UVOD U NUMERIČKU MATEMATIKU

Nenad Ujević
Fakultet prirodoslovno-matematičkih znanost i odgojnih područja
Sveučilište u Splitu

January 30, 2004

Contents

PREDGOVOR

Numerička analiza ima veoma važnu ulogu u primjenjenoj matematici. U stvari, može se slobodno reći da je ona bazična disciplina za mnoga područja koja primjenjena matematika u svojoj cjelini obuhvaća. Ona je takodjer veoma stara grana matematike, ali se posebno intezivno počela razvijati nakon pojave kompjutera. Pojava kompjutera uvjetovala je razvoj mnogih disciplina unutar same numeričke analize, disciplina koje do tada i nisu bile podrobnije proučavane. Jedan od razloga zašto je nekada bilo tako možemo npr. naći u sljedećoj činjenici. Zamislimo da neki numerički postupak vodi na rješavanje sustava linearnih jednadžbi reda sto. Takav sustav u današnje vrijeme se smatra manjim sustavom, medjutim nekada, kada nije bilo kompjutera, veoma teško da bi se netko upustio u njegovo rješavanje. Naime, za riješiti takav sustav Gaussovom metodom eliminacija potrebno je izvršiti više od 600 000 aritmetičkih operacija. Danas se to može izvršiti u vremenskom periodu manjem od sekunde. Takvih primjera ima mnogo više, pogotovo kad promatramo nelinearne probleme.

Numerička analiza je takodjer veoma opsežna grana matematike tako da je u jednoj knjizi gotovo nemoguće obuhvatiti sve njezine djelove. Zato postoji čitav niz specijaliziranih knjiga koje obradjuju samo pojedina područja numeričke analize. Spomenimo neka od tih područja: aproksimacija funkcija, numerička derivacija, numerička integracija, rješavanje nelinearnih jednadžbi (ova područja su obradjena u ovoj skripti), zatim metode za nalaženje svojstvenih vrijednosti, rješavanje sustava linearnih jednadžbi, metode rješavanja običnih i parcijalnih diferencijalnih jednadžbi itd.

Ova skripta nastala je kao posljedica predavanja iz kolegija Uvod u numeričku matematiku koja je autor držao studentima druge godine Fakulteta prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja u Splitu, a na smjerovima profesor matematike i informatike i profesor matematike. U samom svom sadržaju ona obuhvaća i dio materijala koji nije obuhvaćen programom tog kolegija. Ta dodatna područja našla su svoje mjesto u skripti radi boljeg uvida u stanje u svakom od poglavlja koja se inače po programu kolegija Uvod u numeričku matematiku obradjuju. Neki djelovi gradiva koji su ovdje izloženi prelaze okvire kolegija koji nosi naziv "Uvod u...", medjutim njihovim prezentiranjem stječe se bolji uvid u kojim se sve smjerovima može standardno gradivo dalje razvijati.

Skripta je inače podijeljena u sekcije, a ove opet u podsekcije. Glavni sadržaj skripte nalazi se u prve tri sekcije: Aproksimacija funkcija, Numerička integracija i Nelinearne jednadžbe. Dio materijala, koji zbog sažetosti izlaganja glavne materije nije detaljno obradjen u te prve tri sekcije, može se naći u četvrtoj, a ujedno i zadnjoj sekciji Vježbe. Ova zadnja sekcija sadrži osim pomenutog i samostalne zadatke za vježbu. Na kraju su dane upute za rješavanje i veoma često detaljna rješenja tih zadataka. Skripta završava dosta prezentivnim popisom literature koju čitatelj može koristiti za daljnje upoznavanje i proširivanje osnovne materije koja je prezentirana u prethodnim sekcijama.

Na kraju, kako je ovo prva verzija skripte moguće je da se potkrala i poneka štamparska grešaka u njenom sadržaju. Svima onima koji mi ukažu na te greške, ali i na eventualne propuste druge vrste, bit ću izuzetno zahvalan.

U Slitu, 21. 01. 2004. Autor

1 Aproksimacija funkcija

Problem aproksimacije funkcija spada u onu grupu matematičkih problema koji se veoma često pojavljuju u matematičkoj teoriji, ali još češće u matematičkoj praksi. Što se tiče teorijskog aspekta, specijalisti u teoriji aproksimacija uzimaju da se ta teorija počela intezivnije razvijati od otprilike prije 130 godina. Praktični aspekti primjene naglo su izbili u prvi plan nakon što su se pojavili kompjuteri. Ta primjena ostvarena je, osim u samoj čistoj matematici, i u mnogim primjenjenim znanostima jednako kao i kod rješavanja čitavog niza inženjerskih problema. Potreba za razvojem jednog ovakvog područja nastala je kao posljedica činjenice da se u mnogim problemima, koji prije svega dolaze iz prakse, ne može uvijek naći egzaktno rješenje. To znači da smo prisiljeni potražiti najbolju moguću aproksimaciju egzaktnog (točnog) rješenja. Normalno, pri tome uvijek radimo neku grešku. Uzroci greške aproksimativnog rješenja mogu biti višestruki. Izvore toga možemo potražiti u sljedećem. Kao prvo, tu je često nedostatak u povezanosti matematičkog problema i stvarnog problema kojeg taj matematički problem opisuje. Kao drugo dolaze greške u početnim podacima uzrokovane netočnim mjerenjima istih. Treću grupu uzroka, koja je za nas ovdje ujedno i najvažnija, čine greške koje se pojavljuju u metodama pomoću kojih rješavamo neki problem. Na kraju, kao četvrto, tu su i tzv. greške zaokruživanja koje se javljaju prilikom izvodjenja aritmetičkih operacija. Kao što smo rekli, mi ćemo ovdje najviše pažnje posvetiti trećoj grupi uzroka greške aproksimativnog rješenja, pa ćemo u tom smislu u ovom paragrafu (ali i u ostalim paragrafima) nastojati za svaku prezentiranu metodu odrediti njezinu grešku odnosno ocjenu te greške. Normalno, egzaktnu vrijednost same greške nikada ne možemo odrediti (inače bi znali i samo egzaktno rješenje). Pri tom ćemo iznijeti različite metode rješavanja problema aproksimacije funkcija uz odredjen popratni materijal, koji i ne spada direktno u teoriju i praksu aproksimacija, ali bez kojega bi bilo teško shvatiti osnovnu materiju koja se ovdje izlaže.

1.1 Hornerov algoritam

U teoriji aproksimacija polinomi su najvažnija klasa funkcija. Algebarski polinom je funkcija oblika

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n,$$

gdje su a_k koeficijenti polinoma, a n je njegov stupanj. Veoma često potrebno je izračunati vrijednost polinoma u nekoj točki $x = a$. Najekonomičniji postupak da se to uradi daje nam tzv. Hornerova metoda koju ćemo sada opisati.

Zapišimo polinom $P_n(x)$ u obliku

$$P_n(x) = a_0 + x\left\{a_1 + \cdots + x\left[a_{n-2} + x\left(a_{n-1} + x a_n\right)\right]\cdots\right\}.$$

U skladu s takvim zapisom postupak računanja polinoma u točki $x = a$ teče ovako:

$$\begin{aligned} b_n &= a_n \\ b_{n-1} &= a_{n-1} + a b_n \\ b_{n-2} &= a_{n-2} + a b_{n-1} \\ &\cdots \\ b_1 &= a_1 + a b_2 \\ b_0 &= a_0 + a b_1 \end{aligned}$$

Tada je $P_n(a) = b_0$. Za realizaciju ove metode potrebno je izvršiti n zbrajanja i n množenja, tj. sveukupno $2n$ aritmetičkih operacija. Može se pokazati da ne postoji postupak koji bi izračunao vrijednost polinoma $P_n(x)$ u nekoj točki $x = a$ uz manji broj aritmetičkih operacija.

Ako je polinom $P_n(x)$ parna ili neparna funkcija tada se takodjer može za njega napisati algoritam sličan gornjem algoritmu. Npr., ako je polinom parna funkcija tada taj algoritam dobivamo iz zapisa

$$P_{2k}(x) = a_0 + x^2\left\{a_2 + \cdots + x^2\left[a_{2k-4} + x^2\left(a_{2k-2} + x^2 a_{2k}\right)\right]\cdots\right\}.$$

1.2 Weierstrassov teorem

Teorem 1 *Ako je $f \in C[a,b]$ tada za svaki zadani broj $\varepsilon > 0$ postoji polinom p stupnja n takav da je*

$$|f(x) - p(x)| < \varepsilon,\ x \in [a,b].$$

Teorem kaže da se svaka neprekidna funkcija zadana na nekom segmentu može po volji dobro aproksimirati nekim polinomom. Ima više različitih dokaza ovog teorema. Mi ćemo ovdje iznijeti dokaz preko Bernštejnovih polinoma,

$$B_n(t) = \sum_{k=0}^{n} f(\frac{k}{n})\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k},$$

definiranih na segmentu $[0,1]$. U stvari, dokazat ćemo da niz polinoma (B_n) uniformno konvergira prema funkciji f na $[0,1]$. Dokaz uradjen na segmentu $[0,1]$, pomoću linearne transformacije, lako se prenosi na bilo koji segment $[a,b]$.

U tu svrhu najprije proučimo sljedeće relacije. Iz binomne formule lako nalazimo da je

$$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = [t + (1-t)]^n = 1. \tag{1}$$

Deriviranjem te relacije po t dobivamo

$$\sum_{k=1}^{n} k\binom{n}{k} t^{k-1} (1-t)^{n-k} - \sum_{k=0}^{n-1} (n-k)\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k-1} = 0,$$

odnosno, nakon množenja sa t,

$$\sum_{k=0}^{n} k\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = \sum_{k=0}^{n-1} (n-k)\binom{n}{k} t^{k+1} (1-t)^{n-k-1}.$$

Pregrupiranjem članova dobivamo

$$\frac{1}{1-t}\sum_{k=0}^{n} k\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = \frac{nt}{1-t}\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k}$$

čime smo dokazali da je

$$\sum_{k=0}^{n} k\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = nt. \tag{2}$$

Slično se dokaže da je

$$\sum_{k=0}^{n} k^2\binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = nt(1-t+nt). \tag{3}$$

Iz (1)–(3) dobivamo

$$\sum_{k=0}^{n}(nt-k)^2\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k}=nt(1-t). \tag{4}$$

Dokaz. (da $B_n \to f$, uniformno na $[0,1]$)

Neprekidna funkcija na segmentu je uniformno neprekidna pa po definiciji vrijedi

$$(\forall\varepsilon>0)\,(\exists\delta>0)\,(\forall t,t_1\in[0,1])\qquad |t-t_1|<\delta\Rightarrow|f(t)-f(t_1)|<\varepsilon.$$

Neprekidna funkcija poprima svoj maksimum na segmentu. Neka je taj maksimum od f jednak M. Pokazat ćemo sada da postoji $n_0\in N$ takav da za $n>n_0$ i svaki $t\in[0,1]$ vrijedi

$$|f(t)-B_n(t)|<2\varepsilon. \tag{5}$$

Iz (1) slijedi

$$f(t)=\sum_{k=0}^{n}f(t)\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k}$$

pa je

$$|f(t)-B_n(t)|\le\sum_{k=0}^{n}\left|f(t)-f(\frac{k}{n})\right|\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k},$$

za $t\in[0,1]$. Skup $I=\{0,1,2,...,n\}$ rastavimo na dva podskupa: $I_1=\left\{k:\left|t-\frac{k}{n}\right|<\delta\right\}$ i $I_2=\left\{k:\left|t-\frac{k}{n}\right|\ge\delta\right\}$. Očigledno je $I=I_1\cup I_2$. Iz (1) slijedi

$$\begin{aligned}&\sum_{k\in I_1}\left|f(t)-f(\frac{k}{n})\right|\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k} \qquad (6)\\ <\;&\varepsilon\sum_{k\in I_1}\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k}<\varepsilon,\end{aligned}$$

jer je $\left|f(t)-f(\frac{k}{n})\right|<\varepsilon$. Takodjer je

$$\begin{aligned}&\sum_{k\in I_2}\left|f(t)-f(\frac{k}{n})\right|\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k}\\ \le\;&\frac{2M}{\delta^2}\sum_{k\in I_2}\left(t-\frac{k}{n}\right)^2\binom{n}{k}t^k(1-t)^{n-k},\end{aligned}$$

jer je $\delta \leq \left|t - \frac{k}{n}\right|$, za $k \in I_2$. Iz (4) i gornje relacije dobivamo

$$\begin{aligned} & \frac{2M}{\delta^2} \sum_{k \in I_2} \left(t - \frac{k}{n}\right)^2 \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} \\ \leq & \frac{2M}{\delta^2 n^2} \sum_{k=0}^{n} (nt-k)^2 \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} \\ = & \frac{2M}{\delta^2 n^2} nt(1-t) \leq \frac{M}{2n\delta^2}, \end{aligned}$$

jer je $t(1-t) \leq \frac{1}{4}$.

Ako sada biramo $\frac{M}{2n\delta^2} < \varepsilon$, odnosno $n > \frac{M}{2\delta^2\varepsilon}$ tada je $n_0 = \left[\frac{M}{2\delta^2\varepsilon}\right] + 1$. Za $n > n_0$ dakle vrijedi

$$\sum_{k \in I_2} \left| f(t) - f(\frac{k}{n}) \right| \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} < \varepsilon \tag{7}$$

Iz relacija (6) i (7) vidimo da (5) vrijedi, dakle, $B_n \to f$ uniformno na $[0, 1]$.
■

1.3 Taylorova formula

Taylorova formula jedna je od najznačajnijih formula u matematici uopće. Takva tvrdnja stoji prije svega zbog velikog broja primjena te formule. Npr., pomoću nje može se odredjivati približna vrijednost neke funkcije u nekoj točki, pomoću nje mogu se nalaziti približne vrijednosti derivacija i integrala, služi za odredjivanje metoda za približno nalaženje rješenja nelinearnih jednadžbi, itd.

Mi ćemo ovdje izvesti tu formulu pošavši od sljedeće generalizacije formule za parcijalnu integraciju

$$\begin{aligned} & \int_a^b f^{(n+1)}(t) g(t) dt \\ = & \left[f^{(n)}(t) g(t) - f^{(n-1)}(t) g'(t) + \cdots + (-1)^n f(t) g^{(n)}(t) \right]_{t=a}^{t=b} \\ & +(-1)^{n+1} \int_a^b f(t) g^{(n+1)}(t) dt. \end{aligned}$$

Ako u gornju formulu uvrstimo $g(t) = (b-t)^n/n!$, uz činjenice da je

$$g'(t) = -\frac{(b-t)^{n-1}}{(n-1)!}, \ldots, g^{(k)}(t) = (-1)^k \frac{(b-t)^{n-k}}{(n-k)!},$$

pa je

$$g(b) = g'(b) = \cdots = g^{(n-1)}(b) = 0,\ g^{(n)}(b) = (-1)^n,$$

dobivamo

$$\begin{aligned} f(b) &= f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(b-a) + \frac{f''(a)}{2!}(b-a)^2 + \cdots + \\ &+ \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(b-a)^n + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(t)}{n!}(b-t)^n dt. \end{aligned}$$

Ako sada stavimo $b = x$ dobivamo Taylorovu formulu n-tog reda

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k + \int_a^x \frac{f^{(n+1)}(t)}{n!}(x-t)^n dt.$$

Član

$$R_n(x) = \int_a^x \frac{f^{(n+1)}(t)}{n!}(x-t)^n dt$$

je ostatak u toj formuli i nije teško pokazati da se može zapisati u obliku

$$R_n(x) = f^{(n+1)}(\xi(x))\frac{(x-a)^{n+1}}{(n+1)!},$$

gdje je $\xi(x)$ neodredjena veličina.

