreté Simpsonovo pravidlo**. Interval $[a, b]$ však teraz rozdelíme **na párny** $m = 2n$ **počet podintervalov** dĺžky $h = \frac{b-a}{m}$ a na dvojice susedných podintervalov použijeme elementárne Simpsonovo pravidlo, teda interpolačný polynóm druhého stupňa.

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx h \left[\left(\frac{1}{3} f_0 + \frac{4}{3} f_1 + \frac{1}{3} f_2 \right) + \left(\frac{1}{3} f_2 + \frac{4}{3} f_3 + \frac{1}{3} f_4 \right) \right. \\ &\quad \left. + \dots + \left(\frac{1}{3} f_{m-2} + \frac{4}{3} f_{m-1} + \frac{1}{3} f_m \right) \right] \\ &= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 2f_{m-2} + 4f_{m-1} + f_m). \end{aligned}$$

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Chyba zloženého uzavretého Simpsonovho pravidla

Chyba zloženého Simpsonovho pravidla je daná výrazom

$$\varepsilon(x) = -\frac{mh^5}{90}f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)h^5}{90}f^{(4)}(\xi).$$

Jej horný odhad potom je

$$|\varepsilon(x)| \leq \frac{(b-a)^5}{90m^4}M_4,$$

kde $M_4 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$.

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Príklad zloženého uzavretého lichobežníkovu a Simpsonovho pravidla

Príklad (1.i)

Určme približné riešenie určitého integrálu

$$\int_1^4 \sqrt{1+x^3} dx$$

s počtom krokov $m = 6$

- a) lichobežníkovou metódou,
- b) Simpsonovou metódou.

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Príklad použitia zloženého uzavretého lichobežníkovo a Simpsonovho pravidla

Príklad (1.ii)

Pre $m = 6$ je krok na danom intervale $h = \frac{b-a}{m} = \frac{4-1}{6} = 0.5$.

x_i	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
$f_i = f(x_i) = \sqrt{1 + x_i^3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{4.375}$	3	$\sqrt{16.625}$	$\sqrt{28}$	$\sqrt{43.875}$	$\sqrt{65}$

a) Použitím *lichobežníkového* pravidla dostávame

$$\int_1^4 \sqrt{1 + x^3} dx \approx 0.5 \left(\frac{1}{2} \sqrt{2} + \sqrt{4.375} + 3 + \sqrt{16.625} + \sqrt{28} + \sqrt{43.875} + \frac{1}{2} \sqrt{65} \right)$$
$$\doteq 12.911.$$

Zložené uzavreté Newton-Cotesove vzorce

Príklad použitia zloženého uzavretého lichobežníkovo a Simpsonovho pravidla

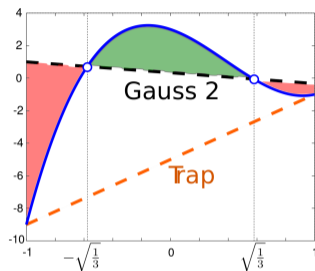
Príklad (1.iii)

Pre $m = 6$ je krok na danom intervale $h = \frac{b-a}{m} = \frac{4-1}{6} = 0.5$.

x_i	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
$f_i = f(x_i) = \sqrt{1 + x_i^3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{4.375}$	3	$\sqrt{16.625}$	$\sqrt{28}$	$\sqrt{43.875}$	$\sqrt{65}$

b) *Simpsonovým pravidlom* máme pre približné riešenie

$$\int_1^4 \sqrt{1+x^3} dx \approx \frac{0.5}{3} \left(\sqrt{2} + 4\sqrt{4.375} + 2 \cdot 3 + 4\sqrt{16.625} + 2\sqrt{28} + 4\sqrt{43.875} + \sqrt{65} \right)$$
$$\doteq 12.872.$$



Obr.: Porovnanie lichobežníkového pravidla a Gaussovej kvadratúry pre dva uzlové body.

Polynóm $f(x) = 7x^3 - 8x^2 - 3x + 3$, pre ktorý platí $\int_{-1}^1 (7x^3 - 8x^2 - 3x + 3)dx = 2/3$, je

aproximovaný lichobežníkom vo funkčných hodnotách $f(-1) + f(1) = -10$ a Gaussovou kvadratúrou 2. rádu, t. j. súčtom $1 \cdot f(-\sqrt{1/3}) + 1 \cdot f(\sqrt{1/3}) = 2/3$ (nakoľko červené plochy a zelená plocha sú rovnaké).

