IV NUMERIČKA INTEGRACIJA

0. OPŠTE O NUMERIČKOJ INTEGRACIJI

Neka treba izračunati integral

$$I = \int_a^b f(x)dx. \tag{1}$$

Nalaženje vrednosti integrala (1) naziva se mehanička kvadratura ili, kraće, kvadratura (u slučaju dvostrukog integrala – mehanička kubatura ili, kraće, kubatura). Izračunavanje određenog integrala (1) na osnovu niza poznatih, izračunatih vrednosti $y_i = f(x_i)$, gde čvorovi $x_i \in [a, b]$, $i = \overline{0, n}$, podintegralne funkcije ili integranda $f(x)$ naziva se *približna ili numerička integracija*.

Mogu se konstruisati različite formule za približno nalaženje integrala (1) – *kvadraturne formule*. Najčešće se te formule dobijaju na sledeći način. Funkcija $f(x)$ se zameni (na odsečku $[a, b]$ ili na njegovim delovima) drugom, od nje jednostavnijom funkcijom $F(x)$, koja je u nekom smislu bliska funkciji $f(x)$. Na primer, zahteva se da se funkcije $F(x)$ i $f(x)$ poklapaju u čvorovima, tj. zahteva se da je $F(x_i) = f(x_i)$ $i = \overline{0, n}$. U svojstvu funkcije $F(x)$ uzimaju se ili algebarski polinomi ili trigonometrijski polinomi ili racionalne funkcije, itd, što najčešće zavisi od zadatka. Ako je interval integracije konačan i $f(x)$ na njemu nema singulariteta, onda se može postići visoka tačnost sa polinomima relativno niskog stepena.

Kvadraturne formule su najčešće sledećeg oblika

$$\boxed{I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \quad x_k \in [a, b],} \tag{2}$$

gde se A_k nazivaju koeficijentima a x_k čvorovima kvadraturne formule. Prirodno, $\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ se naziva kvadraturnom sumom. Očigledno je da (2) sadrži $2n + 3$ parametara: n, A_k i x_k $(k = \overline{0, n})$ i oni se biraju tako da bi formula (2) davala što je moguće tačnije rezultate pri integraciji funkcija određene klase. Smisao parametra n je očigledan: što je veće n, to se po pravilu može dostići veća tačnost odgovarajućim izborom A_k i x_k. Prema tome, smatraćemo da je n fiksirano i razmotrićemo zadatak izbora A_k i x_k (nekada ni x_k ne možemo birati, na primer ako je podintegralna funkcija data tablično, onda su x_k fiksirani, pa se mogu birati samo A_k).

1. NJUTN–KOTESOVE KVADRATURNE FORMULE

Neka su čvorovi x_k $(k=\overline{0,n})$ kvadraturne formule (2) na bilo koji način izabrani. Pozabavimo se pitanjem određivanja koeficijenata A_k.

Konstruišimo interpolacioni polinom $L_n(x)$ za funkciju $f(x)$ sa čvorovima x_k $(k=\overline{0,n})$. Dakle,

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{\Pi_{n+1}(x)}{(x-x_k)\Pi'_{n+1}(x_k)}f(x_k),$$

gde je $\Pi_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$. Sada imamo

(3) $$f(x)=L_n(x)+R_n(x).$$

Zamenom (3) u (1) dobija se

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

Imajući u vidu (2) imamo

$$I=\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b L_n(x)dx=\sum_{k=0}^{n}f(x_k)\int_a^b\frac{\Pi_{n+1}(x)}{(x-x_k)\Pi'_{n+1}(x_k)}dx,$$

dakle

(4) $$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k),}$$

gde se koeficijenti kvadraturne formule računaju po formuli

(5) $$\boxed{A_k=\int_a^b\frac{\Pi_{n+1}(x)}{(x-x_k)\Pi'_{n+1}(x_k)}dx\,,\quad k=\overline{0,n}.}$$

Formule (4), (5) se nazivaju *Njutn-Kotesove kvadraturne formule.*

Primetimo da za dati raspored čvorova koeficijenti A_k ne zavise od funkcije $f(x)$.

Greška kvadraturne formule (4) je

(6) $$\boxed{R_n(f)=\int_a^b R_n(x)\,dx=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\Pi_{n+1}(x)\,dx,}$$

a odavde je

(7) $$\boxed{|R_n(f)|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int_a^b|\Pi_{n+1}(x)|\,dx,}$$

gde je $|f^{(n+1)}(x)|\le M_{n+1}<\infty$, $x\in[a,b]$.

Ako je $f(x)=P_m(x)$ i $m\le n$, onda je $R_n(x)\equiv 0$.

Ako su granice integracije a i b ujedno i čvorovi kvadraturne formule, onda je kvadraturna formula (4) *zatvorenog tipa* a u suprotnom slučaju je *otvorenog tipa*.