Osim Taylorove formule možemo promatrati i Taylorov red funkcije f u točki a. To je red oblika

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k,$$

gdje je $f \in C^{\infty}(c,b)$, $a \in (c,b)$. Ilustracije radi dat ćemo Taylorove redove nekih elementarnih funkcija, koji konvergiraju na čitavom skupu R:

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!},$$

$$\sin x = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!},$$

$$\cos x = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k)!}.$$

Primjeri Taylorovih redova koji konvergiraju na $(-1, 1)$, takodjer za elementarne funkcije, su

$$\ln(1 + x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{k+1}}{k + 1},$$

$$\arctan x = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{x^{2k-1}}{2k - 1}.$$

1.4 Lagrangeov interpolacijski polinom

Problem interpolacije funkcije $f : R \to R$ na segmentu $[a, b]$ možemo opisati na sljedeći način. Neka su $x_0, x_1, ..., x_n$ različite točke iz segmenta $[a, b]$ i neka su $y_i = f(x_i)$ vrijednosti funkcije f u čvornim točkama x_i, $i = 0, 1, 2, ..., n$. (Ako ne postoji neki poseban razlog da se to ne radi onda možemo uzeti $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.) Treba naći polinom $L_n(x)$ takav da je

$$L_n(x_i) = y_i, \; i = 0, 1, 2, ..., n. \tag{8}$$

Postavlja se pitanje da li takav polinom postoji, te ako postoji, da li je jedinstven? Na ta pitanja daje odgovore sljedeći teorem.

Teorem 2 *(egzistencija i jedinstvenost)*
Postoji i jedinstven je polinom stupnja $\leq n$ koji zadovoljava (8).

Dokaz. Prvo dokazujemo egzistenciju. U tu svrhu konstruiramo tzv. bazične interpolacijske polinome koji imaju isti stupanj n. Takvi polinomi $p_i(x)$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, moraju zadovoljavati relaciju

$$p_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, \; i = j \\ 0, \; i \neq j, \end{cases}$$

za $i, j = 0, 1, 2, ..., n$. Neka je sada i proizvoljan, ali fiksan. Polinom $p_i(x)$ poništava se u svim točkama x_j za $i \neq j$. To znači da su $x_0, x_1, ..., x_{i-1}, x_{i+1}, ..., x_n$ nul-točke tog polinoma pa se taj polinom (koji je stupnja n) može zapisati kao

$$p_i(x) = C_i(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n),$$

gdje je C_i neka konstanta koju ćemo sada odrediti. Naime, iz uvjeta $p_i(x_i) = 1$ dobivamo

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}.$$

Dakle, imamo da je

$$p_i(x) = \frac{(x - x_0)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}. \tag{9}$$

Nije teško provjeriti da je

$$p_i(x_j) = \delta_{ij},\ i, j = 0, 1, 2, ..., n. \tag{10}$$

Definirajmo sada polinom

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} p_i(x) y_i, \tag{11}$$

gdje su $p_i(x)$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, zadani sa (9). Kako svi polinomi $p_i(x)$ imaju isti stupanj n, to je očigledno kako polinom $L_n(x)$ ima stupanj $\leq n$. Tvrdimo da je $L_n(x)$ interpolacijski polinom, tj. da za njega vrijedi (8). Provjerimo to:

$$L_n(x_j) = \sum_{i=0}^{n} p_i(x_j) y_i = \sum_{i=0}^{n} \delta_{ij} y_i = y_j,$$

za $j = 0, 1, 2, ..., n$. (Poviše smo koristili relaciju (10).) Time je egzistencija interpolacijskog polinoma dokazana. Preostaje dokazati jedinstvenost. U tu svrhu pretpostavimo da pored interpolacijskog polinoma $L_n(x)$ postoji još jedan interpolacijski polinom $\hat{L}(x)$, stupnja $\leq n$. Za njega onda takodjer vrijedi

$$\hat{L}(x_j) = y_j,\ j = 0, 1, 2, ..., n.$$

Promotrimo sada polinom

$$P(x) = L_n(x) - \hat{L}(x).$$

Ovaj polinom ima stupanj $\leq n$, jer polinomi $L_n(x)$ i $\hat{L}(x)$ imaju stupnjeve $\leq n$. Osim toga vrijedi

$$P(x_j) = L_n(x_j) - \hat{L}(x_j) = y_j - y_j = 0,$$

za $j = 1, 2, ..., n$. Tada se taj polinom (stupnja $\leq n$) može zapisati kao

$$P(x) = C(x - x_1) \cdots (x - x_n),$$

gdje je C neka konstanta. Znamo da je $P(x_0) = 0$ pa imamo da je

$$P(x_0) = C(x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n) = 0$$

što povlači da je $C = 0$. Iz toga slijedi da je $P(x) = 0$, odnosno $L_n(x) = \hat{L}(x)$. Time je i jedinstvenost interpolacijskog polinoma dokazana. ■

Polinom $L_n(x)$, iz teorema 2, naziva se Lagrangeovim interpolacijskim polinomom. Taj polinom koristimo kad trebamo izračunati vrijednost funkcije f u nekoj točki $x \in [a, b]$, $x \neq x_i$, $i = 0, 1, 2, ..., n$. On se može koristiti i u mnoge druge svrhe. Npr., pomoću njega možemo odredjivati približnu vrijednost derivacije funkcije u nekoj točki iz (a, b) (vidite podsekciju o numeričkoj derivaciji) ili možemo pomoću njega konstruirati kvadraturnu formulu koja služi za približno nalaženje vrijedosti odredjenog integrala funkcije f na segmentu $[a, b]$ (vidite sekciju o numeričkoj integraciji). U praksi je često potrebno naći neku vrijednost funkcije pomoću linearne interpolacije. Za to nam služi Lagrangeov interpolacijski polinom $L_1(x)$,

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1.$$

Osim ovog polinoma koristit ćemo posebno još i interpolacijski polinom $L_2(x)$,

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 \\ &\quad + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2. \end{aligned}$$

1.4.1 Greška interpolacije

Kada stvarnu vrijednost funkcije f odredjujemo pomoću Lagrangeovog interpolacijskog polinoma tada radimo neku grešku. Naime, umjesto prave vrijednosti $f(x)$ mi odredjujemo $L_n(x) \approx f(x)$. Sada ćemo odrediti kolika je ta greška. U tu svrhu prisjetimo se Rolleovog teorema koji kaže: ako je funkcija g klase $C^1(a, b)$ i $g(a) = g(b)$ onda postoji točka $\xi \in (a, b)$ takva da je $g'(\xi) = 0$, tj. prva derivacija funkcije g poništava se u bar jednoj točki iz intervala (a, b).

Definiramo sada funkciju

$$E(t) = f(t) - L_n(t),$$

gdje je $L_n(t)$ Lagrangeov interpolacijski polinom. Pretpostavit ćemo da je $f \in C^{(n+1)}(a, b)$. Takodjer definiramo funkciju

$$g(x) = E(x) - \frac{\omega_n(x)}{\omega_n(t)} E(t),$$

gdje je $\omega_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$. Kako su funkcije E i ω_n $(n+1)$-puta neprekidno diferencijabilne to je i funkcija g $(n + 1)$-puta neprekidno diferencijabilna. Osim toga je

$$g(x_i) = E(x_i) - \frac{\omega_n(x_i)}{\omega_n(t)} E(t) = 0, \; i = 0, 1, 2, ..., n,$$

jer je $E(x_i) = f(x_i) - L_n(x_i) = 0$ i $\omega_n(x_i) = 0$, $i = 0, 1, 2, ..., n$. Takodjer vrijedi

$$g(t) = E(t) - \frac{\omega_n(t)}{\omega_n(t)} E(t) = 0.$$

Iz gornje dvije relacije vidimo da se funkcija g poništava u $(n + 1) + 1 = n + 2$ točke $(t, x_0, x_1, ..., x_n)$. Ako primijenimo Rolleov teorem na tu funkciju nalazimo da se prva derivacija funkcije g poništava barem u $(n+1)-$oj točki. Primjenom Rolleovog teorema na prvu derivaciju zaključujemo da se druga derivacija funkcije g poništava bar u n točaka. Nastavimo li na taj način, vidimo da se $(n+1)-$va derivacija funkcije g poništava u barem jednoj točki unutar intrevala (a, b). Označimo tu točku sa ξ,

$$g^{(n+1)}(\xi) = 0.$$

S druge strane nalazimo da je

$$\begin{aligned} g^{(n+1)}(x) &= E^{(n+1)}(x) - \frac{\omega_n^{(n+1)}(x)}{\omega_n(t)} E(t) \\ &= f^{(n+1)}(x) - \frac{(n+1)!}{\omega_n(t)} E(t), \end{aligned}$$

jer je $L_n^{(n+1)}(x) = 0$ i $\omega_n^{(n+1)}(x) = (n + 1)!$, pa je

$$g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - \frac{(n+1)!}{\omega_n(t)} E(t) = 0.$$

Odavde dobivamo

$$E(t)=\frac{\omega_n(t)}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi),\ \xi\in(a,b)\,.$$

Tako smo dobili reprezentaciju

$$f(x)=L_n(x)+\frac{\omega_n(x)}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi).$$

U toj reprezentaciji član $\frac{\omega_n(x)}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)$ je greška interpolacije. Ako je

$$M_{n+1}=\max_{x\in[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$$

tada se ta greška može ocijeniti sa

$$|E(x)|\leq\frac{|\omega_n(x)|}{(n+1)!}M_{n+1}.$$

U gornjoj ocjeni ne možemo utjecati na faktore $(n+1)!$ i M_{n+1}. Medjutim, može se utjecati na faktor $|\omega_n(x)|$ u smislu da ta ocjena bude minimalna. Drugim riječima, treba odrediti čvorne točke x_i tako da faktor $|\omega_n(x)|$ poprimi najmanju moguću vrijednost. To ćemo uraditi u sljedećoj podsekciji.

1.4.2 Minimiziranje greške interpolacije

Da bismo našli čvorove x_i (nul-točke funkcije $\omega_n(x)$) za koje će greška interpolacije biti minimalna moramo prethodno reći nešto o polinomima Čebiševa.

Polinomi Čebiševa.

Ovi polinomi mogu se definirati relacijom

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\ |x|\leq 1. \tag{12}$$

Tada je

$$\begin{aligned}T_0(x)&=\cos 0=1,\\ T_1(x)&=\cos(\arccos x)=x.\end{aligned}$$

Imamo da je

$$\cos\left[(n+1)\alpha\right]=2\cos\alpha\cos n\alpha-\cos\left[(n-1)\,\alpha\right].$$

Ako u ovu relaciju uvrstimo $\alpha = \arccos x$ dobivamo

$$\cos\left[(n+1)\arccos x\right] = 2x\cos\left[n(\arccos x)\right] - \cos\left[(n-1)\arccos x\right]. \tag{13}$$

Iz (12) i (13) dobivamo

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x),\ n > 0. \tag{14}$$

Pomoću relacije (14) i činjenice da smo već našli T_0 i T_1 možemo naći sve ostale polinome Čebiševa, npr.

$$\begin{aligned} T_2(x) &= 2x^2 - 1, \qquad (15)\\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x,\\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1. \end{aligned}$$

Iz (12) vidimo da je

$$|T_n(x)| \leq 1,\ |x| \leq 1. \tag{16}$$

Iz (15) zaključujemo da je vodeći koeficijent polinoma Čebiševa reda n jednak 2^{n-1}, što nije teško dokazati. Izjednačimo li $T_n(x) = 0$ dobivamo nul-točke polinoma Čebiševa

$$x_k = \cos\frac{(2k+1)\pi}{2n},\ k = 0, 1, ..., n-1.$$

Iz (12) i (16) za ekstremalne točke od $T_n(x)$ na $[-1, 1]$ zaključujemo da vrijedi

$$|T_n(x_j)| = 1.$$

Rješavanjem zadnje jednadžbe dobivamo

$$x_j = \cos\frac{j\pi}{n},\ j = 0, 1, ..., n \tag{17}$$

i

$$T_n(x_j) = \cos j\pi = (-1)^j.$$

Polinomi Čebiševa imaju još čitav niz zanimljivih svojstava od kojih mi ovdje navodimo još jedno, koje nam treba za daljnja razmatranja.

Lema 3 *Ako je P_n polinom stupnja n s vodećim koeficijentom jednakim 1 i $\hat{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$, gdje je $T_n(x)$ polinom Čebiševa n-tog stupnja, tada vrijedi*

$$\max_{x\in[-1,1]}\left|\hat{T}_n(x)\right| = \frac{1}{2^{n-1}} \leq \max_{x\in[-1,1]}|P_n(x)|.$$

Dokaz. Pretpostavimo suprotno, tj. neka postoji polinom $P_n(x)$, stupnja n, s vodećim koeficijentom 1 takav da je $|P_n(x)| < \frac{1}{2^{n-1}}$. Primijetimo da je $\hat{T}_n(x)$ takodjer polinom stupnja n s vodećim koeficijentom 1. Tada je polinom $Q(x) = \hat{T}_n(x) - P_n(x)$ polinom stupnja $\leq n-1$ i vrijedi

$$sgn\left[\hat{T}_n(x_j) - P_n(x_j)\right] = sgn\left[\frac{(-1)^j}{2^{n-1}} - P_n(x_j)\right] = (-1)^j,$$

za $j = 0, 1, 2, ..., n$, gdje je $sgn(g)$ predznak od g. (U gornjoj relaciji su točke x_j definirane sa (17).) Dakle, polinom $Q(x)$ mijenja predznak izmedju svake dvije točke x_j i x_{j+1} pa ima n različitih nul-točaka. Ovo je kontradikcija sa činjenicom da $Q(x)$ ima stupanj $\leq n-1$ (što znači da može imati najviše $n-1$ nul-točaka). Zaključujemo da ne može biti $|P_n(x)| < \frac{1}{2^{n-1}}$. Time je dokaz gotov. ■

Drugim riječima rečeno, na segmentu $[-1, 1]$ za interpolacijske čvorove najoptimalnije je birati nul-točke polinoma Čebiševa $T_{n+1}(x)$. Naime, za njih će $|\omega_n(x)| = |(x - x_0) \cdots (x - x_n)|$ biti minimalno i $\omega_n(x) = \hat{T}_{n+1}(x)$. U stvari, Lema 3 kaže da bolji polinom ne možemo naći.

Ako sada pomoću linearne transformacije

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

prebacimo naš problem na segment $[a, b]$ tada će interpolacijski čvorovi biti

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\frac{(2k+1)\pi}{2n+2},$$

$k = 0, 1, 2, ..., n$. Za te točke (čvorove) dobivamo

$$\omega_n(x) = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{n+1}}\hat{T}_{n+1}(t)$$

i

$$\max_{x\in[a,b]}|\omega_n(x)| = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{n+1}}\max_{t\in[a,b]}\left|\hat{T}_{n+1}(t)\right| = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}.$$

Zato za grešku interpolacije vrijedi

$$\max_{x\in[a,b]}|f(x) - L_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}},$$

gdje je

$$M_{n+1} = \max_{x\in[a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right| .$$

Zaključujemo, minimalnu ocjenu za grešku interpolacije imamo ako za interpolacijske čvorove biramo točke x_k, zadane poviše, a ta ocjena greške dana je u pretposljednjoj relaciji.

