

VIII. RÓŻNICZKOWANIE NUMERYCZNE

Z definicji pochodnej wiemy, że

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = T(h), \quad h > 0. \quad (8.1)$$

Funkcję $f(x+h)$ możemy rozwinąć przez zastosowanie wzoru Taylora:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} f^{(m+1)}(x) + \frac{h^{m+2}}{(m+2)!} f^{(m+2)}(\vartheta),$$

gdzie $\vartheta \in (x, x+h)$. Podstawiając to rozwinięcie do wzoru (8.1) mamy

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h + \tau_2 h^2 + \dots + \tau_m h^m + h^{m+1} \alpha_{m+1}(h), \quad (8.2)$$

gdzie

$$\tau_0 = f'(x), \quad \tau_k = \frac{f^{(k+1)}(x)}{(k+1)!}, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Podobnie,

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = T(h)$$

i jeśli zastosujemy rozwinięcie Taylora do funkcji $f(x+h)$ i $f(x-h)$, to otrzymamy

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \dots + \tau_m h^{2m} + h^{2m+2} \alpha_{m+1}(h), \quad (8.3)$$

gdzie

$$\tau_0 = f'(x), \quad \tau_k = \frac{f^{(2k+1)}(x)}{(2k+1)!}, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Jeśli we wzorach (8.2) i (8.3) zaniedbamy resztę, to funkcję $T(h)$ możemy traktować jako wielomian zmiennej h (we wzorze (8.2)) lub zmiennej h^2 (we wzorze (8.3)). W obu przypadkach mamy

$$\tau_0 = f'(x)$$

i w celu wyznaczenia tej wielkości stosuje się *metodę Romberga*.

Niech h_0 oznacza pewien dany krok i niech

$$h_1 = \frac{h_0}{p_1}, \quad h_2 = \frac{h_0}{p_2}, \quad \dots, \quad h_m = \frac{h_0}{p_m},$$

gdzie p_k ($k = 1, 2, \dots, m$) oznaczają różne liczby całkowite tworzące ciąg rosnący. Traktując długości kroków jako węzły interpolacji, a wartości

$$T_{i0} \stackrel{df}{=} T(h_i), \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

jako wartości w węzłach, możemy zbudować wielomian interpolacyjny zmiennej h (dla wzoru (8.2)) lub zmiennej h^2 (dla wzoru (8.3)). W drugim przypadku wielomian ma postać

$$\bar{T}_{mm}(h) \stackrel{df}{=} \tau_0 + \tau_1 h^2 + \dots + \tau_m h^{2m}$$

i spełnia warunek

$$\bar{T}_{mm}(h_i) = T(h_i), \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

Wartość $\bar{T}_{mm}(0)$ jest dobrym przybliżeniem pochodnej. Może być ona obliczona za pomocą algorytmu Neville'a:

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left(\frac{h_{i-k}}{h_i}\right)^2 - 1}, \quad 1 \leq k \leq i \leq m. \quad (8.4)$$

Zwykle przyjmujemy $h_i = \frac{h_0}{2^i}$ i wówczas wzór (8.4) ma postać

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{4^k - 1}.$$

IX. CAŁKOWANIE NUMERYCZNE

9.1. Wprowadzenie

Często obliczenie całki, czyli wyznaczenie funkcji pierwotnej, jest metodami analitycznymi bardzo trudne lub niemożliwe. Ponadto, jeśli funkcja podcałkowa jest określona za pomocą tablicy, to pojęcie funkcji pierwotnej traci sens i wówczas możemy obliczyć jedynie przybliżoną wartość całki. Gdy przedział całkowania jest skończony, to wiele sposobów przybliżonego obliczania całek polega na tym, że funkcję podcałkową $F(x)$ zastępujemy funkcją interpolacyjną $\varphi(x)$, którą można łatwo całkować. Jeśli, na przykład, $\varphi(x)$ oznacza wielomian interpolacyjny Lagrange'a dla funkcji $F(x)$ z węzłami interpolacji x_0, x_1, \dots, x_N , tzn.

$$\varphi(x) = L_N(x) = \sum_{i=0}^N F(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j},$$

to oznaczając

$$\Phi_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

i podstawiając w miejsce funkcji podcałkowej $F(x)$ wielomian $\varphi(x)$ otrzymamy

$$\int_a^b F(x) dx \approx \int_a^b \varphi(x) dx = \sum_{i=0}^N A_i F(x_i), \text{ gdzie } A_i = \int_a^b \Phi_i(x) dx.$$