Sada ćemo izvesti opšti oblik Njutn-Kotesovih kvadraturnih formula sa ekvidistantno raspoređenim čvorovima.

Neka treba izračunati integral

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

Neka su čvorovi $x_0, x_1, ..., x_n$, ekvidistantni, tj. neka je interval integracije podeljen na n jednakih delova dužine

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

odnosno, neka su tačke $x_k = a + kh \quad (k = \overline{0, n})$ čvorovi interpolacije. Tada je kvadraturna formula

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

sledećeg oblika

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^n f(a+kh),$$

gde je

$$C_k^n = \frac{A_k}{b-a} = \frac{1}{b-a}\int_a^b \frac{\Pi_{n+1}(x)}{(x-a-kh)\Pi'_{n+1}(a+kh)}dx,$$

a

$$\Pi_{n+1}(x) = (x-a)(x-a-h)(x-a-2h)\cdots(x-a-nh).$$

Ako uvedemo smenu $x = a + th \ (0 \le t \le n)$, onda se dobija:

$$\Pi_{n+1}(x) = \Pi_{n+1}(a+th) = h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n),$$
$$x-a-kh = th-kh = h(t-k),$$

$$\Pi'_{n+1}(a+th) = (x_k - x_0)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n) =$$
$$= (-1)^{n-k}\cdot h^n \cdot k!(n-k)!,$$

pa je

$$C_k^n = \frac{1}{b-a}\int_0^n \frac{h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)}{h(t-k)(-1)^{n-k}\cdot h^n k!(n-k)!}h\,dt$$

ili

$$C_k^n = \frac{h}{b-a}\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\ldots(t-n)}{t-k}dt, \quad k = \overline{0, n}.$$

Na taj način dobijamo kvadraturne formule

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^n f(a+kh)}$$

sa čvorovima: $a = x_0$, $x_1 = x_0 + h, \ldots, x_k = x_0 + kh, \ldots, x_n = b$ i koeficijentima

$$\boxed{C_k^n = \frac{1}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt\,, \quad k = \overline{0,n}\,,}$$

Dokazuje se da je: 1) $\sum_{k=0}^{n} C_k^n = 1$ i 2) $C_k^n = C_{n-k}^n$.

Budući da koeficijenti C_k^n ne zavise od funkcije $f(x)$ a zavise samo od k i n, možemo ih izračunati i napraviti tablicu koeficijenata:

n \ k	0	1	2	3	...	
1	1					2
2	1	4				6
3	1	3				8
4	7	32	12			90
5	19	75	50			288
6	41	216	27	272		840
7	751	3577	1323	2989		17280
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	...	⋮

U poslednjoj koloni tablice su imenioci koeficijenata, a zbog simetričnosti koeficijenata uneti su samo koeficijenti sa indeksom $k \le \frac{n}{2}$.

2. FORMULA PRAVOUGAONIKA I TRAPEZNA KVADRATURNA FORMULA

Formula pravougaonika dobija se kada se u opštem obliku Njutn-Kotesovih kvadraturnih formula stavi n=0, $t_0=(a+b)/2$.
Dobija se

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

Greška gornje formule ocenjuje se izrazom

$$\boxed{R_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{24}f''(\xi),\quad \xi\in(a,b).}$$

Ukoliko u formulama

$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^n f(a+kh)$$

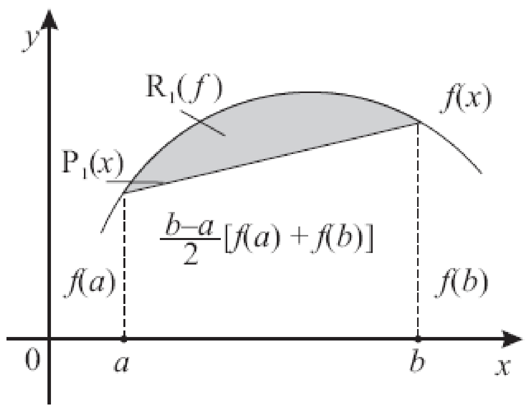
$$C_k^n=\frac{1}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt\,,\quad k=\overline{0,n}\,,$$

stavimo n=1, dobijmo

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

$$C_0^1=\frac{1}{1}\cdot\frac{(-1)^{1-0}}{0!(1-0)!}\int_0^1\frac{t(t-1)}{t-0}dt=\frac{1}{2},\quad C_1^1=\frac{1}{1}\cdot\frac{(-1)^{1-1}}{1!(1-1)!}\int_0^1\frac{t(t-1)}{t-1}dt=\frac{1}{2}.$$

Formula (1) se zove *trapezna kvadraturna* formula; geometrijski smisao je sledeći – površina koja je određena integralom I se aproksimira površinom trapeza (sl. 2), odnosno, $f(x)$ odsečkom prave linije $P_1(x)$ koja sadrži tačke $(a, f(a))$ i $(b, f(b))$.