1.4.3 Ekvidistantna interpolacija

Najednostavniji izbor interpolacijskih čvorova je

$$x_{i+1} = x_i + h, \quad i = 0, 1, 2, ..., n-1,$$

gdje je $h > 0$ unaprijed zadan korak mreže $\{x_0 < x_1 < \cdots < x_n\}$; npr. $h = (b-a)/n$. Ako je sada $x \in [x_0, x_n]$ tada je $x = x_0 + th$, za neki $t \geq 0$. Napišimo bazične interpolacijske polinome

$$p_i(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

pomoću novo uvedenih veličina. Imamo da je

$$x - x_0 = th,\ x - x_1 = (t-1)h, ...,\ x - x_n = (t-n)h$$

i

$$x_i - x_0 = ih,\ x_i - x_1 = (i-1)h, ...,\ x_i - x_n = (i-n)h$$

pa je

$$\begin{aligned}
p_i(x) &= \frac{th(t-1)h\cdots(t-(i-1))h(t-(i+1))h\cdots(t-n)h}{ih(i-1)h\cdots h(-h)\cdots(i-n)h} \\
&= \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(t-i)i(i-1)\cdots 1(-1)^{n-i}1\cdot 2\cdots(n-i)} \\
&= \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(t-i)i!(n-i)!}\frac{n!}{n!}(-1)^{n-i} \\
&= (-1)^{n-i}\tbinom{n}{i}\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(t-i)n!}.
\end{aligned}$$

Tada je Lagrangeov interpolacijski polinom oblika

$$\begin{aligned}
L_n(x) &= L_n(x_0 + th) \\
&= (-1)^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{n!}\sum_{i=0}^{n}(-1)^i\tbinom{n}{i}\frac{y_i}{t-i}.
\end{aligned}$$

1.4.4 Konvergencija interpolacijskih polinoma

Postavlja se pitanje kad će niz Lagrangeovih interpolacijskih polinoma neke funkcije f, zadane na segmentu $[a, b]$, konvergirati toj funkciji.

Teorem 4 *Neka je $f(z)$ analitička funkcija na krugu $K(S, r)$, gdje je središte kruga $S(\frac{a+b}{2}, 0)$, a radijus $r > 2(b-a)$. Tada greške interpolacijskih polinoma funkcije f na segmentu $[a, b]$ uniformno konvergiraju prema nuli.*

Dokaz. Neka je $M = \max_{z\in K} |f(z)|$ i $m = \min_{z\in K} |z-x|^{n+1}$. Iz Cauchyjeve formule imamo da je

$$\begin{aligned}
\left|f^{(n)}(x)\right| &= \left|\frac{n!}{2\pi i}(-1)^{n+1}\int_K \frac{f(z)}{(x-z)^{n+1}}dz\right| \\
&\leq \frac{n!}{2\pi}\int_K \left|\frac{f(z)}{(x-z)^{n+1}}\right| dz \\
&\leq n!\frac{2\pi r}{2\pi}\frac{M}{m} \leq rn!M\left(\frac{2}{r}\right)^{n+1},
\end{aligned}$$

gdje je zadnja nejednakost posljedica sljedeće nejednakosti

$$\begin{aligned}
|z-x| &\geq \left|z-\frac{a+b}{2}\right| - \left|x-\frac{a+b}{2}\right| \\
&\geq r-\frac{r}{2} = \frac{r}{2}.
\end{aligned}$$

Zato za grešku interpolacije vrijedi

$$\begin{aligned}
|E_{n-1}(f)| &\leq \frac{(b-a)^n}{n!}\left|f^{(n)}(\xi(x))\right| \\
&\leq \frac{rM}{r/2}\left(\frac{b-a}{r/2}\right)^n \\
&\leq 2M\left(\frac{b-a}{r/2}\right)^n \to 0,\ n\to\infty,
\end{aligned}$$

jer je $\frac{b-a}{r/2} < 1$ po pretpostavci. ■

Medjutim, neće za svaku funkciju f niz Lagrangeovih polinoma konvergirati prema samoj funkciji f. Kontraprimjer imamo (npr.) kod Rungeove funkcije $f(x) = 1/(x^2+1)$. Pokazano je da uz uniformnu particiju segmenta $[-5,5]$ točkama $x_i^n = -5 + i\frac{10}{n}$ vrijedi

$$\lim_{n\to\infty} \left\{ \max_{|x|<3.633} |L_n(x) - f(x)| \right\} = 0,$$

medjutim

$$\lim_{n\to\infty} \left\{ \max_{3.633<|x|<5} |L_n(x) - f(x)| \right\} = \infty.$$

Primijetimo da je, osim u točkama $x = \pm i$, Rungeova funkcija analitička. Ovaj primjer je iznesen 1901. godine.

Drugi zanimljiv primjer dao je Bernštejn, koji je pokazao da za funkciju $f(x) = |x|$, Lagrangeovi interpolacijski polinomi uz ekvidistantnu particiju segmenta $[-1,1]$, konvergiraju prema f samo u točkama $x=-1$, $x=0$ i $x=1$. Ovaj primjer je iznesen 1912. godine.

Nakon toga nadjeni su općenitiji dokazi da niz Lagrangeovih interpolacijskih polinoma neće za svaku funkciju konvergirati (npr. to su uradili Faber, Kharshiladze i Lozinski). Medjutim, nas ovdje isključivo zanimaju oni primjeri funkcija za koje niz Lagrangeovih interpolacijskih polinoma konvergira, a jedan od kriterija da će tome biti tako daje nam gornji teorem.

1.5 Podijeljene diferencije

Naš je cilj dobiti zapis interpolacijskog polinoma u Newtonovom obliku. U tu svrhu prvo uvodimo pojam podijeljenih diferencija i proučavamo neka njihova svojstva.

No, najprije ćemo reći nešto o konačnim diferencijama. Ako je $x_k = x_0 + kh$, gdje je k cijeli broj, $h > 0$ zadani korak i $y_k = f(x_k)$, tada je konačna diferencija prvog reda definirana sa

$$\Delta y_k = f(x_k + h) - f(x_k) = y_{k+1} - y_k.$$

Konačna diferencija drugog reda je

$$\Delta^2 y_k = \Delta(\Delta y_k) = \Delta y_{k+1} - \Delta y_k = y_k - 2y_{k+1} + y_{k+2}.$$

Općenito je

$$\Delta^n y_k = \Delta(\Delta^{n-1} y_k) = \Delta^{n-1} y_{k+1} - \Delta^{n-1} y_k.$$

Vrijedi da je

$$\Delta^n y_k = h^n f^{(n)}(\xi),\ \ \xi \in (x_k, x_{k+n})\,,$$

što se lako dokaže indukcijom uz upotrebu teorema srednje vrijednosti. Pomoću gornje formule može se procijeniti vrijednost $n-$te derivacije (ako je h dovoljno malen). No, naš glavni cilj ovdje su podijeljene diferencije.

Po definiciji stavljamo da je podijeljena diferencija nultog reda $f(x_i)$, dakle vrijednost funkcije f u točki $x_i \in \{x_{0,}x_1, ..., x_n\}$. Podijeljene diferencije prvog reda definiraju se sa

$$f\left[x_i; x_j\right] = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}.$$

Podijeljene diferencije drugog reda definirane su sa

$$f\left[x_i; x_j; x_k\right] = \frac{f\left[x_j; x_k\right] - f\left[x_i; x_j\right]}{x_k - x_i}.$$

Općenito, podijeljena diferencija $n-$tog reda definirana je sa

$$f\left[x_0; x_1; ...; x_n\right] = \frac{f\left[x_1; ...; x_n\right] - f\left[x_0; ...; x_{n-1}\right]}{x_n - x_0}.$$

Lema 5 *Za podijeljenu diferenciju $n-$tog reda vrijedi*

$$f\left[x_0; x_1; ...; x_n\right] = \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)\cdots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\cdots(x_j - x_n)}.$$

Dokaz. Prvo primijetimo da se može pisati

$$(x_j - x_0)\cdots(x_j - x_{i-1})(x_j - x_{i+1})\cdots(x_j - x_n) = \prod_{i \neq j}(x_j - x_i).$$

Sam dokaz provest ćemo po indukciji. Za $n = 0$ gornja jednakost postaje $f(x_0) = f(x_0)$. Za $n = 1$ imamo da je

$$f\left[x_0; x_1\right] = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0},$$

a to vrijedi po definiciji podijeljene diferencije prvog reda.

Pretpostavimo da smo gornju jednakost iz leme dokazali za $n \leq m$. Tada vrijedi

$$\begin{aligned} & f\left[x_0; x_1; ...; x_{m+1}\right] \\ = & \frac{f\left[x_1; ...; x_{m+1}\right] - f\left[x_0; ...; x_m\right]}{x_{m+1} - x_0} \\ = & \frac{1}{x_{m+1} - x_0}\left[\sum_{j=1}^{m+1} \frac{f(x_j)}{p} - \sum_{j=0}^{m} \frac{f(x_j)}{q}\right], \end{aligned}$$

gdje su

$$p = \prod_{i \neq j (1 \leq i \leq m+1)} (x_j - x_i), \quad q = \prod_{i \neq j (0 \leq i \leq m)} (x_j - x_i).$$

Mi sada želimo pokazati da su koeficijenti uz $f(x_j)$ upravo jednaki koeficijentima u jednakosti iz leme. Za $j = 0$ ili $j = m + 1$ ti koeficijenti (uz $f(x_j)$) imaju očekivani oblik

$$\frac{1}{\prod\limits_{i \neq j (0 \leq i \leq m+1)} (x_j - x_i)},$$

jer u relaciji poviše (unutar uglatih zagrada) dolazi samo jedan član koji ima upravo ovaj oblik.

Za $j \neq 0$ ili $j \neq m + 1$ koeficijent uz $f(x_j)$ u desnom članu gornje relacije jednak je

$$\begin{aligned} & \frac{1}{x_{m+1} - x_0}\left[\frac{1}{\prod\limits_{i \neq j (1 \leq i \leq m+1)} (x_j - x_i)} - \frac{1}{\prod\limits_{i \neq j (0 \leq i \leq m)} (x_j - x_i)}\right] \\ = & \frac{x_j - x_0 - x_j + x_{m+1}}{(x_{m+1} - x_0) \prod\limits_{i \neq j (0 \leq i \leq m+1)} (x_j - x_i)} = \frac{1}{\prod\limits_{i \neq j (0 \leq i \leq m+1)} (x_j - x_i)}, \end{aligned}$$

a to je ono što smo trebali dobiti. Time je dokaz gotov. ■

Primijetimo da su podijeljene diferencije simetrične funkcije svojih argumenata. Osim toga, pokažimo kako se one praktično mogu računati. U tu svrhu, formirajmo tabelu:

$$
\begin{array}{lllll}
f(x_0) & & & & \\
 & f[x_0;x_1] & & & \\
f(x_1) & & f[x_0;x_1;x_2] & & \\
 & f[x_1;x_2] & & \cdots & \\
f(x_2) & & & & \\
\vdots & & & & f[x_0;x_1;...;x_n] \\
 & & & & \\
f(x_n) & & & &
\end{array}
$$

U ovoj tabeli prvo se računa prvi stupac, pa drugi stupac itd.

Na kraju recimo da vrijedi

$$f[x_0;...;x_n] = \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n},$$

uz oznake uvedene na početku. Gornja relacija daje vezu konačnih i podijeljenih diferencija. Zato je

$$f[x_0;...;x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}.$$

1.6 Newtonov interpolacijski polinom

Koristeći rezultate iz prethodne podsekcije sada ćemo naći zapis interpolacijskog polinoma u Newtonovom obliku. Iz Lagrangeova oblika interpolacijskog polinoma nalazimo da je

$$f(x) - L_n(x) = f(x) - \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{i \neq j} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Gornja relacija može se zapisati kao

$$
\begin{aligned}
& f(x) - L_n(x) \\
= \; & \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) \left[\frac{f(x)}{\prod\limits_{i=0}^{n}(x - x_i)} + \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{(x_i - x) \prod\limits_{i \neq j}(x_i - x_j)} \right].
\end{aligned}
$$

Iz zadnje relacije i leme 5 tada slijedi

$$\begin{aligned}
&\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\left[\frac{f(x)}{\prod\limits_{i=0}^{n}(x-x_i)}+\sum_{i=0}^{n}\frac{f(x_i)}{(x_i-x)\prod\limits_{i\neq j}(x_i-x_j)}\right] \qquad (18)\\
=\;& \omega_n(x)f\left[x;x_0;x_1;...;x_n\right],
\end{aligned}$$

pa je

$$f(x)=L_n(x)+\omega_n(x)f\left[x;x_0;x_1;...;x_n\right]. \qquad (19)$$

Uočimo sada da se Lagrangeov interpolacijski polinom može zapisati u obliku

$$L_n(x)=L_0(x)+(L_1(x)-L_0(x))+\cdots+(L_n(x)-L_{n-1}(x)), \qquad (20)$$

gdje je $L_0(x)=f(x_0)$. Razlike $L_k(x)-L_{k-1}(x)$ su takodjer polinomi koji imaju stupanj k i oni se poništavaju u točkama $x_0,x_1,...,x_{k-1}$, jer vrijedi

$$L_k(x_j)=L_{k-1}(x_j)=f(x_j),$$

za $j=0,1,2,...,k-1$. Zato te polinome možemo zapisati kao

$$L_k(x)-L_{k-1}(x)=C_{k-1}\omega_{k-1}(x),$$

gdje je $\omega_{k-1}(x)=(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})$. Ako sada uvrstimo $x=x_k$ dobivamo

$$f(x_k)-L_{k-1}(x_k)=C_{k-1}\omega_{k-1}(x).$$

Ako stavimo $n=k-1$ i $x=x_k$ tada iz (18) dobivamo

$$f(x_k)-L_{k-1}(x_k)=\omega_{k-1}(x_k)f\left[x_k;x_0;x_1;...;x_{k-1}\right].$$

Iz gornje dvije relacije nalazimo da je

$$C_{k-1}=f\left[x_0;x_1;...;x_k\right],$$

jer je podijeljena diferencija simetrična funkcija svojih argumenata. Tada je

$$L_k(x)-L_{k-1}(x)=f\left[x_0;x_1;...;x_k\right]\omega_{k-1}(x).$$

Ako ovo zadnje sada uvrstimo u (20) dobivamo zapis interpolacijskog polinoma u Newtonovom obliku

$$L_n(x)=f(x_0)+f\left[x_0;x_1\right](x-x_0)+\cdots+f\left[x_0;...;x_n\right](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}).$$

Sada nije teško pokazati da je

$$f\left[x; x_0; ...; x_n\right] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

gdje je $\xi \in (x_0, x_n)$ - vidite (19) i podsekciju o grešci interpolacije.

Postoji više poznatih načina kako se može izračunati vrijednost interpolacijskog polinoma. Ovdje ćemo, ilustracije radi, uzeti Aitkenovu shemu.

Aitkenova shema.

Uvodimo oznaku $L_{(k,k+1,...,m)}(x)$ za interpolacijski polinom sa interpolacijskim čvorovima $x_k, x_{k+1}, ..., x_m$. Specijalno stavljamo $L_{(k)}(x) = f(x_k)$. Tada vrijedi

$$L_{(k,k+1,...,m+1)}(x) = \frac{L_{(k+1,...,m+1)}(x)(x - x_k) - L_{(k,k+1,...,m)}(x)(x - x_{m+1})}{x_{m+1} - x_k}. \tag{21}$$

Ovo nije posebno teško dokazati, jer je član na desnoj strani u (21) polinom stupnja $m-k+1$, a podudara se sa $f(x)$ u točkama $x_k, ..., x_{m+1}$. Lagrangeov ili Newtonov interpolacijski polinom $L_n(x) = L_{(0,1,...,n)}(x)$ računa se sada iz sljedeće tabele:

$$\begin{array}{lllll}
L_{(0)}(x) & & & & \\
 & L_{(0,1)}(x) & & & \\
L_{(1)}(x) & & L_{(0,1,2)}(x) & & \\
 & L_{(1,2)}(x) & & \cdots & \\
L_{(2)}(x) & & & & \\
\vdots & & & & L_{(0,1,...,n)}(x) \\
 & & & & \\
L_{(n)}(x) & & & &
\end{array}$$

uz pomoć formule (21). (Računa se prvo prvi stupac, pa drugi stupac itd.)