Gaussova kvadratura je ďalšou možnosťou numerického riešenia určitého integrálu. Jej základom je nahradenie integrálu radom, ktorého sčítance sú súčiny koeficientov A_j a funkčných hodnôt integrantu v uzlových bodoch a_j , a teda platí

$$\int_a^b f(x) \cdot v(x) dx \approx \sum_{j=1}^n A_j \cdot f(a_j).$$

Tieto uzlové body a_j sú korene **ortogonálnych polynómov**, čo sú špeciálne funkcie s mnohými zaujímavými vlastnosťami.

V ďalšom si uvedieme definíciu ortogonálnych polynómov a priblížime si niektoré z týchto vlastností

Definícia (Ortogonalné polynómy)

Postupnosť polynómov $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ nazývame *ortogonalné polynómy s váhovou funkciou* $v(x)$, ak pre stupeň polynómu $\deg(\varphi) = i$ platí

$$\int_a^b \varphi_i(x) \cdot \varphi_j(x) \cdot v(x) dx = 0, \quad \text{pre } i \neq j.$$

Poznámka (Postupnosť ortogonálnych polynómov tvorí bázu vektor. priestoru)

Množina všetkých polynómov tvorí vektorový priestor, na ktorom je definovaná operácia skalárneho súčinu funkcií

$$\langle p(x), q(x) \rangle_{v(x)} = \int_a^b p(x) q(x) v(x) dx,$$

kde každá postupnosť ortogonálnych polynómov tvorí bázu tohto priestoru.

Veta (Trojčlenný rekurentný vzťah)

Monické ortogonálne polynómy vyhovujú tzv. trojčlennému rekurentnému vzťahu

$$\varphi_{k+1}(x) = (x - \alpha_k) \cdot \varphi_k(x) - \beta_k \cdot \varphi_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n,$$

$$\varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = x - \alpha_1,$$

kde koeficienty α_k a β_k sú dané vzťahmi

$$\alpha_k = \frac{\int_a^b x \cdot \varphi_k^2(x) \cdot v(x) dx}{\int_a^b \varphi_k^2(x) \cdot v(x) dx}, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

$$\beta_k = \frac{\int_a^b \varphi_k^2(x) \cdot v(x) dx}{\int_a^b \varphi_{k-1}^2(x) \cdot v(x) dx}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Definícia (Systém ortonormálnych polynómov)

Systém normovaných ortogonálnych polynómov

$$\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_{n+1}(x),$$

t. j. norma $\|\psi_k(x)\| = 1, \forall k = 0, 1, 2, \dots,$

$$\psi_k(x) = \frac{\varphi_k(x)}{\|\varphi_k(x)\|} = \frac{\varphi_k(x)}{\sqrt{\int_a^b \varphi_k^2(x) \cdot v(x) dx}}$$

nazývame systém ortonormálnych polynómov s váhovou funkciou $v(x)$ na intervale ortogonalitity $[a, b]$.

Ortogonálne polynómy - Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy

Dôsledok (Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy 1.)

Trojčlenný rekurentný vzťah pre systém ortonormálnych polynómov $\{\psi_k(x)\}_{k=0}^n$ má tvar

$$\sqrt{\beta_{k+1}} \cdot \psi_{k+1}(x) = (x - \alpha_k) \cdot \psi_k(x) - \sqrt{\beta_k} \cdot \psi_{k-1}(x),$$

kde

$$\psi_{-1}(x) = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\beta_0} \quad a \quad \beta_0 = \int_a^b v(x) dx.$$

Označme $\Phi_n(x) = \begin{pmatrix} \psi_0(x) \\ \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_n(x) \end{pmatrix}$ vektor funkcií tvorený ortonormálnymi polynómami.

Ortogonálne polynómy - Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy

Dôsledok (Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy 2.)

Trojčlenný rekurentný vzťah má potom všeobecný tvar zapísaný v maticovom tvare

$$x \cdot \Phi_n(x) = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & \cdots & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \alpha_{n-1} & \sqrt{\beta_n} \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{pmatrix} \cdot \Phi_n(x) + \sqrt{\beta_{n+1}} \cdot \psi_{n+1}(x) \cdot e_n,$$

kde e_n je n -tý stĺpec jednotkovej matice stupňa n .