Greška metode – formule (1) je

$$R_1(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{1}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)f''(\xi)dx\,,\quad \xi\in(a,b)$$

ili, posle integracije,

(2) $$\boxed{R_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)\,,\quad \xi\in(a,b)\,.}$$

Iz (2) je očigledno da greška bitno zavisi od dužine $b-a$ odsečka $[a, b]$. Zbog toga, a da bismo dobili tačniji rezultat, podelimo odsečak $[a, b]$ na n jednakih delova dužine $h=\dfrac{b-a}{n}$. Dalje, ako se uoči odsečak $[a + kh,\ a + + (k + 1)\,n]$ i na njemu primeni formula (možemo je nazvati *osnovnom*) (1), onda se dobija

$$\int_{a+kh}^{a+(k+1)h} f(x)dx\approx\frac{h}{2}[f_k+f_{k+1}]+R_k(f)\,,$$

gde je $f_j=f(a+jh)\quad(j=k,\,k+1)$, a greška je

$$R_k(f)=-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)\,,\quad \xi_k\in(a+kh,a+(k+1)h)\,.$$

Kako je

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^{a+h} f(x)dx+\int_{a+h}^{a+2h} f(x)dx+\cdots+\int_{a+(n-1)h}^{b} f(x)dx\,,$$

to je

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{h}{2}[f_0+2f_1+\cdots+2f_{n-1}+f_n]+R(f)\,,$$

gde je

$$R(f)=R_0+R_1+\cdots+R_{n-1}=-\frac{h^3}{12}[f''(\xi_0)+f''(\xi_1)+\cdots+f''(\xi_{n-1})]=$$

$$=-\frac{b-a}{12}\cdot h^2\,\frac{f''(\xi_0)+f''(\xi_1)+\cdots+f''(\xi_{n-1})}{n}.$$

Ako je $f''(x)$ neprekidna funkcija na $[a, b]$, onda postoji tačka $\xi\in(a,b)$ takva da je

$$\frac{f''(\xi_0)+f''(\xi_1)+\cdots+f''(\xi_{n-1})}{n}=f''(\xi)\,,$$

pa je definitivno greška uopštene trapezne kvadraturne formule

(3)
$$\boxed{\begin{aligned}&\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f_0+2(f_1+\cdots+f_{n-1})+f_n]\\ &R(f)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi),\quad \xi_k\in(a,b).\end{aligned}}$$

jednaka

(4)

Primer 1. Koristeći trapeznu kvadraturnu formulu izračunati

$$I=\int_0^{0.4}\frac{dx}{1+x^4}.$$

Rešenje. Izaberimo korak $h=0.1$ i izračunajmo vrednosti integranda. Rezultati računanja su dati u sledećoj tabeli.

x	x^4	$1+x^4$	$f(x)$ Prema formuli (3) je
0.0	0.00000	1.00000	1.00000
0.1	0.00010	1.00010	0.99990
0.2	0.00160	1.00160	0.99840
0.3	0.00810	1.00810	0.99196
0.4	0.02560	1.02560	0.97504

$$I_T=\frac{0.1}{2}[1.00000+2(0.99990+ +0.99840+0.99196)+0.97504]= =0.39778$$

Procenimo grešku prema formuli (4). Redom računamo:

$$f'(x)=\frac{-4x^3}{(1+x^4)^2},\quad f''(x)=\frac{4x^2(5x^4-3)}{(1+x^4)^3},\quad \max_{x\in[0,0.4]}|f''(x)|\le 0.7,$$

pa je

$$|R(f)|\le\frac{0.4}{12}\cdot 0.1^2\cdot 0.7=0.00023\ldots<0.0003$$

i $I=0.3978\pm 0.0003$. ▲

3. SIMPSONOVA KVADRATURNA FORMULA

Kada se u formulama

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^n f(a+kh)$$

$$C_k^n = \frac{1}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt\,, \quad k=\overline{0,n}\,,$$