Neka je sada $x_k = x_0 + kh$, $h > 0$, $k = 0, 1, ..., n$, $y_k = f(x_k)$. Neka je $q = \frac{x-x_0}{h}$. Uzmemo li sada u obzir vezu konačnih i podijeljenih diferencija, Newtonov interpolacijski polinom može se zapisati u obliku

$$\begin{aligned}
L_n(x) &= L_n(x_0 + qh) \\
&= y_0 + q\frac{\Delta y_0}{1!} + q(q-1)\frac{\Delta^2 y_0}{2!} + \cdots + \\
&\quad q(q-1)\cdots(q-n+1)\frac{\Delta^n y_0}{n!}.
\end{aligned}$$

Ovaj polinom zove se Newtonovim interpolacijskim polinomom za interpolaciju unaprijed.

Na kraju, kako je interpolacijski polinom jedinstven to znači da su Lagrangeov i Newtonov interpolacijski polinom u stvari jednaki. Zato nećemo posebno proučavati grešku za Newtonov interpolacijski polinom, jer je ona ista kao i za Lagrangeov interpolacijski polinom.

1.7 Numerička derivacija

U mnogim matematičkim problemima potrebno je aproksimirati derivaciju fukcije $f(x)$ u nekoj točki x_0. Npr., kod rješavanja običnih diferencijalnih jednadžbi (za pisanje diferencijskih shema), itd.

Po definiciji je

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Neka su točke x_0, x_1 dovoljno blizu tako da je $h = x_1 - x_0$ dovoljno malo. Tada je

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}.$$

To je jedan od načina da se aproksimira derivacija. Mi ćemo ovdje naći nekoliko različitih formula za aproksimaciju derivacije. Pri tom ćemo koristiti Taylorovu formulu i Lagrangeove interpolacijske polinome. Prvo ćemo uvesti sljedeće oznake

$$y_i = f(x_i),\ y_i' = f'(x_i),\ y_i'' = f''(x_i),\ h = x_{i+1} - x_i,$$

za $i = 0, 1, 2, ...$

1.7.1 Formule dobivene iz Taylorove formule

Iz Taylorove formule prvog reda,

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x - x_0)^2$$

u točki $x = x_1$ dobivamo

$$y_1 = y_0 + y_0' h + \frac{1}{2} f''(\xi(x_1)) h^2,$$

odnosno

$$y_0' = \frac{y_1 - y_0}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi))h.$$

Greška u gornjoj formuli za približno odredjivanje derivacije je reda $O(h)$. (Funkcija $O(h)$ ima svojstvo da $O(h) \to 0$ kada $h \to 0$.)

Promotrimo sada Taylorovu formulu drugog reda (oko točke x_i),

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i)(x - x_i)^2 + \frac{1}{6}f'''(\xi(x))(x - x_i)^3.$$

Uvrstimo li u ovu formulu $x = x_{i+1}$ i $x = x_{i-1}$ ($x_{i+1} = x_i + h$, $x_{i-1} = x_i - h$) dobivamo

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}f'''(\xi(x_{i+1}))h^3$$

i

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi(x_{i-1}))h^3.$$

Izračunajmo sada razliku $f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})$,

$$y_{i+1} - y_{i-1} = 2hy_i' + \frac{1}{6}\left[f'''(\xi(x_{i+1})) + f'''(\xi(x_{i-1}))\right]h^3$$

odnosno

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - \frac{1}{6}f'''(\eta)h^2,$$

jer je

$$\frac{f'''(\xi(x_{i+1})) + f'''(\xi(x_{i-1}))}{2} = f'''(\eta).$$

Primijetimo da je u gornjoj formuli za približno odredjivanje derivacije greška reda $O(h^2)$.

Naći ćemo sada izraz za približno odredjivanje druge derivacije. U tu svrhu napišimo Taylorovu formulu trećeg reda

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i))(x - x_i)^2 + \frac{1}{6}f'''(x_i)(x - x_i)^3 \\ &\quad + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi(x))(x - x_i)^4. \end{aligned}$$

Uvrstimo sada $x = x_{i+1}$ i $x = x_{i-1}$ u gornju formulu,

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi(x_{i+1}))h^4,$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i))h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi(x_{i-1}))h^4.$$

Zbrojimo sada dvije gornje formule

$$y_{i+1} + y_{i-1} = 2y_i + y_i''h^2 + \frac{1}{24}\left[f^{(4)}(\xi(x_{i+1})) + f^{(4)}(\xi(x_{i-1}))\right]h^4.$$

Iz ove formule, uz

$$\frac{f^{(4)}(\xi(x_{i+1})) + f^{(4)}(\xi(x_{i-1}))}{2} = f^{(4)}(\eta)$$

dobivamo

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta).$$

Greška u ovoj formuli ima red $O(h^2)$.

1.7.2 Formule dobivene iz interpolacijskih polinoma

Kao što znamo Lagrangeov interpolacijski polinom

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}y_1$$

ima grešku (ostatak)

$$E_1(x) = \frac{1}{2}f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)$$

tako da je

$$f(x) = L_1(x) + E_1(x).$$

Tada je

$$f'(x) = L_1'(x) + E_1'(x).$$

Lako se nadje da je

$$L_1'(x) = \frac{y_1 - y_0}{h}.$$

(Prisjetimo se $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$, $h = x_1 - x_0$.) Osim toga,

$$\begin{aligned} E_1'(x) &= \frac{1}{2}\frac{df''(\xi(x))}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}(x - x_0)(x - x_1) \\ &\quad + \frac{f''(\xi(x))}{2}(2x - x_0 - x_1). \end{aligned}$$

O prvom članu ne znamo ništa, medjutim njega možemo eliminirati ako uvrstimo $x = x_0$ ili $x = x_1$. Zato je

$$f'(x_0) = \frac{y_1 - y_0}{h} + \frac{f''(\xi(x_0))}{2}(x_0 - x_1),$$

odnosno

$$y_0' = \frac{y_1 - y_0}{h} - \frac{f''(\xi_1)}{2}h.$$

Slično dobivamo

$$y_1' = \frac{y_1 - y_0}{h} + \frac{f''(\xi_2)}{2}h.$$

Promotrimo sada Lagrangeov interpolacijski polinom

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}y_1 \\ &\quad + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}y_2 \\ &= p_{0,2}(x)y_0 + p_{1,2}(x)y_1 + p_{2,2}(x)y_2. \end{aligned}$$

Tada je

$$f(x) = L_2(x) + E_2(x),$$

gdje je

$$E_2(x) = \frac{f'''(\xi(x))}{6}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

pa je

$$f'(x) = L_2'(x) + E_2'(x).$$

Imamo da je

$$\begin{aligned} p_{0,2}'(x) &= \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2}, \\ p_{1,2}'(x) &= -\frac{2x - x_0 - x_2}{h^2}, \\ p_{2,2}'(x) &= \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2}. \end{aligned}$$

Tada je

$$f'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2}y_0 - \frac{2x - x_0 - x_2}{h^2}y_1 + \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2}y_2 + E_2'(x).$$

Derivaciju greške $E_2'(x)$ računamo samo u čvornim točkama zbog ranije navedenih razloga, pa dobivamo

$$\begin{aligned} E_2'(x_0) &= \frac{f'''(\xi(x))}{6}\frac{d}{dx}\left[(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\right]_{x=x_0} \\ &= \frac{f'''(\xi(x_0))}{6}(x_0-x_1)(x_0-x_2) \\ &= \frac{h^2}{3}f'''(\xi). \end{aligned}$$

S druge strane je

$$f'(x_0) = \frac{2x_0-x_1-x_2}{2h^2}y_0 - \frac{2x_0-x_0-x_2}{h^2}y_1 + \frac{2x_0-x_0-x_1}{2h^2}y_2 + E_2'(x_0).$$

Tada je

$$y_0' = \frac{3(y_1-y_0)-(y_2-y_1)}{2h} + \frac{h^2}{3}f'''(\xi).$$

Na potpuno analogan način dobivamo

$$y_1' = \frac{y_2-y_0}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

i

$$y_2' = \frac{3(y_2-y_1)-(y_1-y_0)}{2h} + \frac{h^2}{3}f'''(\xi).$$

U svim promatranim slučajevima ξ je neodredjena veličina, koja je različita za svaki pojedini slučaj.

Gornja razmatranja možemo poopćiti na način da stavimo

$$f^{(m)}(x) = L_n^{(m)}(x) + E_n^{(m)}(x),$$

gdje je $m \leq n$. Tako možemo naći formule za drugu, treću itd. derivacije. Kao ilustarciju takvih formula navest ćemo, bez dokaza, formule za drugu derivaciju u čvornim točkama. Imamo da je za $m = 2$, $n = 3$,

$$\begin{aligned} y_0'' &= \frac{1}{h^2}(2y_0-5y_1+4y_2-y_3) + \frac{11}{12}h^2 f^{(4)}(\xi), \\ y_1'' &= \frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2) - \frac{1}{12}h^2 f^{(4)}(\xi), \\ y_2'' &= \frac{1}{h^2}(y_1-2y_2+y_3) - \frac{1}{12}h^2 f^{(4)}(\xi), \end{aligned}$$

$$y_3'' = \frac{1}{h^2}(-y_0 + 4y_1 - 5y_2 + 2y_3) + \frac{11}{12}h^2 f^{(4)}(\xi).$$

U gornjim formulama ξ je nepoznata veličina iz intervala (x_0, x_3). Ostatke u tim formulama možemo naći koristeći Taylorovu formulu. Prirodno, pretpostavljamo da funkcija $y = f(x)$ ima neprekidnu četvrtu derivaciju, jer su ostaci izraženi pomoću te derivacije.

Općenito vrijedi da ako povećavamo n, uz odgovarajuću glatkoću funkcije, preciznost formula se povećava, a ako povećavamo m onda preciznost formula opada. Ako znamo u kojoj točki ćemo tražiti približnu vrijednost derivacije onda je čvorove najbolje birati simetrično oko te točke.

1.8 Splajnovi

Još jednu mogućnost aproksimacije funkcije na nekom segmentu $[a, b]$ pružaju nam tzv. splajn funkcije ili jednostavno splajnovi (engleski: spline).

Neka je segment $[a, b]$ podijeljen na n podsegmenata $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, 2, ..., n-1$, tako da je $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$.

Definicija 6 *Funkcija $S_{n,m}(x)$ naziva se splajnom stupnja n i defekta m ($0 \leq m \leq n+1$) s čvorovima na mreži $\{x_0, x_1, ..., x_n\}$ ako vrijedi:*

(i) na svakom podsegmentu $[x_i, x_{i+1}]$ funkcija $S_{n,m}(x)$ je polinom stupnja n,

(ii) $S_{n,m}(x) \in C^{n-m}[a, b]$.

U gornjoj definiciji $C^{-1}[a, b]$ je skup funkcija koje su po dijelovima neprekidne s točkama prekida prvog reda, dok je $C^k[a, b]$, $k \geq 0$, standardan skup k-puta neprekidno diferencijabilnih funkcija.

1.8.1 Splajn prvog stupnja

Neka je sada $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, $h = (b - a)/n$. Definiramo funkcije

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}(x - x_{k-1}), & x \in [x_{k-1}, x_k] \\ -\frac{1}{h}(x - x_{k+1}), & x \in [x_k, x_{k+1}] \\ 0, & x \notin [x_{k-1}, x_{k+1}] \end{cases}$$

za $k = 1, 2, ..., n-1$. Primijetimo da funkcije $\varphi_k(x)$ imaju svojstvo

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

Neka je sada zadana funkcija $f : [a, b] \to R$. Promotrimo funkciju

$$\Psi(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \varphi_i(x),$$

gdje je $y_i = f(x_i)$, a funkcije φ_0 i φ_n su zadane sa

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}(x - x_0), & x \in [x_0, x_1] \\ 0, & x \notin [x_0, x_1] \end{cases}$$

i

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} -\frac{1}{h}(x - x_n), & x \in [x_{n-1}, x_n] \\ 0, & x \notin [x_{n-1}, x_n] \end{cases}.$$

Očigledno je $\Psi(x)$ neprekidna funkcija i vrijedi $\Psi(x_k) = y_k$. Zapravo, $\Psi(x)$ je interpolacijski splajn prvog stupnja $S_{1,1}(x)$.

Mi se ovdje nećemo zadržavati dalje na splajnovima prvog stupnja, jer su za primjene mnogo važniji splajnovi trećeg stupnja o kojima ćemo sada nešto više reći.

1.8.2 Kubični splajn

Neka je mreža $\{x_0, x_1, ..., x_n\}$ definirana kao u prethodnom primjeru. Promatrat ćemo splajn trećeg stupnja. Takav splajn označavat ćemo sa $S_3(x)$. Veličine $m_i = S_3'(x_i)$ nazivaju se inklanacijama splajna u čvorovima x_i. Ovdje nećemo izvoditi formulu za taj splajn, već ćemo ga odmah zapisati

$$\begin{aligned} S_3(x) &= \\ &\frac{(x_{i+1} - x)^2 \left[2(x - x_i) + h\right]}{h^3} y_i + \frac{(x - x_i)^2 \left[2(x_{i+1} - x) + h\right]}{h^3} y_{i+1} \\ &+ \frac{(x_{i+1} - x)^2 (x - x_i)}{h^2} m_i + \frac{(x - x_i)^2 (x - x_{i+1})}{h^2} m_{i+1}. \end{aligned} \tag{22}$$

Provjerimo sada da vrijedi

$$S_3(x_i) = y_i,\ S_3(x_{i+1}) = y_{i+1},\ S_3'(x_i) = m_i,\ S_3'(x_{i+1}) = m_{i+1}. \tag{23}$$

Imamo da je

$$S_3(x_i) = \frac{(x_{i+1} - x_i)^2 \left[2(x_i - x_i) + h\right]}{h^3} y_i + 0 + 0 = y_i,$$

jer je $h = x_{i+1} - x_i$, a takodjer vrijedi

$$S_3(x_{i+1}) = 0 + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2 \left[2(x_{i+1} - x_{i+1}) + h\right]}{h^3} y_{i+1} + 0 = y_{i+1}.$$

Sada nalazimo derivaciju

$$\begin{aligned}
& S_3'(x) \\
= \; & \frac{y_i}{h^3} \left\{-2(x_{i+1} - x)\left[2(x - x_i) + h\right] + 2(x_{i+1} - x)^2\right\} \\
& + \frac{y_{i+1}}{h^3} \left\{2(x - x_i)\left[2(x_{i+1} - x) + h\right] - 2(x_i - x)^2\right\} \\
& + \frac{m_i}{h^2} \left[-2(x_{i+1} - x)(x - x_i) + (x_{i+1} - x)^2\right] \\
& + \frac{m_{i+1}}{h^2} \left[2(x - x_i)(x - x_{i+1}) + (x_i - x)^2\right].
\end{aligned}$$

Ako sada uvrstimo $x = x_i$ u gornju relaciju lako nalazimo da je $S_3'(x_i) = m_i$, a ako uvrstimo $x = x_{i+1}$ nalazimo da je $S_3'(x_{i+1}) = m_{i+1}$.

Iako nismo izvodili formulu za kubični splajn reći ćemo ipak kako se do nje dolazi. Naime, definiramo opći polinom trećeg stupnja $p(x) = \alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta$ i neodredjene koeficijente $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ odredimo tako da budu zadovoljeni uvjeti (23). Kada odredimo te koeficijente tada naš polinom $p(x)$ postaje $S_3(x)$. (Takav postupak zahtjeva mnogo pisanja i zato smo ga izostavili.)