Ortogonalné polynómy - Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy

Dôsledok (Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy 3.)

Označme maticu

$$J_{n+1} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & \cdots & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \alpha_{n-1} & \sqrt{\beta_n} \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

ako Jacobiho maticu.

Nech a je koreňom ortonormálneho (a aj ortogonálneho) polynómu $\psi_{n+1}(x)$, t. j.

$\psi_{n+1}(a) = 0$.

Ortogonálne polynómy - Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy

Dôsledok (Trojčlenný rekurentný vzťah pre ortonormálne polynómy 4.)

Potom má trojčlenný rekurentný vzťah v maticovom zápise tvar

$$a \cdot \Phi_n(a) = J_{n+1} \cdot \Phi_n(a)$$

čo je tvar maticovej rovnice vlastných čísel a vektorov matice J_{n+1} .

Teda $\Phi_n(a)$ sú vlastné vektory matice J_{n+1} prislúchajúce vlastným číslam a matice J_{n+1} .

Klasické ortogonálne polynómy - Legendreove polynómy

Váhová funkcia $v(x) = 1$, na intervale ortogonalnosti $x \in [-1, 1]$, rekurentný vzťah

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} \cdot x \cdot P_n(x) - \frac{n}{n+1} \cdot P_{n-1}(x).$$

$$P_0(x) = 0,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},$$

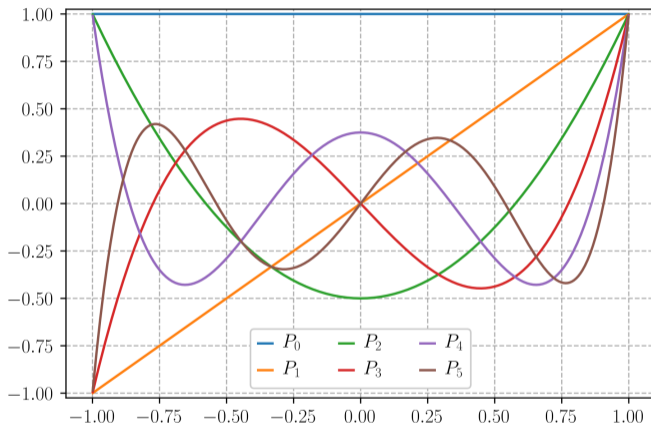
$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x,$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x^2 + \frac{3}{8},$$

$$P_5(x) = \frac{63}{8}x^5 - \frac{70}{8}x^3 + \frac{15}{8}x,$$

atd'.

Klasické ortogonálne polynómy - Legendreove polynómy



Obr.: Prvých šesť Legendreových polynómov

Váhová funkcia $v(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, interval ortogonalnosti $x \in [-1, 1]$, rekurentný vzťah

$$T_{n+1}(x) = 2x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x).$$

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = x,$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1,$$

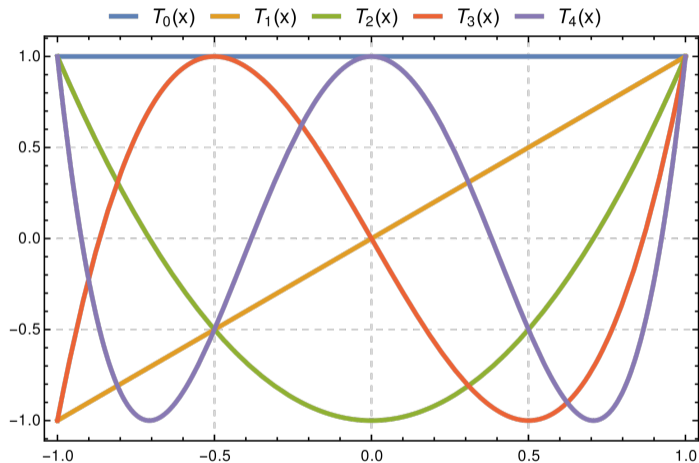
$$T_3(x) = 4x^3 - 3x,$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1,$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x,$$

atď.