Jeśli

$$|F(x) - \varphi(x)| < \varepsilon \text{ i } x \in [a, b],$$

to

$$\left| \int_a^b F(x) dx - \sum_{i=0}^N A_i F(x_i) \right| = \left| \int_a^b (F(x) - \varphi(x)) dx \right| \leq \int_a^b |F(x) - \varphi(x)| dx \leq \varepsilon(b - a).$$

Zatem możemy obliczyć całkę z dowolną dokładnością, jeśli tylko funkcję $F(x)$ można przybliżyć wielomianem z dowolną dokładnością. Oprócz wielomianów można stosować inne funkcje interpolacyjne, na przykład funkcje wymierne i trygonometryczne.

Podobny wzór przybliżonego całkowania otrzymamy, gdy przedział całkowania podzielimy na podprzedziały i w każdym podprzedziale zastosujemy ww. sposób całkowania.

Gdy funkcja $F(x)$ ma osobliwości utrudniające dobre przybliżenie (na przykład, gdy jest nieograniczona lub w przedziale całkowania nie istnieją jej pochodne niskiego rzędu), to opisany

sposób całkowania można zmodyfikować. W takich przypadkach funkcję $F(x)$ przedstawiamy w postaci iloczynu $F(x) = p(x)f(x)$, gdzie $f(x)$ oznacza funkcję, którą można dobrze przybliżyć, a funkcja $p(x)$ ma wszelkie osobliwości funkcji podcałkowej utrudniające to przybliżenie. Wówczas funkcja $\varphi(x)$ oznacza wielomian interpolacyjny dla funkcji $f(x)$, tj.

$$\int_a^b F(x)dx = \int_a^b p(x)f(x)dx \approx \int_a^b p(x)\varphi(x)dx = \sum_{i=0}^N A_i' f(x_i), \text{ gdzie } A_i' = \int_a^b p(x)\Phi_i(x)dx.$$

Sposób ten stosuje się też do obliczania całek o nieskończonym przedziale całkowania. Funkcja $p(x)$ określa wówczas „szybkość malenia” funkcji $F(x)$, gdy $x \rightarrow \pm\infty$.

9.2. Ogólny wzór całkowania numerycznego

Do przybliżonego obliczania całek

$$I(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx \quad (9.1)$$

będziemy stosować wzory postaci

$$S(f) = \sum_{i=0}^N A_i f(x_i), \quad x_i \in [a, b], \quad (9.2)$$

gdzie współczynniki A_i nie zależą od funkcji $f(x)$. Wzór (9.2) nazywamy *kwadraturą*, a punkty x_i – *węzłami kwadratury*. Funkcję $p(x)$ nazywamy *funkcją wagową* lub krótko *wagą*. Przy wyprowadzaniu wzorów postaci (9.2) funkcję wagową będziemy uważać za ustaloną.

Błąd kwadratury oznaczamy przez $E(f)$, tj.

$$E(f) = I(f) - S(f).$$

Za kryterium dokładności kwadratury przyjmuje się zgodność funkcji $S(W)$ i $I(W)$, gdzie W oznacza wielomian.

Definicja 9.1. Mówimy, że kwadratura (9.2) jest rzędu r , gdy:

- $I(W) = S(W)$ dla wszystkich wielomianów $W(x)$ stopnia mniejszego od r ,
- istnieje wielomian $W(x)$ stopnia r , że $I(W) \neq S(W)$ ($r \geq 1$).

Twierdzenie 9.1. Kwadratura (9.2) jest zbieżna dla każdej funkcji $f \in C[a, b]$ wtedy i tylko wtedy, gdy

- jest zbieżna dla każdego wielomianu, tj. $E(W) \rightarrow 0$, gdy $N \rightarrow \infty$,
- istnieje stała M niezależna od N , taka że

$$\sum_{i=0}^N |A_i(N)| \leq M; \quad N = 1, 2, \dots$$

Dowód tego twierdzenia pomijamy. ■

9.3. Kwadratury Newtona-Cotesa

Niech

$$S(f) = \sum_{i=0}^N A_i f(x_i), \text{ gdzie } A_i = \int_a^b p(x) \Phi_i(x) dx \text{ i } \Phi_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (9.3)$$