Da bismo odredili kubični splajn na čitavom segmentu $[a, b]$ moramo specificirati njegove vrijednosti y_i u čvorovima x_i, $i = 0, 1, 2, ..., n$, jednako kao i njegove inklanacije m_i, $i = 0, 1, 2, ..., n$. Kubični splajn koji poprima iste vrijednosti y_i u čvorovima x_i kao i funkcija f $(y_i = f(x_i))$ naziva se interpolacijskim kubičnim splajnom. Postoji više načina da se odrede inklanacije u kubičnom interpolacijskom splajnu.

Prvi način je "simplificiranje". Stavljamo

$$m_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \; i = 1, 2, ..., n-1,$$

$$m_0 = \frac{4y_1 - y_2 - 3y_0}{2h}, \; m_n = \frac{3y_n + y_{n-2} - 4y_{n-1}}{2h}.$$

Drugi način dolazi u obzir ako znamo vrijednosti derivacije funkcije f u čvorovima x_i, $y_i' = f'(x_i)$. Tada stavljamo

$$m_i = y_i', \; i = 0, 1, 2, ..., n.$$

Gornja dva načina još se nazivaju lokalnim metodama odredjivanja inklanacija. $S_3'(x)$ onda je neprekidna funkcija u čvorovima x_i, ali $S_3''(x)$ ne mora biti neprekidna. Zato je defekt takvog splajna obično jednak dva.

Treći način je globalan način odredjivanja inklanacija. Označimo sa $S_3''(x_i+0)$ vrijednost od $S_3''(x)$ u čvoru x_i zdesna i sa $S_3''(x_i-0)$ vrijednost od $S_3''(x)$ u čvoru x_i slijeva. Tada nalazimo da je

$$S_3''(x_i+0) = -\frac{4m_i}{h} - \frac{2m_{i+1}}{h} + 6\frac{y_{i+1}-y_i}{h^2},$$

a to se nalazi tako da uvrstimo $x = x_i$ u drugu derivaciju od (22). Ako sada napišemo (22) za $i \to i-1$ i to dvaput deriviramo te uvrstimo $x = x_i$ onda dobivamo

$$S_3''(x_i-0) = \frac{2m_{i-1}}{h} + \frac{4m_i}{h} - 6\frac{y_i-y_{i-1}}{h^2}.$$

Sada zahtjevamo da $S_3''(x)$ bude neprekidna u čvoru x_i

$$S_3''(x_i+0) = S_3''(x_i-0),\ i = 1,2,...,n-1.$$

Iz gornje relacije i prethodnih dviju relacija dobivamo sustav linearnih jednadžbi

$$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = 3\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{h},\ \ i = 1,2,...,n-1. \tag{24}$$

Ovaj sustav ima $n-1$ jednadžbu i $n+1$ nepoznanicu m_i. Zato moramo zadati još dvije jednadžbe koje se dobivaju iz tzv. rubnih uvjeta. Postoji nekoliko načina da se zadaju ti rubni uvjeti. Ovdje ćemo detaljnije obraditi sljedeća tri.

(i) Ako je poznato $y_0' = f'(a)$ i $y_n' = f'(b)$ tada stavljamo

$$m_0 = y_0', \quad m_n = y_n'.$$

(ii) Stavljamo

$$m_0 = \frac{1}{6h}\left(-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3\right),$$

$$m_n = \frac{1}{6h}\left(11y_n - 18y_{n-1} + 9y_{n-2} - 2y_{n-3}\right).$$

(iii) Ako znamo vrijednosti od $f''(x)$ u rubnim točkama a i b, $y_0'' = f''(a)$, $y_n'' = f''(b)$, tada iz uvjeta $S_3''(a) = y_0''$ i $S_3''(b) = y_n''$ dobivamo

$$m_0 = -\frac{m_1}{2} + \frac{3}{2}\frac{y_1-y_0}{h} - \frac{h}{4}y_0'',$$

$$m_n = -\frac{m_{n-1}}{2} + \frac{3}{2}\frac{y_n - y_{n-1}}{h} + \frac{h}{4}y_n''.$$

Gornji uvjeti (i)–(iii) mogu se kombinirati. Ako sada na sustav (24) dodamo rubne uvjete (i) ili (ii) ili (iii) ili neku njihovu kombinaciju onda dobiveni sustav ima jedinstveno rješenje.

Na kraju ove podsekcije, bez dokaza, dat ćemo ocjenu za grešku kod aproksimacije funkcije interpolacijskim kubičnim splajnom.

Teorem 7 *Ako je $f \in C^{k+1}[a,b]$, $0 \leq k \leq 3$, tada interpolacijski splajn $S_3(x)$ sa inklanacijama zadanim na drugi ili treći poviše opisan način zadovoljava nejednakost*

$$\max_{x\in[x_i,x_{i+1}]} \left| f^{(m)}(x) - S_3^{(m)}(x) \right| \leq C h^{k+1-m} \max_{x\in[a,b]} \left| f^{(k+1)}(x) \right|,$$

gdje je $i = 0,1,2,...,n-1$, $m = 0,1,...,k$ i C je konstanta koja ne ovisi o h, i, f.

Napomena 8 *Splajnovi se često koriste za aproksimiranje funkcije na velikim intervalima, gdje mogu dati bolje rezultate nego li interpolacijski polinomi.*

1.9 Polinom najmanjih kvadrata

Vidjeli smo da ako imamo $(n+1)$-nu točku $T_i(x_i, y_i)$ onda možemo kroz te točke postaviti jedan jedini interpolacijski polinom, tj. polinom za kojeg će biti $L_n(x_i) = y_i$, $i = 0,1,2,...,n$. Medjutim, u praksi se često javlja problem nalaženja polinoma zadanog stupnja m koji bi najbolje aproksimirao neku funkciju f za koju znamo vrijednosti $y_i = f(x_i)$ u n točaka, gdje je sada n, često puta, mnogo veći od m. Takvu aproksimaciju očigledno ne možemo ostvariti pomoću interpolacijskog polinoma, jer općenito nije moguće postići da bude zadovoljen zahtjev $L_m(x_i) = y_i$, $i = 0,1,2,...,n$. Ilustracije radi uzmimo da imamo zadano 5 točaka sa grafa neke neodredjene funkcije f za koju iz prakse znamo da je nelinearna i da moramo naći polinom prvog stupnja (pravac) koji će najbolje aprosimirati tu funkciju. Očigledno je da ne možemo povući pravac na kojem bi sve te točke ležale. Kako onda odrediti taj pravac, a da on daje približno najbolju aproksimaciju te funkcije? Jedan od mogućih odgovora na ovo pitanje daje nam metoda najmanjih kvadrata. Mi sada nećemo težiti tome da bude zadovoljen zahtjev $L_m(x_i) = y_i$, $i = 0,1,2,...,n$, nego ćemo ići za tim da aproksimacija bude što bolja.

Opišimo tu metodu najmanjih kvadrata za gore postavljen problem. Pretpostavimo da imamo $(n+1)$-nu točku $(x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)$, $y_i = f(x_i)$. Želimo naći polinom

$$P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k x^k$$

tako da suma kvadrata odstupanja $P_m(x_i) - y_i$ bude minimalna. To znači da moramo riješiti problem minimizacije

$$\Psi(a_0, ..., a_n) = \sum_{i=0}^{n} [P_m(x_i) - y_i]^2 \to \min .$$

Primijetimo da su nepoznanice koje trebamo odrediti koeficijenti polinoma $P_m(x)$. Odredjivanjem tih koeficijenata odredit ćemo i sam polinom. Kao što znamo nužan uvjet ekstrema jeste da se sve prve parcijalne derivacije funkcije Ψ poništavaju. Kako je

$$\frac{\partial P_m(x_i)}{\partial a_k} = x_i^k$$

to je

$$\frac{\partial \Psi}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=0}^{n} [P_m(x_i) - y_i]\, x_i^k, \;\; k = 0, 1, 2, ..., m.$$

Izjednačavanjem ovoga sa nulom dobivamo sustav jednadžbi

$$\sum_{i=0}^{n} [P_m(x_i) - y_i]\, x_i^k = 0, \; k = 0, 1, 2, ..., m,$$

koji se još može zapisati u obliku

$$\sum_{i=0}^{n} x_i^k P_m(x_i) = \sum_{i=0}^{n} x_i^k y_i, \; k = 0, 1, 2, ..., m.$$

Ako uvedemo vektorske oznake

$$a = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}, \qquad y = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

i matricu

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^m \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{bmatrix}$$

tada se gornji sustav može zapisati u obliku

$$A^T A a = A^T y.$$

Kako je $A^T A$ pozitivno definitna matrica to taj sustav ima jedinstveno rješenje. Takodjer, ako je $m = n$ onda je dobiveni polinom najmanjih kvadrata jednak interpolacijskom polinomu.

Poviše opisan postupak možemo poopćiti. Neka su $\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_m$ zadane funkcije iz prostora kvadratno integrabilnih funkcija $L_2(a, b)$. Tada funkciju

$$\Phi_m(x) = \sum_{k=0}^{m} c_k \varphi_k(x)$$

nazivamo generaliziranim polinomom. Neka je $f \in L_2(a, b)$. Tada možemo promatrati problem

$$d(f, \Phi_m) \to \min,$$

gdje je d metrika u prostoru $L_2(a, b)$, tj.

$$d(f, g) = \left[\int_a^b (f(x) - g(x))^2 \, dx \right]^{1/2}.$$

Pretpostavimo dodatno da su funkcije $\varphi_k(x)$, $k = 0, 1, 2, ..., m$, linearno nezavisne. Tada gornji problem ima jedinstveno rješenje. Imamo da je

$$d(f, \Phi_m)^2 = \langle f - \Phi_m, f - \Phi_m \rangle,$$

gdje je $\langle \cdot, \cdot \rangle$ skalarni produkt u $L_2(a, b)$,

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

Očigledno je minimum od $d(f, \Phi_m)$ jednak minimumu od $d(f, \Phi_m)^2$. Sada izračunamo

$$d(f, \Phi_m)^2 = \langle f, f \rangle + \sum_{j,k=0}^{m} c_j c_k \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle - 2 \sum_{j=0}^{m} c_j \langle f, \varphi_j \rangle.$$

Minimum gornje funkcije dobiva se izjednačavanjem parcijalnih derivacija te funkcije sa nulom. Dobivamo sustav

$$\sum_{k=0}^{m} c_k \left\langle \varphi_k, \varphi_j \right\rangle = \left\langle f, \varphi_j \right\rangle, \; j = 0, 1, 2, ..., m.$$

Determinanta ovog sustava je Gramova determinanta sustava linearno nezavisnih funkcija pa je različita od nule. To znači da sustav ima jedinstveno rješenje. Što se tiče izbora funkcija $\varphi_k(x)$, najbolje je te funkcije birati iz neke ortogonalne familije, npr. takvu familiju čine Legendreovi polinomi na $[-1, 1]$.

2 Numerička integracija

Potreba za približnim odredjivanjem vrijednosti odredjenih integrala pojavila se onda kada se pokazalo da ima veoma mnogo funkcija za koje ne možemo odrediti primitivne funkcije (neodredjene integrale) na elementaran (analitički) način pa ne možemo za njih koristiti Newton-Leibnizovu formulu. Npr., jedan takav integral, koji ima veoma veliku važnost za teoriju vjerojatnosti, je $\int_0^x e^{-\frac{t^2}{2}}dt$. Ovaj integral ne možemo analitički izračunati. Slična je situacija sa tzv. Fresnelovim integralima $\int_0^x \sin t^2 dt$ i $\int_0^x \cos t^2 dt$, koji se javljaju u rješenjima jedne diferencijalne jednadžbe.

Pojam numeričke integracije odnosi se dakle na približno odredjivanje vrijednosti jednostrukih i višestrukih integrala. Ovdje ćemo se isključivo baviti jednostrukim integralima. Najvažniji pojam koji se pak tu javlja jeste pojam kvadraturne formule sa ili bez ostatka. (Kod višestrukih integrala to je pojam kubaturne formule). Kvadraturna formula ima oblik

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + R(f), \tag{25}$$

gdje su $w_i \geq 0$ tzv. težinski koeficijenti, a čvorove x_i obično biramo iz segmenta integracije $[a,b]$, $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$, dok je $R(f)$ ostatak (greška) u toj formuli. U praksi uzimamo

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i), \tag{26}$$

uz prirodnu pretpostavku da je $R(f)$ dovoljno malo.

Kažemo da je kvadraturna formula egzaktna za polinome $p(x)$ stupnja $\leq m$ ako je u formuli (25) ostatak $R(p) = 0$, tj. vrijedi

$$\int_a^b p(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i p(x_i)$$

za sve polinome stupnja $\leq m$. Broj m izražava preciznost te formule.

Mi ćemo ovdje detaljnije obraditi neke Newton-Cotesove i Gaussove kvadraturne formule, uz napomenu da tih formula ima mnogo više i da se one mogu naći u literaturi na karaju ove skripte.

2.1 Newton-Cotesove formule

Od Newton-Cotesovih formula uzet ćemo pravilo središnje točke (formula otvorenog tipa) te trapezno i Simpsonovo pravilo (formule zatvorenog tipa). U daljnjem ćemo, jednostavnosti radi prepostaviti da je zadana funkcija $f : R \to R$ pozitivna i neprekidna na segmentu integracije.

2.1.1 Pravilo središnje točke

Ako je f pozitivna i neprekidna funkcija na segmentu $[x_0, x_1]$ tada nam $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$ daje površinu P krivolinijskog trapeza koji je omedjen sa $[x_0, x_1]$ odozdo, sa grafom funkcije $f(x)$ odozgo i sa pravcima $x = x_0$, $x = x_1$ sa strane. Uočimo sada središnju točku segmenta $[x_0, x_1]$, tj. točku $x_s = (x_0 + x_1)/2$ i pravokutnik kojem je donja baza segment $[x_0, x_1]$, gornja baza se nalazi na pravcu $y = f(x_s)$, a sa strane je ograničen pravcima $x = x_0$, $x = x_1$. Površina tog pravokutnika je $Q = (x_1 - x_0)f(x_s)$. Ako je $h = x_1 - x_0$ maleno tada možemo očekivati da je $P \approx Q$, tj. da krivolinijski trapez i taj pravokutnik imaju približno iste površine. Kako je $P = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$ to možemo staviti

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx hf(x_s),$$

odnosno

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = hf(x_s) + R_0(f),$$

gdje je $R_0(f)$ ostatak (greška) u toj formuli. Gornje formule nose naziv pravila središnje točke (bez i sa ostatkom). Iz geometrijskih, poviše opisanih razloga, pravilo središnje točke još se naziva i pravilom pravokutnika. Ovo pravilo egzaktno je za polinome stupnja ≤ 1, što nije teško provjeriti (dovoljno je uvrstiti $f(x) = 1$ i $f(x) = x$ u gornju formulu i uvjeriti se da je onda $R_0(f) = 0$).