Klasické ortogonálne polynómy - Čebyševove polynómy 1. druhu



Obr.: Prvých päť Čebyševových polynómov 1. druhu

Váhová funkcia $v(x) = \sqrt{1-x^2}$, interval ortogonalít $x \in [-1, 1]$, rekurentný vzťah

$$U_{n+1}(x) = 2x \cdot U_n(x) - U_{n-1}(x).$$

$$U_0(x) = 1,$$

$$U_1(x) = 2x,$$

$$U_2(x) = 4x^2 - 1,$$

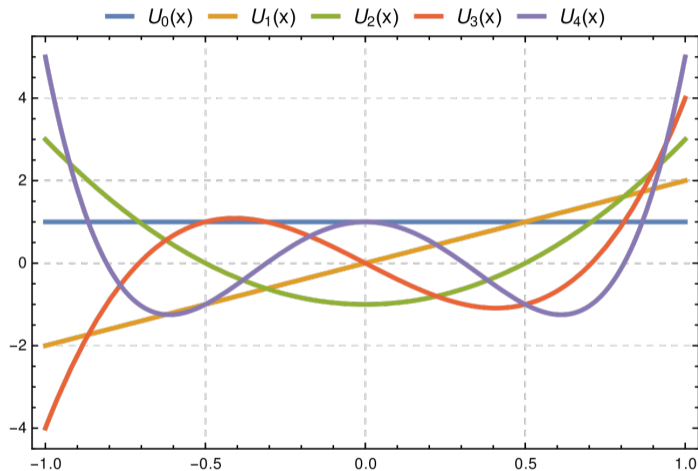
$$U_3(x) = 8x^3 - 4x,$$

$$U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1,$$

$$U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x,$$

atď.

Klasické ortogonálne polynómy - Čebyševove polynómy 2. druhu



Obr.: Prvých päť Čebyševových polynómov 2. druhu

Váhová funkcia $v(x) = e^{-x}$, interval ortogonalnosti $x \in [-1, \infty)$, rekurentný vzťah

$$L_{n+1}(x) = \frac{2n+1-x}{n+1} \cdot L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1}(x).$$

$$L_0(x) = 1,$$

$$L_1(x) = -x + 1,$$

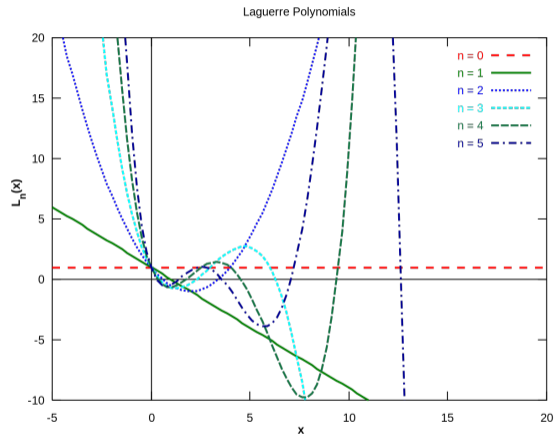
$$L_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1,$$

$$L_3(x) = \frac{-1}{6}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 3x + 1,$$

$$L_4(x) = \frac{1}{24}x^4 - 16x^3 + 3x^3 - 4x + 1,$$

atď.

Klasické ortogonálne polynómy - Laguerreove polynómy



Obr.: Prvých šesť Laguerreových polynómov

Váhová funkcia $v(x) = e^{-x^2}$, interval ortogonalít $x \in (-\infty, \infty)$, rekurentný vzťah

$$H_{n+1}(x) = x \cdot H_n(x) - H'_n(x).$$

$$H_0(x) = 1,$$

$$H_1(x) = 2x,$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2,$$

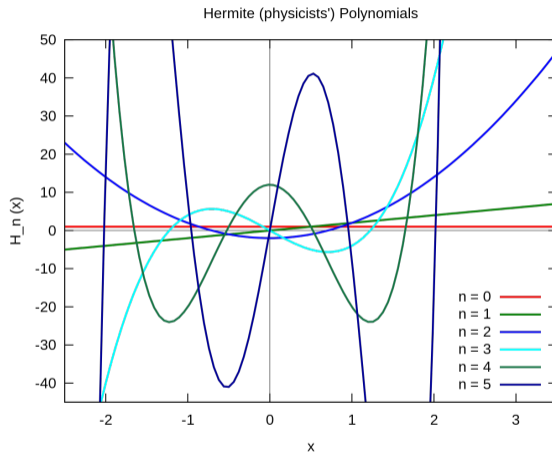
$$H_3(x) = 8x^3 - 12x,$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12,$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x,$$

atď.