Błąd przybliżenia funkcji $f(x)$ wielomianem interpolacyjnym Lagrange'a $L_N(x)$ jest postaci

$$R_{N+1}(x) = f(x) - L_N(x) = \frac{1}{(N+1)!} p_{N+1}(x) f^{(N+1)}(\xi),$$

gdzie ξ oznacza pewien punkt pośredni przedziału (a, b) oraz

$$p_{N+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N).$$

Kwadratury (9.3) z węzłami równoodległymi nazywamy *kwadraturami Newtona-Cotesa*. Największe znaczenie praktyczne mają tzw. *wzory zamknięte*, w których końce przedziału całkowania są węzłami i waga $p(x) = 1$. Mają one postać

$$S(f) = \sum_{i=0}^N A_i f_i,$$

gdzie

$$A_i = \int_a^b \Phi_i(x) dx = \frac{(-1)^{N-i} h}{i!(N-i)!} \int_0^N \frac{t(t-1) \dots (t-N)}{(t-i)} dt, \quad (9.4)$$

przy czym $h = (b - a)/N$ oraz $f_i = f(a + ih)$.

Poniżej podajemy dwie podstawowe własności kwadratur (9.4).

1. Jeżeli liczba N jest nieparzysta, to kwadratura (9.4) nie jest dokładna dla wszystkich wielomianów stopnia $N + 1$ i liczba $N + 1$ jest jej rzędem dokładności. Gdy liczba N jest parzysta, to kwadratura (9.4) jest dokładna dla wielomianów stopnia $N + 1$ i jej rząd wynosi $N + 2$. Ogólnie rząd kwadratury Newtona-Cotesa jest zatem dany wzorem $2[N/2] + 2$, gdzie $[]$ oznacza część całkowitą.
2. Jeżeli funkcja $f \in C^r[a, b]$, gdzie $r = 2[N/2] + 2$, to błąd kwadratury można przedstawić w postaci

$$E(f) = M_r f^{(r)}(\xi),$$

gdzie $\xi \in (a, b)$, a współczynnik M_r nie zależy od funkcji f .

Dla $N = 1$ mamy

$$A_0 = -h \int_0^1 (t-1) dt = \frac{1}{2} h, \quad A_1 = h \int_0^1 t dt = \frac{1}{2} h.$$

Stąd

$$S(f) = \frac{1}{2}h(f_0 + f_1).$$

Jest to *wzór trapezów*. Stosując twierdzenie o wartości średniej dla całek możemy wyznaczyć jego błąd:

$$E(f) = \int_a^b (x-a)(x-b)f^{(2)}(\xi)dx = f^{(2)}(\xi_1) \int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{1}{12}h^3 f^{(2)}(\xi_1),$$

przy czym $f \in C^2[a, b]$, $\xi_1 \in [a, b]$ i $h = b - a$.

Dla $N = 2$ otrzymujemy

$$A_0 = \frac{1}{3}h, \quad A_1 = \frac{4}{3}h, \quad A_2 = \frac{1}{3}h,$$

skąd

$$S(f) = \frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2).$$

Jest to *wzór parabol*, zwany też *wzorem Simpsona*, którego błąd wynosi

$$E(f) = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi_2), \quad \xi_2 \in (a, b), \quad h = \frac{b-a}{2}.$$

W podobny sposób możemy wyprowadzić kolejne wzory Newtona-Cotesa (dla kolejnych wartości N) i określić ich błędy. Jeśli kwadraturę zapiszemy w postaci

$$S(f) = \frac{b-a}{Ns} \sum_{i=0}^N \alpha_i f_i,$$

to wartości współczynników Ns oraz α_i będą takie, jak w poniższej tabelicy.

N	α_i						Ns	$ błąd $	Nazwa wzoru	
1	1	1					2	$h^3 f^{(2)}(\xi)/12$	wzór trapezów	
2	1	4	1				6	$h^5 f^{(4)}(\xi)/90$	wzór Simpsona	
3	1	3	3	1			8	$3h^5 f^{(4)}(\xi)/80$	wzór „trzech ósmych”	
4	7	32	12	32	7		90	$8h^7 f^{(6)}(\xi)/945$	wzór Milne'a	
5	19	75	50	50	75	19	288	$275h^7 f^{(6)}(\xi)/12096$	–	
6	41	216	27	272	27	216	41	840	$9h^9 f^{(8)}(\xi)/1400$	wzór Weddle'a

Dla większych wartości N niektóre wartości α_i stają się ujemne i wzory są numerycznie nieużyteczne (przy obliczaniu sum w podanym wyżej wzorze występuje redukcja cyfr).