Konačno, ako uradimo zamjene $x_0 \to x_i$, $x_1 \to x_{i+1}$, $x_s \to (x_i + x_{i+1})/2$, $h = x_{i+1} - x_i$ u gornjoj formuli dobivamo pravilo središnje točke na segmentu $[x_i, x_{i+1}]$,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = hf(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + R_i(f). \tag{27}$$

2.1.2 Trapezno pravilo

Prisjetimo se da Lagrangeov interpolacijski polinom $L_1(x)$ ima oblik

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1,$$

gdje je $y_0 = f(x_0)$ i $y_1 = f(x_1)$. Graf gornje funkcije je pravac koji prolazi kroz točke $T_0(x_0, f(x_0))$ i $T_1(x_1, f(x_1))$. Sam polinom daje izvjesnu aproksimaciju funkcije $f(x)$ na segmentu $[x_0, x_1]$. Što je $h = x_1 - x_0$ manje to je ta aproksimacija bolja. Zato možemo pisati

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx. \tag{28}$$

Izračunajmo sada

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx &= \frac{h}{2}, \\ \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx &= \frac{h}{2}. \end{aligned}$$

Ako to uvrstimo u (28) dobivamo

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h$$

ili

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h + R_0(f).$$

Gornje dvije formule su trapezna pravila (bez i sa ostatkom). Objasnimo sada naziv "trapezno pravilo". Kad smo proučavali pravilo središnje točke tada smo vidjeli da je $P = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$ površina krivolinijskog trapeza opisanog ranije. Tu površinu zamijenili smo površinom odgovarajućeg pravokutnika. U ovdje promatranom slučaju tu površinu zamjenjujemo površinom pravog trapeza omedjenog odozdo sa $[x_0, x_1]$, odozgo sa dužinom T_0T_1 i pravcima $x = x_0$, $x = x_1$ sa strane. Površina tog trapeza upravo je jednaka $\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2} h$. Trapezno pravilo takodjer je egzaktno za polinome stupnja ≤ 1. Napišimo ga sada za segment $[x_i, x_{i+1}]$ (vidite kako je to uradjeno za pravilo središnje točke),

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h + R_i(f), \tag{29}$$

gdje je sada $h = x_{i+1} - x_i$.

2.1.3 Simpsonovo pravilo

Sada ćemo podintegralnu funkciju zamijeniti parabolom na segmentu $[x_0, x_2]$, odnosno Lagrangeovim interpolacijskim polinomom $L_2(x)$,

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1 \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2, \end{aligned}$$

gdje je $y_i = f(x_i)$, $i = 0,1,2$, $x_0 < x_1 < x_2$, $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$, tj. $x_1 = (x_0 + x_2)/2$. Kao u prethodnom primjeru, ako je h dovoljno malo, vrijedi

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_2} L_2(x)dx. \tag{30}$$

Sada računamo

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx &= \frac{h}{3}, \\ \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx &= 4\frac{h}{3}, \\ \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx &= \frac{h}{3}. \end{aligned}$$

Ako to uvrstimo u (30) dobivamo

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

odnosno

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] + R_0(f).$$

Poviše imamo Simpsonova pravila (bez i sa ostatkom). Ovo pravilo egzaktno je za polinome stupnja ≤ 3. U to se možemo uvjeriti tako da biramo $f \in \{1, x, x^2, x^3\}$ i vidimo da je za takve f ostatak $R_0(f) = 0$. Na segmentu $[x_i, x_{i+1}]$ to pravilo dobit ćemo supstitucijom $x_0 \to x_i$, $x_2 \to x_{i+1}$, $x_1 \to (x_i + x_{i+1})/2$, $h \to h = x_{i+1} - x_i$ (pa je $h \to h/2$),

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + R_i(f). \tag{31}$$

2.1.4 Opća shema

Iz prethodnih razmatranja vidljivo je kako se navedeni postupci mogu poopćiti. Naime, ako je $L_n(x)$ Lagrangeov interpolacijski polinom onda možemo staviti

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

gdje je $R_n(f)$ greška aproksimacije. (O grešci aproksimacije reći ćemo nešto više u daljnjem.) Kako je

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

gdje su $p_i(x)$ definirani sa (9), a $y_i = f(x_i)$, za neke čvorove x_i, $i = 0, 1, ..., n$, to je

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

gdje su w_i odredjeni sa

$$w_i = \int_a^b p_i(x)dx, \;\; i = 0, 1, ..., n.$$

Sada možemo uzeti Lagrangeove polinome $L_3(x)$, $L_4(x), ...$ pa ćemo dobiti odgovarajuće Newton-Cotesove formule. Te formule ovdje ne promatramo, jer se pokazalo da veći red formule ne mora značiti i veću preciznost; naš cilj je dobivanje tzv. kompozitnih formula.

2.2 Ostatak i ocjena greške kvadraturnih formula

2.2.1 Peanov teorem o jezgri

Kavadraturne formule mogu se definirati i općenitije nego smo to mi uradili ranije. Npr., kvadraturna formula može imati sljedeći oblik

$$Q(f) = \sum_{k=0}^{m_0} a_{k0} f(x_{k0}) + \sum_{k=0}^{m_1} a_{k1} f'(x_{k1}) + \cdots + \sum_{k=0}^{m_n} a_{kn} f^{(n)}(x_{kn}).$$

Neka je $I(f) = \int_a^b f(x)dx$. Tada je greška gornje kvadraturne formule

$$R(f) = I(f) - Q(f).$$

R je linearan operator, naime vrijedi

$$\begin{aligned} R(f+g) &= R(f)+R(g), \\ R(\lambda f) &= \lambda R(f). \end{aligned}$$

Uvest ćemo još oznaku P_n za skup svih polinoma stupnja $\leq n$.

Teorem 9 *Neka je $R(p)=0$ za sve polinome $p \in P_n$ i neka je $f \in C^{n+1}(a,b)$. Tada se ostatak $R(f)$ može reprezentirati kao*

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

gdje je K Peanova jezgra definirana sa

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

uz

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

a indeks "x" označava da je x varijabla od R.

Dokaz. Taylorova formula sa ostatkom u integralnom obliku je

$$f(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k+\frac{1}{n!}\int_a^x f^{(n+1)}(t)(x-t)^n dt,$$

gdje je $x=a$ točka oko koje se vrši razvoj. Koristeći tu formulu ostatak možemo zapisati u obliku

$$\begin{aligned} R(f(x)) &= \sum_{k=0}^{n} R\left(\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k\right)+R\left(\frac{1}{n!}\int_a^x f^{(n+1)}(t)(x-t)^n dt\right) \\ &= \frac{1}{n!}R\left(\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt\right), \end{aligned}$$

jer je R linearan operator i $R\left(\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k\right)=0$, $k=0,1,...,n$, jer su $\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$, $k=0,1,...,n$, polinomi stupnja $\leq n$. Iz gornje relacije vidimo da ćemo dokaz dobiti odmah ako dokažemo da operatori R i $\int$ mogu zamijeniti mjesta. Po definiciji ostatka imamo da je

$$\begin{aligned}
& R\left(\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt\right) \\
= \quad & \int_a^b \int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt dx \\
& -\left(\sum_{k=0}^{m_0} a_{k0} \int_a^b f^{(n+1)}(t)(x_{k0}-t)_+^n dt + \cdots\right. \\
& \left. + \sum_{k=0}^{m_n} a_{kn} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^b f^{(n+1)}(t)(x_{kn}-t)_+^n dt\right).
\end{aligned}$$

Takodjer je

$$\begin{aligned}
& \int_a^b R_x\left(f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n\right) dt \\
= \quad & \int_a^b \int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt dx \\
& -\int_a^b f^{(n+1)}(t)\left(\sum_{k=0}^{m_0} a_{k0}(x_{k0}-t)_+^n + \cdots + \sum_{k=0}^{m_n} a_{kn} \frac{d^n}{dx^n}(x_{kn}-t)_+^n\right) dt.
\end{aligned}$$

Iz gornjeg je onda vidljivo da je dovoljno dokazati da je

$$\frac{d^k}{dx^k} \int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt = \int_a^b \left(f^{(n+1)}(t) \frac{d^k}{dx^k}(x-t)_+^n\right) dt,$$

za $k = 0, 1, ..., n$. Slučaj $k = 0$ je očigledan. Kako je funkcija $(x-t)_+^n$ $(n-1)-$puta neprekidno diferencijabilna to integral i derivacija komutiraju pa gornja relacija vrijedi za sve $k < n$. Preostaje provjeriti slučaj $k = n$. Imamo da je

$$\begin{aligned}
&\frac{d^n}{dx^n}\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt \\
= \; & \frac{d}{dx}\left(\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+^n dt\right) \\
= \; & \frac{d}{dx}\left(n!\int_a^b f^{(n+1)}(t)(x-t)_+ dt\right) \\
= \; & \frac{d}{dx}\left(n!\int_a^x f^{(n+1)}(t)(x-t) dt\right) \\
= \; & \frac{d}{dx}\left(n!x\int_a^b f^{(n+1)}(t)dt - \int_a^x f^{(n+1)}(t)tdt\right) \\
= \; & n!\left(\int_a^x f^{(n+1)}(t)dt + xf^{(n+1)}(x) - f^{(n+1)}(x)x\right) \\
= \; & n!\int_a^x f^{(n+1)}(t)dt \\
= \; & \int_a^b \left(f^{(n+1)}(t)\frac{d^n}{dx^n}(x-t)_+^n\right) dt.
\end{aligned}$$

■

Računanje Peanovih jezgri u konkretnim primjerima zna biti dosta složeno i teško. Zato ćemo u onome što sljedi dati već izračunate Peanove jezgre za ranije promatrana kvadraturna pravila. Medjutim, da bismo ipak stekli neki uvid o tome kako se to radi, naći ćemo jednu Peanovu jezgru za najvažnije kvadraturno pravilo koje smo ovdje promatrali, a to je Simpsonovo pravilo, ali samo na konkretnom segmentu $[-1, 1]$.

2.2.2 Greška za pravilo središnje točke

Ovdje prvo pretpostavljamo da je $f \in C^2(x_0, x_1)$. Peanova jezgra za pravilo središnje točke ima oblik

$$K_2(x) = \begin{cases} \frac{(x-x_0)^2}{2}, & x \in \left[x_0, \frac{x_0+x_1}{2}\right] \\ \frac{(x-x_1)^2}{2}, & x \in \left[\frac{x_0+x_1}{2}, x_1\right] \end{cases}$$

pa je

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = f(\frac{x_0+x_1}{2})h + \int_{x_0}^{x_1} K_2(x)f''(x)dx,$$

gdje je $h = x_1 - x_0$, a ostatak je onda

$$R_0(f) = \int_{x_0}^{x_1} K_2(x) f''(x) dx.$$

Kako je očigledno $K_2(x) \geq 0$ to po teoremu srednje vrijednosti imamo da je

$$\int_{x_0}^{x_1} K_2(x) f''(x) dx = f''(\xi) \int_{x_0}^{x_1} K_2(x) dx = \frac{h^3}{24} f''(\xi),$$

gdje je $\xi \in (x_0, x_1)$ neodredjena točka, pa je

$$R_0(f) = \frac{h^3}{24} f''(\xi),$$

odnosno

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = f(\frac{x_0 + x_1}{2}) h + \frac{h^3}{24} f''(\xi). \tag{32}$$

Ako je $M_2 = \max_{x \in [x_0, x_1]} |f''(x)|$ tada vrijedi ocjena za grešku u ovom pravilu

$$|R_0(f)| \leq \frac{h^3}{24} M_2.$$

Osim gornje jezgre imamo još i Peanovu jezgru

$$K_1(x) = \begin{cases} -(x - x_0), & x \in \left[x_0, \frac{x_0 + x_1}{2}\right] \\ -(x - x_1), & x \in \left[\frac{x_0 + x_1}{2}, x_1\right] \end{cases}$$

tako da je

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = f(\frac{x_0 + x_1}{2}) h + \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx.$$

Ocijenit ćemo grešku (ostatak)

$$R_0(f) = \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx.$$

Nije teško provjeriti da je

$$\int_{x_0}^{x_1} K_1(x) dx = 0$$

pa ostatak, u ovom slučaju, možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} R_0(f) &= \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx - C \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) dx \\ &= \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) \left[f'(x) - C \right] dx, \end{aligned}$$

gdje je C neka konstanta. Ako je $f \in C^1(x_0, x_1)$ i $\gamma \le f'(x) \le \Gamma$, za $x \in [x_0, x_1]$, tada biramo $C = (\gamma + \Gamma)/2$ pa je ocjena greške

$$\begin{aligned} |R_0(f)| &= \left| \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) \left[f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right] dx \right| \\ &\le \max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \int_{x_0}^{x_1} |K_1(x)| \, dx \\ &\le \frac{\Gamma - \gamma}{8} h^2, \end{aligned}$$

jer je

$$\max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \le \frac{\Gamma - \gamma}{2}$$

i

$$\int_{x_0}^{x_1} |K_1(x)| \, dx = \frac{h^2}{4}.$$

2.2.3 Greška za trapezno pravilo

Ovdje takodjer prvo pretpostavljamo da je $f \in C^2(x_0, x_1)$. Peanova jezgra za trapezno pravilo ima oblik

$$K_2(x) = \frac{1}{2}(x - \frac{x_0 + x_1}{2})^2 - \frac{h^2}{8},$$

gdje je $h = x_1 - x_0$, pa je

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h + \int_{x_0}^{x_1} K_2(x) f''(x) dx,$$

a ostatak je onda

$$R_0(f) = \int_{x_0}^{x_1} K_2(x) f''(x) dx.$$

Kako je očigledno $K_2(x) \leq 0$ to po teoremu srednje vrijednosti imamo da je

$$\int_{x_0}^{x_1} K_2(x) f''(x) dx = f''(\xi) \int_{x_0}^{x_1} K_2(x) dx = -\frac{h^3}{12} f''(\xi),$$

gdje je $\xi \in (x_0, x_1)$ neodredjena točka, pa je

$$R_0(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi),$$

odnosno

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h - \frac{h^3}{12} f''(\xi). \tag{33}$$

Ako je $M_2 = \max_{x \in [x_0, x_1]} |f''(x)|$ tada vrijedi ocjena za grešku u ovom pravilu

$$|R_0(f)| \leq \frac{h^3}{12} M_2.$$

Osim gornje jezgre imamo još i Peanovu jezgru

$$K_1(x) = -\left(x - \frac{x_0 + x_1}{2} \right)$$

tako da je

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h + \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx.$$

Ocijenjujemo sada ostatak (grešku)

$$R_0(f) = \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx.$$

Nije teško provjeriti da je

$$\int_{x_0}^{x_1} K_1(x) dx = 0$$

pa ostatak, u ovom slučaju, možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} R_0(f) &= \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) f'(x) dx - C \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) dx \\ &= \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) \left[f'(x) - C \right] dx, \end{aligned}$$

gdje je C neka konstanta. Ako je $f \in C^1(x_0, x_1)$ i $\gamma \leq f'(x) \leq \Gamma$, za $x \in [x_0, x_1]$, tada biramo $C = (\gamma + \Gamma)/2$ pa je ocjena greške

$$\begin{aligned} |R_0(f)| &= \left| \int_{x_0}^{x_1} K_1(x) \left[f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right] dx \right| \\ &\leq \max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \int_{x_0}^{x_1} |K_1(x)|\, dx \\ &\leq \frac{\Gamma - \gamma}{8} h^2, \end{aligned}$$

jer je

$$\max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \leq \frac{\Gamma - \gamma}{2}$$

i

$$\int_{x_0}^{x_1} |K_1(x)|\, dx = \frac{h^2}{4}.$$

2.2.4 Greška za Simpsonovo pravilo

Ovdje ćemo, polazeći od Peanovog teorema o jezgri, izvesti izraz za odgovarajuću Peanovu jezgru za Simpsonovo pravilo. Ograničit ćemo se na segment $[-1, 1]$. Imamo da je

$$\begin{aligned} R(f) &= I(f) - S(f) \\ &= \int_{-1}^{1} f(x) dx - \frac{1}{3} [f(-1) + 4f(0) + f(1)] \\ &= \int_{-1}^{1} f^{(4)}(t) K(t) dt, \end{aligned}$$

jer Simpsonova formula ima preciznost 3 (egzaktna je za polinome trećeg stupnja).