Klasické ortogonálne polynómy - Hermiteové polynómy



Obr.: Prvých šesť Hermiteových polynómov

Pre **Gaussovu kvadrátúrnú formulu** platí

$$\int_a^b f(x)dx - \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m A_{i,j} \cdot f^{(i-1)}(a_{i,j}) = \varepsilon(f), \quad (1)$$

kde výraz $\varepsilon(f)$ označuje chybu tejto kvadratúry. Koeficienty $A_{i,j}$ a čísla $a_{i,j}$ volíme tak, aby táto chyba bola minimálna.

Predpokladáme $m = 1$ teda, že aproximácia nezávisí na deriváciách funkcie $f(x)$, a teda Gaussova kvadrátúrna formula (1) má tvar

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^n A_j \cdot f(a_j) + \varepsilon(f).$$

Pri aproximácii integrálu volíme celkovo $2n$ konštánt (n koeficientov A_j a n uzlových bodov a_j). Najvyšší stupeň presnosti je teda $(2n - 1)$.

Veta (Najvyšší stupeň presnosti dosiahneme použitím korenov ortogonálnych polynómov)

Nech kvadrátúrna formula má tvar

$$Q(f) = \sum_{j=1}^n A_j \cdot f(a_j)$$

a nech systém polynómov

$$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$$

tvorí systém ortogonálnych polynómov na intervale ortogonalít $[a, b]$ vzhľadom na váhovú funkciu $v(x)$.

Potom táto formula má stupeň presnosti $(2n - 1)$ práve vtedy, keď uzly tejto formuly sú korene ortogonálnych polynómov $\varphi_n(x)$.

Propozícia (Určenie koeficientov Gaussovej kvadratickej formuly)

Ak uzly a_j sú korene ortogonálneho polynómu $\varphi_n(x)$ príslušného stupňa, koeficienty Gaussovej kvadratúry A_j môžeme vypočítať:

- metódou neurčitých koeficientov

$$\int_a^b v(x) \cdot x^k dx = \sum_{j=1}^n A_j \cdot a_j^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

- integráciou elementárneho interpolačného polynómu $l_j(x) = \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq j}} \frac{x - x_i}{x_j - x_i}$

$$A_j = \int_a^b v(x) \cdot l_j(x) dx = \int_a^b v(x) \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq j}} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} dx.$$

Poznámka

Každý polynóm (teda aj ortogonálny) vieme zapísať ako súčin koreňových činiteľov

$$\varphi_n(x) = (x - a_1)(x - a_2) \dots (x - a_n),$$

a preto elementárny Lagrangeov interpolačný polynóm má tvar

$$l_j(x) = \frac{\varphi_n(x)}{(x - a_j) \varphi_n'(x)},$$

odkiaľ platí

$$A_j = \int_a^b v(x) \cdot l_j(x) dx = \int_a^b v(x) \frac{\varphi_n(x)}{(x - a_j) \varphi_n'(x)} dx.$$

Poznámka

Pre ortogonálne polynómy v nenormovanom tvare (koeficient pri najvyššej mocnine x je rôzny od 1) majú koeficienty tvar

$$A_j = \frac{-\alpha_{n+1} \cdot \gamma_n}{\alpha_n \cdot \varphi_{n+1}(a_j) \cdot \varphi_n'(a_j)},$$

kde

$$\gamma_n = \int_a^b v(x) \cdot \varphi_n^2(x) dx$$

a α_{n+1} , α_n sú koeficienty pri najvyššej mocnine x polynómov $\varphi_{n+1}(x)$, $\varphi_n(x)$.

Gaussova-Legendreova kvadratická formula

Legendreove polynómy sú ortogonálne na intervale ortogonalít $[-1, 1]$ s váhovou funkciou $v(x) = 1$ a pre koeficienty **Gaussovej-Legendreovej kvadratury** platí

$$A_j = \frac{2(1 - a_j^2)}{n^2 (P_{n-1}(a_j))^2}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n.$$

n	uzly a_j	koeficienty A_j
2	$\pm\sqrt{3}/3$	1
3	0 $\pm\sqrt{3/5}$	8/9 5/9
4	± 0.339981 ± 0.861136	0.652145 0.347855
5	0 ± 0.538469 ± 0.906180	0.568889 0.478659 0.236927

Príklad (2.a)