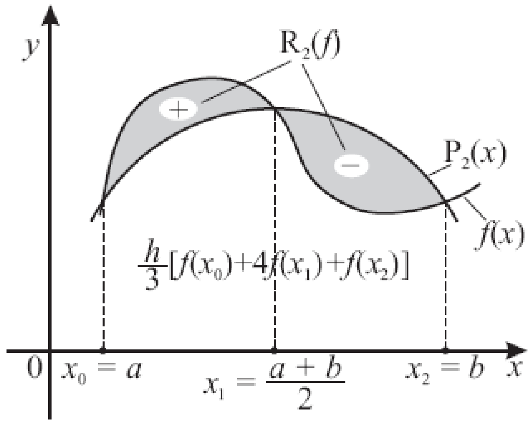
stavi n=2, dobija se

$$(1)\qquad \begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \\ C_0^2 &= \frac{1}{2}\cdot\frac{(-1)^{2-0}}{0!(2-0)!}\int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t-0}dt = \frac{1}{6}, \\ C_1^2 &= \frac{1}{2}\cdot\frac{(-1)^{2-1}}{1!(2-1)!}\int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t-1}dt = \frac{4}{6}, \\ C_2^2 &= \frac{1}{2}\cdot\frac{(-1)^{2-2}}{2!(2-2)!}\int_0^2 \frac{t(t-1)(t-2)}{t-2}dt = \frac{1}{6}; \end{aligned} \quad ,$$

budući da je $b-a=2h$, $a=x_0$, $\frac{a+b}{2}=a+\frac{b-a}{2}=x_0+h=x_1$ i $b=x_0+2h=x_2$, to se formula (1) može zapisati u sledećem obliku

$$(2)\qquad \boxed{I=\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0)+4\cdot f(x_1)+f(x_2)]\,.}$$

Formula (1), odnosno (2), se zove *osnovna Simpsonova* (T. Simpson, 1710–1761) *kvadraturna formula*; geometrijski smisao je sledeći – površina koja je određena integralom I se aproksimira površinom koja je određena odsečkom ose Ox, odsečcima pravih $x=a$ i $x=b$ i odsečkom parabole $y=P_2(x)$ koja sadrži tačke (x_0, y_0), (x_1, y_1) i (x_2, y_2), dakle, za $x\in[x_0, x_2]$ funkcija $f(x)$ se aproksimira odsečkom parabole (zbog toga se formula (1) ponekad zove *pravilo parabole*) (sl. 3).



Greška metode – formule (1) je

$$R_2(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]= \tag{3}$$
$$=\frac{1}{3!}\int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)f'''(\xi)dx,\quad \xi\in(a,b).$$

Simpsonova kvadraturna formula je tačna za sve polinome trećeg stepena

$$P_3(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3,$$

Formula za grešku Simpsonove kvadraturne formule može se dobiti i na sledeći način. Pretpostavimo da je $f(x)\in C^4[a,b]$. Posmatrajmo grešku kao funkciju koraka h, tj.

$$R(h)=\int_{x_1-h}^{x_1+h} f(x)dx-\frac{h}{3}\left[f(x_1-h)+4f(x_1)+f(x_1+h)\right].$$

Diferencirajući $R(h)$ tri puta po h dobijamo:

$$R'(h)=\frac{2}{3}\left[f(x_1-h)+f(x_1+h)\right]-\frac{4}{3}f(x_1)-\frac{h}{3}\left[-f'(x_1-h)+f'(x_1+h)\right];$$

$$R''(h)=\frac{1}{3}\left[-f'(x_1-h)+f'(x_1+h)\right]-\frac{h}{3}\left[f''(x_1-h)+f''(x_1+h)\right];$$

$$R'''(h)=-\frac{h}{3}\left[f'''(x_1+h)-f'''(x_1-h)\right]=-\frac{2h^2}{3}f^{IV}(\xi_3),$$

gde smo primenili Lagranževu teoremu na $[x_1-h,x_1+h]$, a $\xi_3\in(x_1-h,x_1+h)$. Osim toga je: $R(0)=0$, $R'(0)=0$, $R''(0)=0$. Integrišući $R'''(h)$ i koristeći teoremu o srednjoj vrednosti nalazimo:

$$R''(h) = R''(0) + \int_0^h R'''(t)dt = -\frac{2}{3}\int_0^h t^2 f^{IV}(\xi_3)dt =$$

$$= -\frac{2}{3} f^{IV}(\xi_2)\cdot\int_0^h t^2 dt = -\frac{2}{9}h^3 f^{IV}(\xi_2),$$

gde $\xi_2 \in (x_1 - h, x_1 + h)$.

Dalje je

$$R'(h) = R'(0) + \int_0^h R''(t)dt = -\frac{2}{9}\int_0^h t^3 f^{IV}(\xi_2)dt =$$

$$= -\frac{2}{9} f^{IV}(\xi_1)\cdot\int_0^h t^3 dt = -\frac{1}{18}h^4 f^{IV}(\xi_1),$$

gde $\xi_1 \in (x_1 - h, x_1 + h)$.