Sada računamo

$$
\begin{aligned}
& -6K(t) \\
= \; & R_x\left[(x-t)_+^3\right] \\
= \; & \int_{-1}^{1}(x-t)_+^3\,dx-\frac{1}{3}\left[(-1-t)_+^3+4(0-t)_+^3+(1-t)_+^3\right] \\
= \; & \int_{t}^{1}(x-t)^3\,dx-\frac{1}{3}\left[0-4(-t)_+^3+(1-t)^3\right] \\
= \; & \frac{1}{4}(1-t)^4-\frac{1}{3}\left[0-4(-t)_+^3+(1-t)^3\right] \\
= \; & \left\{\begin{array}{ll} \frac{1}{12}(1-t)^3(1+3t), & 0\le t\le 1 \\ \frac{1}{12}(1+t)^3(1-3t), & -1\le t\le 0 \end{array}\right.
\end{aligned}
$$

Ovo je nepozitivna funkcija. Onda po teoremu srednje vrijednosti postoji točka ξ takva da je

$$R(f)=f^{(4)}(\xi)\int_{-1}^{1}K(t)dt.$$

Izračunamo

$$\int_{-1}^{1}K(t)dt=-\frac{1}{90}$$

tako da je

$$R(f)=-\frac{1}{90}f^{(4)}(\xi).$$

Postoji više Peanovih jezgri za Simpsonovo pravilo. Mi ćemo ih ovdje navesti, bez izvodjenja, za segment $[x_i,x_{i+1}]$. Imamo

$$K_1(t)=\left\{\begin{array}{ll} t-\frac{5x_i+x_{i+1}}{6}, & t\in\left[x_i,\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right] \\ t-\frac{x_i+5x_{i+1}}{6}, & t\in\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2},x_{i+1}\right] \end{array}\right.$$

$$K_2(t)=\left\{\begin{array}{ll} \frac{1}{2!}(t-x_i)\left(t-\frac{2x_i+x_{i+1}}{3}\right), & t\in\left[x_i,\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right] \\ \frac{1}{2!}(t-x_{i+1})\left(t-\frac{x_i+2x_{i+1}}{3}\right), & t\in\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2},x_{i+1}\right] \end{array}\right.$$

$$K_3(t)=\left\{\begin{array}{ll} \frac{1}{3!}(t-x_i)^2\left(t-\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right), & t\in\left[x_i,\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right] \\ \frac{1}{3!}(t-x_{i+1})^2\left(t-\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right), & t\in\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2},x_{i+1}\right] \end{array}\right.$$

$$K_4(t)=\left\{\begin{array}{ll} \frac{1}{4!}(t-x_i)^3\left(t-\frac{x_i+2x_{i+1}}{3}\right), & t\in\left[x_i,\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right] \\ \frac{1}{4!}(t-x_{i+1})^3\left(t-\frac{2x_i+x_{i+1}}{3}\right), & t\in\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2},x_{i+1}\right] \end{array}\right.$$

(Predznak Peanovih jezgri K_1 i K_3 je zapravo minus.)

Sada pretpostavimo da je $f \in C^4(x_i, x_{i+1})$. Peanova jezgra $K_4(t)$ ima povišе zadani oblik pa je

$$\int_{xi}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x) f^{(4)}(x)dx,$$

gdje je $h = (x_{i+1} - x_i)/2$, a ostatak je

$$R_i(f) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x) f^{(4)}(x)dx.$$

Kako je $K_4(x) \leq 0$ to po teoremu srednje vrijednosti imamo da je

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x) f^{(4)}(x)dx = f^{(4)}(\xi) \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x)dx = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

gdje je $\xi \in (x_i, x_{i+1})$ neodredjena točka, pa je

$$R_i(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

odnosno

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi). \tag{34}$$

Ako je $M_4 = \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} \left| f^{(4)}(x) \right|$ tada vrijedi ocjena za grešku u ovom pravilu

$$|R_i(f)| \leq \frac{h^5}{90} M_4.$$

Promotrimo sada Peanovu jezgru

$$K_1(t) = \begin{cases} t - \frac{5x_i + x_{i+1}}{6}, & t \in \left[x_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right] \\ t - \frac{x_i + 5x_{i+1}}{6}, & t \in \left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, x_{i+1}\right] \end{cases}$$

tako da je

$$\int_{xi}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] - \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) f'(x)dx,$$

gdje smo sada uzeli da je $h = x_{i+1} - x_i$. Ocijenit ćemo ostatak (grešku)

$$R_i(f) = -\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) f'(x) dx.$$

Nije teško provjeriti da je

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) dx = 0$$

pa ostatak, u ovom slučaju, možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} R_i(f) &= -\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) f'(x) dx + C \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) dx \\ &= -\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) \left[f'(x) - C \right] dx, \end{aligned}$$

gdje je C neka konstanta. Ako je $f \in C^1(x_i, x_{i+1})$ i $\gamma \leq f'(x) \leq \Gamma$, za $x \in [x_i, x_{i+1}]$, tada biramo $C = (\gamma + \Gamma)/2$ pa je ocjena greške

$$\begin{aligned} |R_i(f)| &= \left| \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_1(x) \left[f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right] dx \right| \\ &\leq \max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K_1(x)| \, dx \\ &\leq 5 \frac{\Gamma - \gamma}{72} h^2, \end{aligned}$$

jer je

$$\max_{x \in [x_0, x_1]} \left| f'(x) - \frac{\gamma + \Gamma}{2} \right| \leq \frac{\Gamma - \gamma}{2}$$

i

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K_1(x)| \, dx = 5 \frac{h^2}{36}.$$

Napomena 10 *Uočimo da smo u gornjem korak h definirali na dva načina: $h = x_{i+1} - x_i$ i $h = (x_{i+1} - x_i)/2$. To daje različite težinske koeficijente u Simpsonovoj formuli. Istaknimo kako su oba načina definiranja koraka h prisutna u literaturi.*

Slična razmatranja možemo provesti sa Peanovim jezgrama $K_2(t)$ i $K_3(t)$. Ovdje ćemo dati samo gotove rezultate. Vrijede ocjene

$$\left| \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1}) \right] \right| \leq \frac{1}{162}(\Gamma_2 - \gamma_2)h^3,$$

gdje je po pretpostavci $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, za $x \in [x_i, x_{i+1}]$ i $h = x_{i+1} - x_i$, te

$$\left| \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1}) \right] \right| \leq \frac{\Gamma_3 - \gamma_3}{1152}h^4,$$

gdje je $\gamma_3 \leq f'''(x) \leq \Gamma_3$, za $x \in [x_i, x_{i+1}]$. Napomenimo samo da vrijedi

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_2(t)dt = \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_3(t)dt = 0,$$

pa je postupak izvodjenja gornjih formula potpuno analogan postupku koji smo opisali za jezgru $K_1(t)$.

2.3 Kompozitne kvadraturne formule

Sva kompozitna pravila, za kvadraturne formule Newton-Cotesovog tipa proučavane u prethodnom, formiraju se na isti način. Naime, segment integracije $[a, b]$ podijelimo na n jednakih podsegmenata $[x_i, x_{i+1}]$, gdje je $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, $h = (b - a)/n$. Sada na svakom podsegmentu primijenimo neko od ranije opisanih kvadraturnih pravila, a dobivene rezultate zbrojimo po i od 0 do $n-1$. Tako dobivamo neku od kompozitnih formula. U daljnjem trebat ćemo sljedeću lemu.

Lema 11 *Neka je $g : [a, b] \to R$ neprekidna funkcija i $x_1, ..., x_n \in [a, b]$. Tada postoji $\xi \in [a, b]$ tako da je*

$$\frac{g(x_1) + \cdots + g(x_n)}{n} = g(\xi).$$

Dokaz. Kako je g neprekidna funkcija na segmentu $[a, b]$ to ona na tom segmentu poprima svoj minimum c i svoj maksimum d, tj. $g : [a, b] \to [c, d]$. Segment $[c, d]$ je konveksan skup pa on sadrži svaku konveksnu kombinaciju svojih elemenata. Kako su $g(x_1), ..., g(x_n) \in [c, d]$ to je i $A = \frac{g(x_1)+\cdots+g(x_n)}{n} \in [c, d]$. Osim toga, kako je g neprekidna funkcija ona poprima svaku medjuvrijednost iz $[c, d]$, a to znači da postoji $\xi \in [a, b]$ takav da je $g(\xi) = A$. $\blacksquare$

2.3.1 Kompozitno pravilo središnje točke

Neka je $f \in C^2(a,b)$. Formula (27) koja nam daje pravilo središnje točke sa ostatkom sada se može zapisati kao

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2})h + \frac{h^3}{24} f''(\xi_i).$$

Ako ovu formulu sumiramo po i od 0 do $n-1$ dobivamo

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx &= \int_a^b f(x)dx \\ &= h\sum_{i=0}^{n-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + \frac{h^3}{24} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i).\end{aligned}$$

Po lemi 11 vrijedi

$$n\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = nf''(\xi),$$

gdje je $\xi \in (a,b)$. Takodjer je $h^3 = (b-a)^3/n^3$. Iz toga onda slijedi

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=0}^{n-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + \frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\xi).$$

Ovo je kompozitna kvadraturna formula za pravilo središnje točke sa ostatkom.

Ako je $f \in C^1(a,b)$ i $\gamma \le f'(x) \le \Gamma$, $x \in [a,b]$ tada je

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=0}^{n-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + R(f),$$

uz

$$R(f) = \sum_{i=0}^{n-1} R_i,$$

gdje je

$$|R_i| \le \frac{\Gamma - \gamma}{8} h^2.$$

Tada je ocjena greške

$$|R(f)| \le \frac{\Gamma - \gamma}{8n}(b-a)^2.$$

2.3.2 Kompozitno trapezno pravilo

Neka je $f \in C^2(a,b)$. Formulu (29) koja nam daje trapezno pravilo sa ostatkom možemo sada zapisati u obliku

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}h - \frac{h^3}{12}f''(\xi_i).$$

Ako ovu formulu sumiramo po i od 0 do $n-1$ dobivamo

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx &= \int_a^b f(x)dx \\ &= h\sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right] - \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i).\end{aligned}$$

Po lemi 11 vrijedi

$$n\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = nf''(\xi),$$

gdje je $\xi \in (a,b)$. Takodjer je $h^3 = (b-a)^3/n^3$. Iz toga onda slijedi

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right] - \frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi),$$

što se može zapisati kao

$$\int_a^b f(x)dx = h\left[\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right] - \frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi).$$

Ovo je kompozitna kvadraturna formula za trapezno pravilo sa ostatkom.

Ako je $f \in C^1(a,b)$ i $\gamma \le f'(x) \le \Gamma$, $x \in [a,b]$ tada je

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right] + R(f),$$

uz

$$R(f) = \sum_{i=0}^{n-1} R_i,$$

gdje je

$$|R_i| \leq \frac{\Gamma - \gamma}{8} h^2.$$

Tada je ocjena greške

$$|R(f)| \leq \frac{\Gamma - \gamma}{8n} (b-a)^2.$$

2.3.3 Kompozitno Simpsonovo pravilo

Neka je sada $f \in C^4(a,b)$ i $h = x_{i+1} - x_i$. Po (31),

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] - \frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\xi),$$

jer je h iz (34) upola manji od koraka h kako smo ga ovdje definirali.

Ako ovu formulu sumiramo po i od 0 do $n-1$ dobivamo

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx &= \int_a^b f(x)dx \\ &= \frac{h}{6} \sum_{i=0}^{n-1} \left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] - \frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i). \end{aligned}$$

Po lemi 11 vrijedi

$$n \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i) = n f^{(4)}(\xi),$$

gdje je $\xi \in (a,b)$. Takodjer je $h^5 = (b-a)^5/n^5$. Iz toga onda slijedi

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6} \sum_{i=0}^{n-1} \left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] - \frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\xi).$$

Ovo se može zapisati kao

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{6}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2})\right] \\ &\quad - \frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\xi). \end{aligned}$$

Ovo je kompozitna kvadraturna formula za Simpsonovo pravilo sa ostatkom.

Ako je $f \in C^1(a,b)$ i $\gamma \leq f'(x) \leq \Gamma$, $x \in [a,b]$ tada je

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6}\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + R(f),$$

uz

$$R(f) = \sum_{i=0}^{n-1} R_i,$$

gdje je

$$|R_i| \leq 5\frac{\Gamma - \gamma}{76}h^2.$$

Tada je ocjena greške

$$|R(f)| \leq 5\frac{\Gamma - \gamma}{76n}(b-a)^2.$$

2.3.4 Konvergencija kompozitnih formula

Neka je $a = \hat{x}_0 < \hat{x}_1 < \cdots < \hat{x}_k = b$ zadana particija segmenta $[a,b]$ takva da je $\hat{x}_j = a + j\frac{b-a}{k}$, $j = 0, 1, ..., k$. Označimo sa Q_n neku (elementarnu) $n-$točkovnu kvadraturnu formulu (npr. trapeznu ili Simpsonovu). Rezultirajuću kompozitnu formulu označimo sa P_{nk}. Neka su čvorovi i težinski koeficijenti formule Q_n zadani na nekom standardnom intervalu, npr. na $[-1,1]$. Tada je

$$Q_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \approx \int_{-1}^{1} f(x)dx,\ x_i \in [-1,1].$$

Na segmentu $[\hat{x}_{j-1}, \hat{x}_j]$ tada transformirana formula ima oblik

$$\int_{\hat{x}_{j-1}}^{\hat{x}_j} f(x)dx \approx \frac{b-a}{2k}\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_{ij})$$

gdje je

$$x_{ij} = \hat{x}_{j-1} + \frac{b-a}{2k}(1 + x_i)$$

za $i = 1, 2, ..., n$, $j = 1, 2, ..., k$.

Kompozitna formula na $[a,b]$ onda je

$$P_{nk}(f) = \sum_{j=1}^{k}\frac{b-a}{2k}\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_{ij}) = \frac{b-a}{2k}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_{ij}). \tag{35}$$

Teorem 12 *(o konvergenciji)*

Neka je Q_n $n-$točkovna kvadraturna formula sa stupnjom preciznosti $m \geq 0$. Tada za svaku Riemann-integrabilnu funkciju f vrijedi da

$$P_{nk} \to \int_a^b f(x)dx, \text{ kada } k \to \infty.$$

Dokaz. Ako u (35) promijenimo redoslijed sumacije dobivamo

$$\begin{aligned} P_{nk}(f) &= \frac{b-a}{2k}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_{ij}) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i \frac{b-a}{k}\sum_{j=1}^{k} f(x_{ij}). \end{aligned}$$

Za $k = 1, 2, ...$ te $i = 1, 2, ..., n$ suma

$$\frac{b-a}{k}\sum_{j=1}^{k} f(x_{ij}) \tag{36}$$

je Riemannova suma, jer $x_{ij} \in [\hat{x}_{j-1}, \hat{x}_j]$ i $\hat{x}_j - \hat{x}_{j-1} = \frac{b-a}{k}$, $j = 1, 2, ..., k$. Zato suma (36) konvergira ka integralu $\int_a^b f(x)dx$ kada $k \to \infty$.

S druge strane, kvadraturna formula je egzaktna za $f(x) = 1$ (jer ima preciznost ≥ 0), tj.

$$\frac{b-a}{2k}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{n} w_i = \int_a^b 1dx = b - a$$

pa je

$$\sum_{i=1}^{n} w_i = 2$$

što daje

$$\begin{aligned} \lim_{k\to\infty} P_{nk}(f) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i \lim_{k\to\infty}\frac{b-a}{k}\sum_{j=1}^{k} f(x_{ij}) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i \int_a^b f(x)dx = \int_a^b f(x)dx \end{aligned}$$

čime je konvergencija kompozitne formule dokazana. ■

Red konvergencije kompozitne kvadraturne formule dan je sljedećim teoremom, kojeg navodimo bez dokaza.