9.4. Kwadratury złożone Newtona-Cotesa

Definicja 9.2. Kwadraturą złożoną nazywamy kwadraturę, która jest sumą kwadratur na podprzedziałach.

Aby otrzymać kwadraturę złożoną należy:

- przedział całkowania $[a, b]$ podzielić na pewną liczbę podprzedziałów,
- w każdym podprzedziale zastosować kwadraturę niskiego rzędu i wyniki zsumować.

Podzielmy przedział $[a, b]$ na m części o długości $h = (b - a)/m$. Stosując w każdym podprzedziale wzór trapezów mamy

$$S(f) = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{1}{2} h (f_i + f_{i+1}) = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{m-1} + \frac{1}{2} f_m \right),$$

gdzie $f_i = f(a + ih)$. Jest to tzw. wzór złożony trapezów. Jeżeli $f \in C^2[a, b]$, to błąd tego wzoru jest równy

$$E(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_i) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} \cdot \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_i),$$

gdzie $\xi_i \in (a + ih, a + (i+1)h)$. Ponieważ średnia arytmetyczna znajduje się pomiędzy najmniejszą i największą wartością funkcji $f^{(2)}(x)$ w przedziale $[a, b]$ i funkcja ta jest ciągła, więc istnieje punkt $\xi \in [a, b]$, taki że

$$\frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} f^{(2)}(\xi_i) = f^{(2)}(\xi).$$

Zatem

$$E(f) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f^{(2)}(\xi).$$

Jeżeli przedział całkowania podzielimy na m części o długości $h = (b - a)/m$, gdzie m oznacza liczbę parzystą i w każdym z podprzedziałów $[a, a + 2h], \dots, [a + (m-2)h, b]$ o długości $2h$ zastosujemy wzór parabol, po czym wyniki zsumujemy, to otrzymamy wzór złożony parabol:

$$\begin{aligned} S(f) &= \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{m/2} (f_{2i-2} + 4f_{2i-1} + f_{2i}) \\ &= \frac{h}{3} [f_0 + f_m + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{m-2}) + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{m-1})]. \end{aligned}$$

Błąd tego wzoru jest równy

$$E(f) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{(4)}(\xi).$$

9.5. Metoda Romberga

Jak wiemy, w celu przybliżonego obliczenia całki

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

można zastosować wzór złożony trapezów

$$S(f) = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{m-1} + \frac{1}{2} f_m \right),$$

gdzie $h = (b - a)/m$. Przepiszmy ten wzór w postaci

$$T(h) = h \left[\frac{1}{2} f(a) + f(a+h) + \dots + f(b-h) + \frac{1}{2} f(b) \right]. \quad (9.5)$$

Dla wzoru (9.5) jest prawdziwe poniższe twierdzenie.

Twierdzenie 9.2. *Jeżeli funkcja $f \in C^{2n+2}[a, b]$, to wzór (9.5) posiada rozwinięcie*

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \dots + \tau_n h^{2n} + \alpha_{n+1}(h) h^{2n+2}, \quad (9.6)$$

gdzie

$$\tau_0 = \int_a^b f(x)dx,$$

τ_i oznaczają stałe niezależne od h oraz istnieje stała $M > 0$, taka że

$$|\alpha_{n+1}(h)| \leq M$$

dla każdego $h = (b - a)/m$.

Dowód pomijamy. ■

Jeżeli we wzorze (9.6) zaniedbamy resztę, to funkcję $T(h)$ możemy traktować jako wielomian zmiennej h^2 , który dla $h = 0$ ma szukaną wartość τ_0 . W celu obliczenia τ_0 można zastosować metodę Romberga.