Na kraju je

$$R(h) = R(0) + \int_0^h R'(t)dt = -\frac{1}{18}\int_0^h t^4 f^{IV}(\xi_1)dt =$$

$$= -\frac{1}{18} f^{IV}(\xi)\cdot\int_0^h t^4 dt = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi),$$

gde $\xi \in (x_1 - h, x_1 + h)$. Dakle, greška osnovne Simpsonove kvadraturne formule (2) je

(4) $$\boxed{R(h) = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi),\quad \xi \in (x_1 - h, x_1 + h)}$$

ili

$$\boxed{R(h) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)\cdot h^4}{180} f^{IV}(\xi),\quad \xi \in (a, b).}$$

Ako se odsečak $[a, b]$ podeli na paran broj $n = 2m$ jednakih delova dužine

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{b-a}{2m}$$

i ako se uoče dva susedna pododsečka $[a + (k-1)h, a + (k+1)h]$ $(k = \overline{1, n-1})$ tada će Simpsonova kvadraturna formula na tom „dvointervalu“ biti

$$\int_{a+(k-1)h}^{a+(k+1)h} f(x)dx = \frac{h}{3}[f_{k-1} + 4f_k + f_{k+1}] + R_k.$$

Kako je

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^{a+2h} f(x)\,dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)\,dx + \cdots + \int_{a+(n-2)h}^{b} f(x)\,dx\,,$$

to je uopštena Simpsonova kvadraturna formula

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}[f_0 + f_n + 2(f_2 + f_4 + \cdots + f_{n-2}) + 4(f_1 + f_3 + \cdots + f_{n-1}] + R(f)\,,$$

gde je

$$R(f) = \frac{h^5}{90}[f^{IV}(\xi_1) + f^{IV}(\xi_2) + \cdots + f^{IV}(\xi_m)]\,,$$

Ako je $f^{IV}(x)$ neprekidna funkcija, onda postoji tačka ξ takva da je

$$\frac{f^{IV}(\xi_1) + f^{IV}(\xi_2) + \cdots + f^{IV}(\xi_m)}{m} = f^{IV}(\xi)\,, \quad \xi \in (a,b)\,,$$

pa je definitivno greška uopštene Simpsonove kvadraturne formule

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}[f_0 + f_n + 2(f_2 + f_4 + \cdots + f_{n-2}) + 4(f_1 + f_3 + \cdots + f_{n-1}]} \tag{5}$$

jednaka

$$\boxed{R(f) = -\frac{m \cdot h^5}{90} \cdot f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{IV}(\xi)\,, \quad \xi \in (a,b)}. \tag{6}$$

Primer 1. Koristeći Simpsonovu kvadraturnu formulu izračunati

$$I = \int_0^1 e^{-x^2}\,dx\,.$$

Rešenje. Izaberimo korak $h = 0.1$ i izračunajmo vrednosti integranda. Rezultati računanja su dati u sledećoj tabeli.

k	x_k	x_k^2	$f(x)$		
			$k=0$ ili $k=10$	k–neparno	k–parno
0	0.0	0.00	1.00000		
1	0.1	0.01		0.9905	
2	0.2	0.04			0.96079
3	0.3	0.09		0.91393	
4	0.4	0.16			0.85214
5	0.5	0.25		0.77880	
6	0.6	0.36			0.69768
7	0.7	0.49		0.61263	
8	0.8	0.64			0.52729
9	0.9	0.81		0.44486	
10	1.0	1.00	0.36788		
$\sum$			1.36788	3.74027	3.03790

Prema formuli (5) je:

$$I_S = \frac{0.1}{3}[1.36788 + 2 \cdot 3.03790 + 4 \cdot 3.74027] = \frac{0.1}{3} \cdot 22.40476 = 0.74683 .$$

Procenimo grešku prema formuli (6). Kako je $\max|f^{(4)}(x)| = 12$ za $x \in [0, 1]$, to je

$$|R(f)| \le \frac{1}{180} \cdot 0.1^4 \cdot 12 \le 0.000007$$

i $I = 0.74683 \pm 0.000007$.

Može se uočiti da je ocena (6) greške Simpsonove kvadraturne formule (5) povezana s procenom $\max|f^{(4)}(x)|$ za $x \in [a, b]$ a to najčešće nije jednostavno učiniti. Navedimo zbog toga jedan praktičan način ocene greške Simpsonove kvadraturne formule. Pretpostavimo da se $f^{(4)}(x)$ ne menja mnogo na $[a, b]$. Grešku (6) možemo zapisati na sledeći način

$$R = K \cdot h^4 ,$$

gde je K konstanta koja zavisi od funkcije $f(x)$ i intervala integracije (a, b). Neka su I_h i I_{2h} približne vrednosti integrala I izračunate pomoću Simpsonove kvadraturne formule za korake h i $2h$. Tada imamo

$$I = I_h + M \cdot h^4 \quad \text{i} \quad I = I_{2h} + M \cdot (2h)^4 ,$$

a odavde

(7) $$\boxed{|R| = \frac{|I_h - I_{2h}|}{15}}$$

i

$$I = I_h \pm \frac{|I_h - I_{2h}|}{15} .$$

Ocena je poznata kao *Rungeova ocena* ili *Rungeov princip ocene greške.*

Primer 2. Koristeći Simpsonovu kvadraturnu formulu izračunati

$$I = \int_0^1 \sin x^2 dx$$

s tačnošću $\frac{1}{2} \cdot 10^4$.