Pomocou Gaussovo-Legendreovej kvadratury pre $n = 3$ odhadnime

$$\int_1^3 \ln x dx.$$

Je potrebné zmeniť interval $[-1, 1]$ substitúciou $x = t + 2$ na interval $[1, 3]$. Korene Legendreového polynómu stupňa $n = 3$ sú

$$a_1 = -\sqrt{3/5}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = \sqrt{3/5}.$$

Príklad (2.b)

Hodnoty koeficientov vypočítame podľa vyššie uvedeného vzťahu, kde dosádzame do Legendreovho polynómu druhého stupňa $P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$.

$$A_1 = \frac{2(1 - a_1^2)}{3^2 (P_2(a_1))^2} = \frac{2 \left(1 - \left(-\sqrt{3/5}\right)^2\right)}{3^2 \left(\frac{3}{2} \left(-\sqrt{3/5}\right)^2 - \frac{1}{2}\right)^2} = \frac{5}{9},$$

$$A_2 = \frac{2(1 - a_2^2)}{3^2 (P_2(a_2))^2} = \frac{2(1 - 0)}{3^2 \left(\frac{3}{2} \cdot 0 - \frac{1}{2}\right)^2} = \frac{8}{9},$$

$$A_3 = \frac{2(1 - a_3^2)}{3^2 (P_2(a_3))^2} = \frac{2 \left(1 - \left(\sqrt{3/5}\right)^2\right)}{3^2 \left(\frac{3}{2} \left(\sqrt{3/5}\right)^2 - \frac{1}{2}\right)^2} = \frac{5}{9}.$$

Príklad (2.c)

Teraz môžeme pristúpiť k výpočtu samotného odhadu integrálu pomocou Gaussovo-Legendreovej kvadraturej formuly, kde koeficienty sú $A_1 = 5/9$, $A_2 = 8/9$, $A_3 = 5/9$ a uzlové hodnoty sú $a_1 = -\sqrt{3/5}$, $a_2 = 0$, $a_3 = \sqrt{3/5}$. Čiže platí

$$\begin{aligned}\int_1^3 \ln(t+2) dt &\approx \sum_{j=1}^3 A_j \cdot f(a_j) = \frac{5}{9} \cdot f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9} \cdot f(0) + \frac{5}{9} \cdot f\left(\sqrt{3/5}\right) \\ &= \frac{5}{9} \cdot \ln\left(-\sqrt{3/5} + 2\right) + \frac{8}{9} \cdot \ln(0 + 2) + \frac{5}{9} \cdot \ln\left(\sqrt{3/5} + 2\right) \\ &\doteq 1.2960.\end{aligned}$$

Pre porovnanie hodnota presné riešenia je $(3 \ln 2 - 2) \doteq 1.2958$.

Príklad (3.a)

Pomocou Gaussovej-Legendreovej kvadratury s tromi uzlovými bodmi nájdime približnú hodnotu integrálu

$$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx.$$

Legendrov polynóm tretieho stupňa $P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$ má tri korene

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{\sqrt{15}}{5}, \quad a_3 = -\frac{\sqrt{15}}{5},$$

keďže platí

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x = \frac{5}{2}x \left(x - \frac{\sqrt{15}}{5} \right) \left(x + \frac{\sqrt{15}}{5} \right).$$

Príklad (3.b)

Koeficienty A_1, A_2, A_3 vypočítame metódou neurčitých koeficientov, teda riešením sústavy

$$\sum_{j=1}^n A_j \cdot a_j^k = \int_a^b v(x) \cdot x^k dx,$$

pre $k = 0, 1, 2$, t. j. pre váhovú funkciu $v(x) = 1$ platí

$$A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-1}^1 1 dx = [x]_{-1}^1 = 2,$$

$$A_1 \cdot 0 + A_2 \frac{\sqrt{15}}{5} + A_3 \left(-\frac{\sqrt{15}}{5} \right) = \int_{-1}^1 x dx = \left[\frac{x^2}{2} \right]_{-1}^1 = 0,$$

$$A_1 \cdot 0^2 + A_2 \left(\frac{\sqrt{15}}{5} \right)^2 + A_3 \left(-\frac{\sqrt{15}}{5} \right)^2 = \int_{-1}^1 x^2 dx = \left[\frac{x^3}{3} \right]_{-1}^1 = \frac{2}{3},$$

Príklad (3.c)