Niech ciąg

$$h_0 = b - a, \quad h_1 = \frac{h_0}{p_1}, \quad \dots, \quad h_n = \frac{h_0}{p_n},$$

gdzie $\{p_i\}$ oznacza rosnący ciąg liczb naturalnych, będzie ciągiem długości kroków, dla których obliczamy

$$T_{i0} \stackrel{df}{=} T(h_i), \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (9.7)$$

Traktując długości kroków jako węzły interpolacji, a wielkości T_{i0} jako wartości w węzłach, możemy zbudować wielomian interpolacyjny zmiennej h^2 :

$$\bar{T}_{nn}(h) \stackrel{df}{=} a_0 + a_1 h^2 + \dots + a_n h^{2n},$$

taki że

$$\bar{T}_{nn}(h_i) = T(h_i), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Ekstrapolowana wartość $\bar{T}_{nn}(0)$ dobrze przybliża szukaną wartość całki. Wartość ta może być obliczona za pomocą algorytmu Neville'a.

Niech $\bar{T}_{ik}(h)$ oznacza dla i oraz k ($n \geq i \geq k \geq 1$) wielomian stopnia k zmiennej h^2 , dla którego

$$\bar{T}_{ik}(h) = T_{j0}, \quad j = i - k, i - k + 1, \dots, i.$$

Z algorytmu Neville'a dla ekstrapolowanej wartości $T_{ik} \stackrel{df}{=} \bar{T}_{ik}(0)$ otrzymujemy wzór

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left(\frac{h_{i-k}}{h_i}\right)^2 - 1}, \quad 1 \leq k \leq i \leq n. \quad (9.8)$$

Za pomocą tego wzoru możemy utworzyć tablicę postaci

$$\begin{array}{ccccccc} T_{00} & & & & & & \\ & \backslash & & & & & \\ & / & T_{11} & & & & \\ T_{10} & & & \backslash & & & \\ & & & / & T_{22} & & \\ & \backslash & & & & \backslash & \\ & / & T_{21} & & & / & T_{42} \\ T_{20} & & & \backslash & & & \dots \\ & & & / & T_{32} & & \\ & \backslash & & & & & \\ & / & T_{31} & & & & T_{m0} \\ T_{30} & & & & \dots & & \\ \vdots & & \dots & & & & \\ T_{n0} & \dots & & & & & \end{array}$$

w której element T_{m0} jest szukanym przybliżeniem całki.

Dla kroków o długościach $h_0 = b - a$ i $h_1 = h_0/2$ element T_{11} przedstawia wzór Simpsona. Z zależności (9.7) i (9.8) mamy bowiem

$$T_{00} = T(h_0) = (b - a) \left[\frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) \right],$$

$$T_{10} = T(h_1) = \frac{b - a}{2} \left[\frac{1}{2} f(a) + f\left(\frac{a + b}{2}\right) + \frac{1}{2} f(b) \right],$$

$$\begin{aligned}
T_{11} &= T_{10} + \frac{T_{10} - T_{00}}{\left(\frac{h_0}{h_1}\right)^2 - 1} = T(h_1) + \frac{T(h_1) - T(h_0)}{3} = \frac{4}{3}T(h_1) - \frac{1}{3}T(h_0) \\
&= \frac{4}{3} \cdot \frac{b-a}{2} \left[\frac{1}{2}f(a) + f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b) \right] - \frac{1}{3}(b-a) \left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b) \right] \\
&= \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right].
\end{aligned}$$

Jeśli $h_0 = b - a$ i $h_1 = h_0/3$, to element T_{11} przedstawia wzór „trzech ósmych”.

W metodzie Romberga wykorzystuje się zwykle następujące ciągi:

- ciąg Romberga, w którym

$$h_0 = b - a, \quad h_1 = \frac{h_0}{2}, \quad h_2 = \frac{h_1}{2}, \quad h_3 = \frac{h_2}{2}, \quad \dots,$$

- ciąg Bulirscha, w którym

$$h_0 = b - a, \quad h_1 = \frac{h_0}{2}, \quad h_2 = \frac{h_0}{3}, \quad h_3 = \frac{h_0}{4}, \quad h_4 = \frac{h_0}{6}, \quad h_5 = \frac{h_0}{8}, \quad \dots$$

Okazuje się, że w przypadku ciągu Bulirscha mamy mniejszy nakład obliczeń dla obliczenia nowej wartości $T(h_i)$.

9.6. Kwadratury Gaussa

Jak wiadomo (zob. p. 9.3), dla kwadratur Newtona-Cotesa postaci

$$S(f) = \sum_{k=1}^N A_k f(x_k), \quad A_k = \int_a^b p(x) \Phi_k(x) dx, \quad (9.9)$$

rzęd wynosi co najmniej $N + 1$. Rozpatrzmy teraz przy ustalonej wadze $p(x)$ i liczbie N problem wyboru węzłów i współczynników tak, aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Kwadraturę taką nazywamy *kwadraturą Gaussa*.