Rešenje. Korak h se može odrediti iz uslova $(b-a)\dfrac{h^4}{180}\cdot M_4 < \varepsilon$, odnosno

$$h < \sqrt[4]{\frac{180\varepsilon}{(b-a)M_4}}\,,$$

tj. korak h je reda $\sqrt[4]{\varepsilon}$. Međutim, procena $\max|f^{(4)}(x)| = M_4$ nije baš jednostavna. Lakše je koristiti Rungeovu ocenu (7). Izračunajmo približnu vrednost $I_{0.5}$ integrala *I,* tj. uzmimo korak h jednak 0.5. Rezultati računanja su u sledećoj tablici.

x	$f(x)$	
0.0	0.00000	1
0.5	0.24740	4
1.0	0.84147	1

$$I_{0.5} = \frac{0.5}{3}[0.00000 + 4\cdot 0.24740 + 0.84147] =$$
$$= 0.30518$$

Uzmimo korak h jednak 0.5/2 = 0.25. Rezultati računanja su dati u sledećoj tablici.

x	$f(x)$	
0.00	0.00000	1
0.25	0.62460	4
0.50	0.24740	2
0.75	0.53330	4
1.00	0.84147	1

$$I_{0.25} = \frac{0.25}{3}\cdot 3.71931 = 0.30994$$

Kako je

$$\frac{|I_{0.25} - I_{0.5}|}{15}\cdot 0.0003173 > 0.00005\,,$$

to nije postignuta zadata tačnost.

Uzmimo korak h jednak 0.25/2 = 0.125. Rezultati računanja su dati u sledećoj tabeli.

x	$f(x)$	
0.000	0.00000	1
0.125	0.01562	4
0.250	0.62460	2
0.375	0.14016	4
0.500	0.24740	2
0.625	0.38077	4
0.750	0.53330	2
0.875	0.69299	4
1.000	0.84147	1

$$I_{0.25} = \frac{0.125}{3}\cdot 7.44595 = 0.31025$$

Kako je

$$\frac{|I_{0.125} - I_{0.5}|}{15} = 0.0000206 < 0.00005\,,$$

to je

$$I \approx I_{0.125} = 0.3102\,. \;\blacktriangle$$

4. GAUSOVA KVADRATURNA FORMULA

Neka treba izračunati integral

$$I = \int_a^b f(t)\,dt \,. \tag{1}$$

Smenom

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

integral (1) se transformiše u integral

$$I = \int_{-1}^{1} F(x)\,dx \,, \tag{2}$$

gde je $F(x) = f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right)\frac{b-a}{2}$, i opštost izlaganja neće biti smanjena.

Potražimo kvadraturnu formulu u sledećem obliku

$$I = \int_{-1}^{1} F(x)\,dx = A_1F(x_1) + A_2F(x_2) + \cdots + A_nF(x_n)\,, \tag{3}$$

gde su koeficijenti $A_1, A_2, ..., A_n$ i apscise $x_1, x_2, ..., x_n$ neodređeni parametri. Ako koeficijente A_i i apscise x_i $(i = \overline{1,n})$ odredimo tako da kvadraturna formula (3) bude tačna za polinome što je moguće višeg stepena, onda se dobija Gausova kvadraturna formula. Kako u jednakosti (3) imamo $2n$ nepoznatih parametara (n koeficijenata A_i i n apscisa x_i), to ćemo uzeti da formula (3) bude tačna za sve polinome $F(x) = x^k$, $k = \overline{0, \overline{2n-1}}$. Dakle, imaćemo

$$\begin{aligned}
2 &= A_1 + A_2 + \cdots + A_n, \\
0 &= A_1x_1 + A_2x_2 + \cdots + A_nx_n, \\
\frac{2}{3} &= A_1x_1^2 + A_2x_2^2 + \cdots + A_nx_n^2, \\
&\vdots \\
\frac{2}{2n-1} &= A_1x_1^{2n-2} + A_2x_2^{2n-2} + \cdots + A_nx_n^{2n-2}, \\
0 &= A_1x_1^{2n-1} + A_2x_2^{2n-1} + \cdots + A_nx_n^{2n-1}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Jasno je da se ovaj sistem od $2n$ jednačina sa $2n$ nepoznatih teško rešava; sistem je nelinearan po x_i a linearan po A_i. Razmotrimo, za početak, način rešavanja sistema (4) za n = 1, 2, 3.