Jej riešením je trojica hodnôt

$$A_1 = \frac{8}{9}, \quad A_2 = \frac{5}{9}, \quad A_3 = \frac{5}{9},$$

preto pre hľadaný odhad platí

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 e^{-x^2} dx &\approx A_1 \cdot f(a_1) + A_2 \cdot f(a_2) + A_3 \cdot f(a_3) \\ &= \frac{8}{9} \cdot e^0 + \frac{5}{9} \cdot e^{-\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)^2} + \frac{5}{9} \cdot e^{-\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right)^2} \\ &\doteq 1.4987. \quad [\dots = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(1) = 1.4936] \end{aligned}$$

Gaussova-Čebyševova kvadratická formula 1. druhu

Čebyševove polynómy 1. druhu sú ortogonálne polynómy na intervale ortogonalít $[-1, 1]$ s váhovou funkciou

$$v(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

a pre koeficienty jej **Gaussovej-Čebyševovej kvadratury** platí

$$A_j = \frac{\pi}{n}, \quad j = 2, 3, \dots, n.$$

n	uzly a_j	koeficienty A_j
2	$\pm \frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{\pi}{2}$
3	0 $\pm \frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\pi}{3}$
4	± 0.92386 ± 0.38268	$\frac{\pi}{4}$

Gaussova-Čebyševova kvadratická formula 1. druhu

Príklad (4.a)

Využitím Gaussovej-Čebyševovovej kvadratickej formuly 1. druhu odhadnime

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

Korene Čebyševovho polynómu 1. druhu tretieho (zvolili sme $n = 3$) rádu

$T_3(x) = 4x^3 - 3x$ sú $a_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}$, $a_2 = 0$, $a_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}$ a príslušné koeficienty sú

$$A_1 = A_2 = A_3 = \frac{\pi}{n} = \frac{\pi}{3}.$$

Pripomeňme ešte, že váhová funkcia Čebyševovho polynómu 1. druhu je

$$v(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Gaussova-Čebyševova kvadratická formula 1. druhu

Príklad (4.b)

Odhad integrálu pomocou Gaussovej-Čebyševovovej kvadratickej formuly 1. druhu je

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 \frac{\arccos x}{\sqrt{1-x^2}} dx &= \int_{-1}^1 \arccos x \cdot \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \sum_{j=1}^3 A_j \cdot f(a_j) \\ &= \frac{\pi}{3} \cdot f\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \frac{\pi}{3} \cdot f(0) + \frac{\pi}{3} \cdot f\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\ &= \frac{\pi}{3} \cdot \arccos\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \frac{\pi}{3} \cdot \arccos(0) + \frac{\pi}{3} \cdot \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\ &\doteq 4.93480. \quad \left[\dots = \frac{\pi^2}{2} \doteq 4.9348 \right]\end{aligned}$$

Gaussova-Laguerreova kvadratická formula

Laguerreove polynómy sú ortogonálne polynómy na nekonečnom intervale ortogonalít $[0, \infty)$ s váhovou funkciou

$$v(x) = e^{-x}.$$

n	uzly a_j	koeficienty A_j
2	$2 - \sqrt{2}$	$\frac{2+\sqrt{2}}{4}$
	$2 + \sqrt{2}$	$\frac{2-\sqrt{2}}{4}$
3	0.415775	0.711093
	2.294280	0.278518
	6.289945	0.010389
4	0.322548	0.603154
	1.745761	0.357419
	4.536620	0.038888
	9.395071	0.000539

Príklad (5.a)

Odhadnime Gaussovou-Laguerreovou kvadraturou pre $n = 2$ integrál

$$\int_0^{\infty} e^{-x} \cdot \sin x dx.$$

Laguerrov polynóm druhého stupňa má tvar

$$L_2(x) = \left(x - \left(2 - \sqrt{2}\right)\right) \left(x - \left(2 + \sqrt{2}\right)\right) = x^2 - 4x + 2,$$

vidíme, že jeho korene sú

$$a_1 = 2 - \sqrt{2},$$

$$a_2 = 2 + \sqrt{2}.$$

Príklad (5.b)