Ponieważ mamy do wyznaczenia $2(N + 1)$ stałych ($N + 1$ współczynników i $N + 1$ węzłów), należy przypuszczać, że można je dobrać tak, aby kwadratura była dokładna dla wielomianów stopnia mniejszego niż $2(N + 1)$. Dla kwadratur Newtona-Cotesa pokazaliśmy, że współczynniki każdej kwadratury rzędu co najmniej $N + 1$ są określone wzorem

$$A_k = \int_a^b p(x) \Phi_k(x) dx.$$

Wystarczy zatem odpowiednio wybrać węzły x_k . W tym celu konieczna jest znajomość wielomianów ortogonalnych.

Definicja 9.2. Ciąg wielomianów

$$\{P_n(k)\} = \{P_0(x), P_1(x), \dots, P_N(x), \dots\} \quad (9.10)$$

nazywamy *ciągami wielomianów ortogonalnych* w przedziale $[a, b]$ z wagą $p(x)$,
gdy

$$\int_a^b p(x) P_n(x) P_m(x) dx = 0 \quad \text{dla } n \neq m.$$

Dla wielomianów ortogonalnych są prawdziwe poniższe twierdzenia.

Twierdzenie 6.3. *W przedziale (a, b) wielomiany ortogonalne posiadają tylko jednokrotne pierwiastki rzeczywiste.*

Twierdzenie 6.4. *Nie istnieje kwadratura (6.9) rzędu wyższego niż $2(N+1)$. Kwadratura ta jest rzędu $2(N+1)$ wtedy i tylko wtedy, gdy węzły x_k są pierwiastkami wielomianu $P_{N+1}(x)$ z ciągu (6.10).*

Twierdzenie 6.5. *Wszystkie współczynniki w kwadraturach Gaussa są dodatnie.*

Dowody tych twierdzeń można znaleźć m. in. w [3]. ■

Kwadratury Gaussa zależą od wagi $p(x)$ i przedziału $[a, b]$. Poniżej wymieniono różne przypadki.

- $[a, b] = [-1, 1], p(x) = 1$

Wielomianami ortogonalnymi (dla podanego przedziału i wagi) są wielomiany Legendre'a określone wzorem

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

a kwadratury nazywa się w tym przypadku *kwadraturami Gaussa-Legendre'a*. Współczynniki tych kwadratur i błęd dane są wzorami

$$A_k = -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}(x)P'_{N+1}(x)}, \quad E(f) = \frac{2^{2N+3}[(N+1)!]^4}{(2N+3)[(2N+2)!]^3} f^{(2N+3)}(\xi),$$

gdzie x_k oznaczają zera wielomianu $P_{N+1}(x)$, a $\xi \in (-1, 1)$.

Gdy przedział całkowania $[a, b]$ jest inny niż $[-1, 1]$, to należy zmienić zmienną całkowania stosując podstawienie

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

Wówczas

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

i mamy

$$\int_a^b f(t) dt \approx S(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^N A_k f(t_k),$$

gdzie

$$t_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_k,$$

przy czym x_k oznaczają zera wielomianu $P_{N+1}(x)$, a błąd jest dany wzorem

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

- $[a, b] = [-1, 1]$, $p(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$, $\alpha, \beta > -1$

Wielomianami ortogonalnymi są w tym przypadku wielomiany Jacobiego określone wzorem

$$J_n(x, \alpha, \beta) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x)^{\alpha+n} (1+x)^{\beta+n}],$$

a kwadratury nazywa się *kwadraturami Gaussa-Jacobiego*. Ich współczynniki i błąd są dane wzorami

$$A_k = -\frac{(2N+\alpha+\beta+4)\Gamma(N+\alpha+2)\Gamma(N+\beta+2) \cdot 2^{\alpha+\beta}}{(N+\alpha+\beta+2)\Gamma(N+\alpha+\beta+2)J_{N+2}(x_k, \alpha, \beta)J'_{N+1}(x_k, \alpha, \beta)(N+2)!},$$

$$E(f) = \frac{\Gamma(N+\alpha+2)\Gamma(N+\beta+2)\Gamma(N+\alpha+\beta+2)(N+1)! \cdot 2^{2N+\alpha+\beta+3}}{(2N+\alpha+\beta+3)[\Gamma(2N+\alpha+\beta+3)]^2(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\xi),$$

gdzie x_k oznaczają zera wielomianu $J_{N+1}(x, \alpha, \beta)$, $\xi \in (-1, 1)$, a Γ oznacza funkcję gamma Eulera:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt, \quad x > 0.$$