Za $n = 1$ sistem (4) postaje

$$2 = A_1, \quad 0 = A_1 x_1,$$

odakle je $A_1 = 2$ i $x_1 = 0$. Prema tome, Gausova kvadraturna formula u ovom slučaju glasi

$$\int_{-1}^{1} F(x)\,dx = 2F(0);$$

formula je tačna za sve polinome nultog i prvog stepena.

Za $n = 2$ sistem (4) postaje

$$A_1 + A_2 = 2,$$

$$A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0,$$

$$A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \frac{2}{3},$$

$$A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0,$$

odakle se dobija $A_1 = A_2 = 1$, $x_2 = -x_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}$. Prema tome, Gausova kvadraurna formula u ovom slučaju glasi

$$\int_{-1}^{1} F(x)dx = F\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + F\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right);$$

formula je tačna za sve polinome nultog, prvog, drugog i trećeg stepena.

Za $n = 3$ sistem (4) postaje

$$A_1 + A_2 + A_3 = 2,$$

$$A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 = 0,$$

$$A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_3^2 = \frac{2}{3},$$

$$A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 + A_3 x_3^3 = 0,$$

$$A_1 x_1^4 + A_2 x_2^4 + A_3 x_3^4 = \frac{2}{5},$$

$$A_1 x_1^5 + A_2 x_2^5 + A_3 x_3^5 = 0.$$

Dokazano je (videti, na primer, Kaiser S. Kunz – Numerical analysis, London, 1957.) da su čvorovi x_i simetrično raspoređeni u odnosu na koordinatni početak, tj. dokazano je da je $x_i = x_{n-i+1}$, a u slučaju neparnog broja $n = 2s - 1$ $x_s = 0$. Iskoristivši ovo svojstvo sistem se svodi na

$$
\begin{aligned}
A_1 + A_2 + A_3 &= 2, \\
A_1 x_1 - A_3 x_1 &= 0, \\
A_1 x_1^2 + A_3 x_1^2 &= \frac{2}{3}, \\
A_1 x_1^3 - A_3 x_1^3 &= 0, \\
A_1 x_1^4 + A_3 x_1^4 &= \frac{2}{5}, \\
A_1 x_1^5 - A_3 x_1^5 &= 0.
\end{aligned}
$$

Kako je $x_1 \neq 0$, to se iz druge jednačine dobija $A_1 = A_3$, a iz treće i pete se dobija $x_3 = -x_1 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Zatim, imamo da je $A_1 = A_3 = \frac{5}{9}$ i $A_2 = \frac{8}{9}$. Prema tome, Gausova kvadraturna formula u ovom slučaju glasi

$$\int_{-1}^{1} F(x)\,dx = \frac{5}{9}F\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}F(0) + \frac{5}{9}F\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right),$$

formula je tačna za sve polinome x^k, $k \leq 5$.

Da bismo rešili sistem jednačina (4) u opštem slučaju, navešćemo bez dokaza neke stavove o Ležandrovim (A. M. Legendre, 1752–1833) polinomima.

Ležandrov polinom n–tog stepena je

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right], \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{5}$$

Tako imamo:

$$
\begin{aligned}
L_0(x) &= 1, \\
L_1(x) &= x, \\
L_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\
L_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \\
L_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \\
L_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x), \\
L_6(x) &= \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5), \ldots
\end{aligned}
$$

Za Ležandrove polinome važi:

1) Ležandrovi polinomi obrazuju na segmentu [–1, 1] ortogonalan sistem, tj.

$$\int_{-1}^{1} L_n(x)\cdot L_m(x)\,dx=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n; \quad m,n=0,1,2,\ldots\end{cases}$$

2) Ležandrov polinom $L_n(x)$ za $n \geq 1$ ima n različitih realnih korena $x_i \in (-1,1)$, $i=\overline{1,n}$;

3) Za Ležandrove polinome važi rekurentna formula

(6) $$(n+1)L_{n+1}(x)-(2n+1)xL_n(x)+nL_{n-1}(x)=0\,,\quad n=1,2,\ldots;$$

4) Normirani Ležandrovi polinomi $\hat{L}_n(x)=\sqrt{\dfrac{2n+1}{2}}L_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ obrazuju na segmentu [–1, 1] ortonormiran sistem polinoma, tj.

$$\int_{-1}^{1} \hat{L}_n(x)\cdot \hat{L}_m(x)\,dx=\begin{cases}0, & m\neq n\\ 1, & m=n\end{cases}.$$