Koeficienty A_1, A_2 vypočítame integráciou interpolačného polynómu stupňa $n = 2$, ktorého korene sú $a_1 = 2 - \sqrt{2}$, $a_2 = 2 + \sqrt{2}$, a teda platí

$$\begin{aligned} A_1 &= \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{x - (2 + \sqrt{2})}{2 - \sqrt{2} - (2 + \sqrt{2})} dx \\ &= \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{x - 2 - \sqrt{2}}{-2\sqrt{2}} dx = \frac{2 + \sqrt{2}}{4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2 &= \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{x - (2 - \sqrt{2})}{2 + \sqrt{2} - (2 - \sqrt{2})} dx \\ &= \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{x - 2 + \sqrt{2}}{2\sqrt{2}} dx = \frac{2 - \sqrt{2}}{4}. \end{aligned}$$

Príklad (5.c)

Odhadneme hodnotu integrálu

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} e^{-x} \cdot \sin x dx &\approx \frac{2 + \sqrt{2}}{4} \cdot f(2 - \sqrt{2}) + \frac{2 - \sqrt{2}}{4} \cdot f(2 + \sqrt{2}) \\ &= \frac{2 + \sqrt{2}}{4} \sin(2 - \sqrt{2}) + \frac{2 - \sqrt{2}}{4} \sin(2 + \sqrt{2}) \\ &\doteq 0.4325. \quad \left[\dots = \frac{1}{2} = 0.5000 \right]\end{aligned}$$

Príklad (6.)

Odhadnime Gaussovou-Laguerreovou kvadrátúrou pre $n = 3$ predchádzajúci integrál.

$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \doteq (x - 0.4158)(x - 2.2943)(x - 6.2899).$$

$$A_1 = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{(x - 2.2943)(x - 6.2899)}{(0.4158 - 2.2943)(0.4158 - 6.2899)} dx \doteq 0.7111,$$

$$A_2 = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{(x - 0.4158)(x - 6.2899)}{(2.2943 - 0.4158)(2.2943 - 6.2899)} dx \doteq 0.2785,$$

$$A_3 = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{(x - 0.4158)(x - 2.2943)}{(6.2899 - 0.4158)(6.2899 - 2.2943)} dx \doteq 0.0104.$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-x} \cdot \sin x dx &\approx 0.7111 \cdot f(0.4158) + 0.2785 \cdot f(2.2943) + 0.0104 \cdot f(6.2899) \\ &= 0.7111 \cdot \sin(0.4158) + 0.2785 \cdot \sin(2.2943) + 0.0104 \cdot \sin(6.2899) \\ &\doteq 0.4960 \quad [\dots = 1/2 = 0.5000] \end{aligned}$$

Príklad (7.a)

Pomocou Gaussovej-Legendreovej kvadratury s tromi uzlovými bodmi nájdime približnú hodnotu integrálu

$$\int_0^{\infty} e^{-x} \cos x dx.$$

Laguerrov polynóm tretieho stupňa

$$L_3(x) = \frac{1}{6} (-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$$

má tri korene

$$a_1 \doteq 0.4158,$$

$$a_2 \doteq 2.2943,$$

$$a_3 \doteq 6.2899.$$

Príklad (7.b)

Koeficienty A_1, A_2, A_3 vypočítame metódou neurčitých koeficientov, a to riešením sústavy

$$A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-1}^1 e^{-x} dx = [-e^{-x}]_{-1}^1 = 1,$$

$$A_1 \cdot 0.4158 + A_2 \cdot 2.2943 + A_3 \cdot 6.2899 = \int_{-1}^1 x e^{-x} dx = [-e^{-x}(x+1)]_{-1}^1 = 1,$$

$$\begin{aligned} A_1 \cdot (0.4158)^2 + A_2 \cdot (2.2943)^2 + A_3 \cdot (6.2899)^2 &= \int_{-1}^1 x^2 e^{-x} dx \\ &= [-e^{-x}(x^2 + 2x + 2)]_{-1}^1 = 2. \end{aligned}$$

Príklad (7.c)

Riešením sústavy je trojica hodnôt

$$A_1 = 0.7111, \quad A_2 = 0.2785, \quad A_3 = 0.0104.$$

Pre hľadaný odhad platí

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-x} \cos x dx &\approx A_1 \cdot f(a_1) + A_2 \cdot f(a_2) + A_3 \cdot f(a_3) \\ &= 0.7111 \cdot \cos(0.4158) + 0.2785 \cdot \cos(2.2943) + 0.0104 \cdot \cos(6.2899) \\ &\doteq 0.4765. \quad \left[\dots = \frac{1}{2} = 0.5000 \right] \end{aligned}$$