W szczególnym przypadku, gdy $\alpha = \beta = 0$ otrzymujemy kwadratury Gaussa-Legendre'a. Innym przypadkiem szczególnym jest $\alpha = \beta = -1/2$, tj. gdy waga dana jest wzorem

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

Wówczas kwadratury nazywa się *kwadraturami Gaussa-Czebyszewa*, a wielomianami ortogonalnymi są wielomiany Czebyszewa pierwszego rodzaju określone wzorem

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

W kwadraturach Gaussa-Czebyszewa wszystkie współczynniki są równe:

$$A_k = \frac{\pi}{N+1}.$$

Węzły określa wzór

$$x_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2N+2}.$$

- $[a, b) = [0, \infty)$, $p(x) = e^{-x}$

Wielomianami ortogonalnymi są wielomiany Laguerre'a określone wzorem

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}).$$

Waga $p(x) = e^{-x}$ zapewnia zbieżność całki

$$\int_0^{\infty} p(x)W(x)dx,$$

gdzie $W(x)$ oznacza dowolny wielomian. Kwadratury takie nazywa się *kwadraturami Gaussa-Laguerre'a*. Ich współczynniki i błąd określają następujące wzory:

$$A_k = \frac{[(N+1)!]^2}{L_{N+2}(x_k)L'_{N+1}(x_k)}, \quad E(f) = \frac{[(N+1)!]^2}{(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\xi),$$

gdzie x_k oznaczają pierwiastki wielomianu $L_{N+1}(x)$, a $\xi \in (0, \infty)$.

- $(a, b) = (-\infty, \infty)$, $p(x) = \exp(-x^2)$

W tym przypadku mamy *kwadratury Gaussa-Hermite'a* z wielomianami ortogonalnymi Hermite'a, które są określone wzorem

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

Wzory na współczynniki i błąd są następujące:

$$A_k = \frac{2^{N+2}(N+1)!\sqrt{\pi}}{H_{N+2}(x_k)H'_{N+1}(x_k)}, \quad E(f) = \frac{(N+1)\sqrt{\pi}}{2^{N+1}(2N+2)!} f^{(2N+2)}(\xi),$$

gdzie x_k oznaczają pierwiastki wielomianu $H_{N+1}(x)$, a $\xi \in (-\infty, \infty)$.

W praktyce nie stosujemy kwadratur Gaussa wysokiego rzędu i na ogół nie obliczamy każdorazowo węzłów i współczynników, lecz posługujemy się odpowiednimi tablicami.

9.7. Kwadratury złożone Gaussa

Rozpatrzmy kwadraturę Gaussa-Legendre'a. Podzielmy przedział całkowania $[a, b]$ na n równych części. Stosując do obliczenia całki kwadraturę złożoną ze wzorami rzędu $2N+2$ na każdym podprzedziale, otrzymamy błąd

$$E(f) = n \left(\frac{b-a}{n} \right)^{2N+3} \frac{[(N+1)!]^4}{(2N+3)[(2N+2)!]^3} f^{(2N+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Z wzoru tego wynika, że zwiększając liczbę podprzedziałów (tj. wartość n) możemy dowolnie zmniejszyć błąd.

Dla $N = 1$ i $n = m/2$, gdzie m oznacza liczbę parzystą, mamy

$$\int_a^b f(x) = \sum_{j=0}^{\frac{m}{2}-1} \int_{a+2jh}^{a+2(j+1)h} f(x) dx$$

oraz (w tym przypadku $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $A_0 = A_1 = 1$)

$$S(f) = h \sum_{j=0}^{\frac{m}{2}-1} \left\{ f \left[a + h \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}} + 2j \right) \right] + f \left[a + h \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}} + 2j \right) \right] \right\}, \quad h = \frac{b-a}{m}.$$

Błąd jest określony wzorem

$$E(f) = \frac{(b-a)^5}{270m^4} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$