5) Ako je $Q_k(x)$ proizvoljan polinom stepena $k<n$, onda je

$$\int_{-1}^{1} L_n(x)\cdot Q_k(x)\,dx=0\,;$$

6) Nepoznate $x_1,x_2,\ldots,x_n$ sistema (4), odnosno čvorovi kvadraturne formule (3), su nule Ležandrovog polinoma $L_n(x)$. Prema tome, imajući u vidu osobine 2) i 6), pri rešavanju sistema (4) najpre se iz jednačine $L_n(x)=0$ odrede koreni $x_1,x_2,\ldots,x_n$, a zatim se rešava sistem jednačina (4) koji je linearan po koeficijentima A_i $(i=\overline{1,n})$. Ako uzmemo prvih n jednačina sistema (4), dobićemo sistem od n linearnih algebarskih jednačina sa n nepoznatih A_i $(i=\overline{1,n})$. Determinanta tog sistema je Vandermondova determinanta

$$D=\prod_{n\geq i>j\geq 1}(x_i-x_j)\neq 0\,.$$

Dakle, koeficijenti kvadraturne formule (3) jednoznačno su određeni i jednaki su

$$\boxed{A_i=\frac{2}{n^2}\,\frac{1-x_i^2}{L_{n-1}^2(x_i)}\,,\quad (i=\overline{1,n})\,.}$$

Greška Gausove kvadraturne formule je (videti, na primer, Kaiser S. Kunz – Numerical analysis, London, 1957.)

(7) $$\boxed{R_n(F)=\frac{2^{2n+1}}{(2n+1)(2n)!}\left[\frac{(n!)^2}{(2n)!}\right]^2 F^{(2n)}(\xi)\quad (-1<\xi<1)\,.}$$

Očigledno je da se Gausovom kvadraturnom formulom postiže velika tačnost i za relativno mali broj čvorova integracije. Na primer, za $n = 5$ je

$$R_5(F) \approx 8.08 \cdot 10^{-10} F^{(10)}(\xi),$$

a za $n = 7$ je

$$R_7(F) \approx 2.13 \cdot 10^{-15} F^{(14)}(\xi).$$

Međutim, primena formule za grešku (7) je komplikovana jer je računanje vezano za izračunavanje izvoda visokih redova (naravno, ako izvodi podintegralne funkcije uopšte postoje).

Navedimo tablicu čvorova i koeficijenata Gausove kvadraturne formule za razne vrednosti n.

n	i	x_i	A_i
1	1	0	2
2	1,2	∓ 0.577 350 269 1	1
3	1,3	∓ 0.774 596 669 2	5/9
	2	0	8/9
4	1,4	∓ 0.861 136 311 6	0.347 854 845 1
	2,3	∓ 0.339 981 043 6	0.652 145 154 9
5	1,5	∓ 0.906 179 845 9	0.236 926 885 1
	2,4	∓ 0.538 469 310 1	0.478 628 670 5
	3	0	0.568 888 888 9
6	1,6	∓ 0.932 469 514 2	0.171 324 492 4
	2,5	∓ 0.661 209 386 5	0.360 761 573 0
	3,4	∓ 0.238 619 186 1	0.467 913 934 6
7	1,7	∓ 0.949 107 912 3	0.129 484 966 2
	2,6	∓ 0.741 531 185 6	0.279 705 391 5
	3,5	∓ 0.405 845 151 4	0.381 830 050 5
	4	0	0.417 959 183 7
8	1,8	∓ 0.960 289 856 5	0.101 228 536 3
	2,7	∓ 0.796 666 477 4	0.222 381 034 5
	3,6	∓ 0.525 532 409 9	0.313 706 645 9
	4,5	∓ 0.183 434 642 5	0.362 683 783 4

Primer 1. Koristeći Gausovu kvadraturnu formulu za $n = 4$ izračunati

$$I = \int_0^{\pi/4} \frac{dt}{\sqrt{1 - \frac{1}{4}\sin^2 t}}.$$

Rešenje. Uvedimo novu promenljivu $t = \frac{\pi}{8}x + \frac{\pi}{8}$; tada imamo

$$I=\frac{\pi}{8}\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-\frac{1}{4}\sin^2\left(\frac{\pi}{8}x+\frac{\pi}{8}\right)}}.$$

Izračunajmo vrednosti integranda u čvorovima x_1, x_2, x_3, x_4; rezultati računanja su dati u sledećoj tabeli.

i	x_i	$t_i=\frac{\pi}{8}(x_i+1)$	$\sin t_i$	$\sin^2 t_i$	$1-\frac{1}{4}\sin^2 t_i$	$F(x_i)$
1	–0.861136	0.054532	0.054505	0.002971	0.999257	1.000372
2	–0.339981	0.259189	0.256297	0.065688	0.983578	1.008314
3	0.339981	0.526209	0.502259	0.252264	0.93634	1.033107
4	0.861136	0.730866	0.667514	0.445575	0.888606	1.060829

$$I=\frac{\pi}{8}\left[0.347855(1.000372+1.060829)+0.652145(1.008314+1.033107)\right]=$$

$$=\frac{\pi}{8}\cdot 2.048301=0.804366. \blacktriangle$$