Teorem 13 *Neka je Q_n $n-$točkovna kvadraturna formula za koju su integrandi $f \in C^{p+1}(a,b)$, tako da je*

$$Q_n(f) - \int_a^b f(x)dx = C(b-a)^{p+1} f^{(p)}(\xi),\ \xi \in [a,b]\,,$$

gdje je C neka konstanta neovisna od a, b, f. Tada se greška kompozitne formule P_{nk},

$$E_{kn}(f) = P_{nk}(f) - \int_a^b f(x)dx,$$

može karakterizirati sa

$$\lim_{k\to\infty} k^p E_{kn}(f) = C(b-a)^p \left[f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a) \right],$$

tj. $E_{kn}(f) \to 0$ kada $k \to \infty$ barem sa redom p.

2.4 Euler-Maclaurinova sumaciona formula

2.4.1 Bernoullijevi polinomi

Bernoullijevi polinomi $B_n(x)$ obično se definiraju sa

$$\frac{te^{tx}}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x) \frac{t^n}{n!}, \tag{37}$$

medjutim postoji i alternativan način njihovog definiranja. Naime, ako definiramo $B_0(x) = 1$, $B_1(x) = x - 1/2$ tada sve ostale Bernoullijeve polinome možemo oderediti iz sljedećih relacija

$$\begin{aligned} B_n'(x) &= nB_{n-1}(x),\ n = 2,3,4,... \\ B_n(0) &= B_n(1) = 0,\ n = 3,5,7,9,.... \end{aligned}$$

Ako definiramo Bernoullijeve polinome na potonji način tada rubni problem

$$\begin{aligned} B_n''(x) &= n(n-1)B_{n-2}(x), \\ B_n(0) &= B_n(1) = 0,\ n = 3,5,7,9,.., \end{aligned}$$

ima kao rješenja sve neparno indeksirane Bernoullijeve polinome, dok jednadžba $B_n'(x) = nB_{n-1}(x)$ odredjuje parno indeksirane Bernoullijeve polinome. Ovdje ćemo navesti prvih nekoliko polinoma

$$\begin{aligned}
B_0(x) &= 1 \\
B_1(x) &= x - \frac{1}{2} \\
B_2(x) &= x^2 - x + \frac{1}{6} \\
B_3(x) &= x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x \\
B_4(x) &= x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}.
\end{aligned}$$

Bernoullijevi polinomi imaju čitav niz zanimljivih svojstava od kojih ovdje navodimo sljedeća svojstva

$$\int_0^1 B_n(x)dx = 0,\ n = 1, 2, ...$$

$$\int_0^1 B_n(x)B_m(x)dx = (-1)^{n-1}\frac{m!n!}{(m+n)!}B_{m+n},\ m, n = 1, 2, ...$$

$$B_n(x+1) - B_n(x) = nx^{n-1},\ \ n = 0, 1, ...$$

$$B_n(1-x) = (-1)^n B_n(x), n = 0, 1, ..$$

$$B_n(\frac{1}{2}) = -(1 - 2^{1-n})B_n,\ n = 0, 1, ...$$

Poviše smo koristili oznaku B_n za Bernoullijeve brojeve. Bernoullijevi brojevi definiraju se sa

$$B_n = B_n(0).$$

Imamo da je

$$\begin{aligned}
B_1 &= -\frac{1}{2},\ \ B_{2k+1} = 0,\ k = 1, 2, ... \\
B_0 &= 1,\ \ B_2 = \frac{1}{6},\ B_4 = -\frac{1}{30},\ B_6 = \frac{1}{42}, ...
\end{aligned}$$

Ako u relaciju (37) uvrstimo $x = 0$ dobivamo

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{t^n}{n!}.$$

Osim toga je

$$\begin{aligned} B_n(0) &= (-1)^n B_n(1) \\ B_{2n}(\frac{1}{3}) &= B_{2n}(\frac{2}{3}) = -2^{-1}(1-3^{1-2n})B_{2n}. \end{aligned}$$

2.4.2 Sumaciona formula

Kako su Bernoullijevi polinomi definirani na $[0,1]$ naša razmatranja ćemo ograničiti na taj segment. Uzastopnom primjenom parcijalne integracije dobivamo

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &= \int_0^1 f(x)B_0(x)dx = \int_0^1 f(x)B_1'(x)dx \\ &= \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] - \int_0^1 f'(x)B_1(x)dx \\ &= \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] - \frac{1}{2}\int_0^1 f'(x)B_2'(x)dx \\ &= \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] + \frac{B_2}{2}[f'(0)-f'(1)] + \frac{1}{2}\int_0^1 f''(x)B_2(x)dx. \end{aligned}$$

Sada je

$$\frac{1}{2}\int_0^1 f''(x)B_2(x)dx = \frac{1}{4!}\int_0^1 f''(x)B_4''(x)dx,$$

pa parcijalnom integracijom (dva puta uzastopno) dobivamo

$$\begin{aligned} &\int_0^1 f(x)dx \\ = &\ \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] + \frac{B_2}{2}[f'(0)-f'(1)] + \frac{B_4}{4!}[f'''(0)-f'''(1)] \\ &+\frac{1}{4!}\int_0^1 f^{(4)}(x)B_4(x)dx. \end{aligned}$$

Ako nastavimo na gornji način dobit ćemo sljedeći rezultat.

Teorem 14 *Neka je $f \in C^{2m}[0,1]$. Tada vrijedi*

$$\begin{aligned}
&\int_0^1 f(x)dx \\
= \; & \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right] \\
&+ \frac{1}{(2m)!}\int_0^1 f^{(2m)}(x)B_{2m}(x)dx.
\end{aligned}$$

Formalan dokaz ovog teorema može se uraditi indukcijom.

Želimo li dobiti reprezentaciju preko Peanove jezgre zamijenit ćemo m sa $m+1$ u gornjoj formuli, da bi dobili

$$\begin{aligned}
&\int_0^1 f(x)dx \\
= \; & \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right] + R_m,
\end{aligned}$$

gdje je

$$\begin{aligned}
R_m &= \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}\left[f^{(2m+1)}(0) - f^{(2m+1)}(1)\right] \\
&\quad + \frac{1}{(2m+2)!}\int_0^1 f^{(2m+2)}(x)B_{2m+2}(x)dx \\
&= \frac{1}{(2m+2)!}\int_0^1 f^{(2m+2)}(x)\left[B_{2m+2}(x) - B_{2m+2}\right]dx.
\end{aligned}$$

Gornja formula može se promatrati i kao korekcija trapeznog pravila u rubnim točkama. Kako Peanova jezgra ne mjenja predznak na $[0,1]$ može se dobiti sljedeći rezultat.

Teorem 15 *Neka je $f \in C^{2m+2}[0,1]$. Tada je*

$$\begin{aligned}
&\int_0^1 f(x)dx \\
= \; & \frac{1}{2}[f(0)+f(1)] + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right] + R_m,
\end{aligned}$$

gdje je

$$R_m = -\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi),$$

za neki $\xi \in (0,1)$.

Iz gornjih rezultata za kompozitno trapezno pravilo izlazi sljedeći rezultat.

Teorem 16 *Neka je* $f \in C^{2m+2}[a,b]$*. Tada je*

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right] \\ &\quad + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k}\left[f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)\right] + R_m, \end{aligned}$$

gdje je

$$R_m = -\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}(b-a)h^{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi),$$

za neki $\xi \in (a,b)$*, uz* $h = (b-a)/n$*,* $x_i = a + ih$*,* $i = 0, 1, ..., n-1$*.*

2.5 Korigirana kvadraturna pravila

Kad smo proučavali Euler-Maclaurinovu sumacionu formulu vidjeli smo kako se može korigirati trapezno kvadraturno pravilo u rubnim točkama segmenta integracije. Ovdje ćemo to uraditi za pravilo središnje točke, ali na drugi način. Po analogiji u odnosu na to kako ćemo tu korekciju ovdje uraditi, onda možemo korigirati i druga kvadraturna pravila. Dakle, osnovna namjera nam je opisati opći postupak korigiranja na pravilu središnje točke. U tu svrhu, umjesto Peanove jezgre

$$K_2(x) = \begin{cases} \frac{(x-x_0)^2}{2}, & x \in \left[x_0, \frac{x_0+x_1}{2}\right] \\ \frac{(x-x_1)^2}{2}, & x \in \left[\frac{x_0+x_1}{2}, x_1\right] \end{cases}$$

za pravilo središnje točke, uvodimo novu (korigiranu) Peanovu jezgru

$$p(x) = K_2(x) - \frac{1}{x_1 - x_0}\int_{x_0}^{x_1} K_2(t)dt.$$

Kako je

$$\int_{x_0}^{x_1} K_2(t)dt = \frac{(x_1 - x_0)^3}{24} = \frac{h^3}{24}$$

to imamo da je

$$p(x) = \begin{cases} \frac{(x-x_0)^2}{2} - \frac{h^2}{24}, & x \in \left[x_0, \frac{x_0+x_1}{2}\right] \\ \frac{(x-x_1)^2}{2} - \frac{h^2}{24}, & x \in \left[\frac{x_0+x_1}{2}, x_1\right] \end{cases}$$

gdje smo standardno uzeli $h = x_1 - x_0$. Parcijalnom integracijom dobivamo

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} p(x)f''(x)dx \\ = & \int_{x_0}^{\frac{x_0+x_1}{2}} \left[\frac{(x-x_0)^2}{2} - \frac{h^2}{24}\right] dx + \int_{\frac{x_0+x_1}{2}}^{x_1} \left[\frac{(x-x_1)^2}{2} - \frac{h^2}{24}\right] dx \\ = & \left[\frac{(x_1-x_0)^2}{8} - \frac{h^2}{24}\right] f'\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right) + f'(x_0)\frac{h^2}{24} \\ & -f'(x_1)\frac{h^2}{24} - \left[\frac{(x_1-x_0)^2}{8} - \frac{h^2}{24}\right] f'\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right) \\ & -\int_{x_0}^{x_1} K_1(x)f'(x)dx, \end{aligned}$$

gdje je

$$K_1(x) = \begin{cases} x - x_0, & x \in \left[x_0, \frac{x_0+x_1}{2}\right] \\ x - x_1, & x \in \left[\frac{x_0+x_1}{2}, x_1\right] \end{cases}$$

pa je

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} p(x)f''(x)dx \\ = & \frac{h^2}{24}\left[f'(x_0) - f'(x_1)\right] - \int_{x_0}^{x_1} K_1(x)f'(x)dx. \end{aligned}$$

Ponovnom parcijalnom integracijom dobivamo

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} K_1(x)f'(x)dx \\ = & \int_{x_0}^{\frac{x_0+x_1}{2}} (x-x_0)f'(x)dx + \int_{\frac{x_0+x_1}{2}}^{x_1} (x-x_1)f'(x)dx \\ = & f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)\frac{x_1-x_0}{2} - f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)\frac{x_0-x_1}{2} - \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx. \end{aligned}$$

Iz gornje dvije relacije imamo da je

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} p(x) f''(x) dx \\ = & \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx - hf\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right) - \frac{h^2}{24}\left[f'(x_1) - f'(x_0)\right]. \end{aligned}$$

Ovo je korigirano pravilo središnje točke sa ostatkom. Član $\frac{h^2}{24}\left[f'(x_1) - f'(x_0)\right]$ naziva se korekcija u pravilu središnje točke, a član

$$R(f) = \int_{x_0}^{x_1} p(x) f''(x) dx$$

je ostatak (greška) korigiranog pravila.

Naći ćemo sada ocjenu greške za ovo kvadraturno pravilo. Prvo primijetimo da vrijedi

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx \\ = & \int_{x_0}^{x_1} \left[K_2(x) - \frac{1}{x_1 - x_0}\int_{x_0}^{x_1} K_2(t) dt\right] dx = 0. \end{aligned}$$

Tada, ako je C bilo koja konstanta, ostatak $R(f)$ možemo zapisati u obliku

$$R(f) = \int_{x_0}^{x_1} p(x)\left[f''(x) - C\right] dx.$$

Ako sada pretpostavimo da je $f \in C^2(x_0, x_1)$ te da postoje konstante γ_2, Γ_2 takve da je $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, $x \in [x_0, x_1]$, onda možemo uzeti $C = \frac{\Gamma_2 + \gamma_2}{2}$ pa je

$$\begin{aligned} |R(f)| &= \left|\int_{x_0}^{x_1} p(x)\left[f''(x) - \frac{\Gamma_2+\gamma_2}{2}\right] dx\right| \\ &\leq \max_{x\in[x_0,x_1]}\left|f''(x) - \frac{\Gamma_2+\gamma_2}{2}\right| \int_{x_0}^{x_1} |p(x)|\, dx \\ &\leq \frac{\Gamma_2 - \gamma_2}{2}\int_{x_0}^{x_1} |p(x)|\, dx. \end{aligned}$$

Kako je

$$\int_{x_0}^{x_1} |p(x)|\, dx = \frac{h^3}{18\sqrt{3}}$$

to je

$$|R(f)| \leq \frac{\Gamma_2 - \gamma_2}{36\sqrt{3}} h^3.$$

Ako želimo dobiti tu formulu na segmentu $[x_i, x_{i+1}]$, $h = x_{i+1} - x_i$, tada po ranije opisanom postupku ($0 \to i$, $1 \to i+1$) dobivamo

$$\begin{aligned} & \int_{x_i}^{xi+1} p_i(x) f''(x) dx \\ = & \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx - hf\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) - \frac{h^2}{24}\left[f'(x_{i+1}) - f'(x_i)\right], \end{aligned}$$

gdje je sada $p_i(x)$ Peanova jezgra koja ima oblik

$$p_i(x) = \begin{cases} \frac{(x-x_i)^2}{2} - \frac{h^2}{24}, & x \in \left[x_i, \frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right] \\ \frac{(x-x_{i+1})^2}{2} - \frac{h^2}{24}, & x \in \left[\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, x_{i+1}\right] \end{cases}.$$

Za ostatak

$$R_i(f) = \int_{x_i}^{xi+1} p_i(x) f''(x) dx$$

takodjer vrijedi ocjena

$$|R_i(f)| \leq \frac{\Gamma_2 - \gamma_2}{36\sqrt{3}} h^3,$$

gdje je sada $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, $x \in [x_i, x_{i+1}]$. Sumirajući gornju formulu po i od 0 do $n-1$, uz $x_i = x_0 + ih$, $h = (b-a)/n$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, dobivamo odgovarajuću kompozitnu kvadraturnu formulu

$$\begin{aligned} & \int_a^b f(x) dx \\ = \; & h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + \frac{h^2}{24}\left[f'(b) - f'(a)\right] + R(f), \end{aligned}$$

jer je

$$\sum_{i=0}^{n-1} \left[f'(x_{i+1}) - f'(x_i)\right] = f'(b) - f'(a),$$

uz ocjenu ostatka

$$|R(f)| \leq \frac{\Gamma_2 - \gamma_2}{36\sqrt{3} n^2} (b-a)^3,$$

gdje je sada $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, $x \in [a, b]$.

Primijetimo sljedeće. Dok je pravilo središnje točke egzaktno za polinome stupnja ≤ 1, korigirano pravilo središnje točke je egzaktno za polinome stupnja ≤ 3. Osim toga, kompozitna kvadraturna formula za korigirano pravilo ima samo jedan član ($\frac{h^2}{24}[f'(b) - f'(a)]$) više u odnosu na kompozitnu formulu za originalno pravilo. Dakle, može se očekivati da će korigirano pravilo dati bolje rezultate od originalnog pravila.

2.6 Gaussove kvadraturne formule

2.6.1 Legendreovi polinomi

Neka je $L_2(a, b)$ prostor kvadratično integrabilnih funkcija, tj. funkcija za koje je

$$\int_a^b f(x)^2 dx < \infty.$$

U prostoru $L_2(a, b)$ možemo uvesti skalarni produkt po formuli

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

(Nije teško provjeriti da funkcija $\langle \cdot, \cdot \rangle$ zadovoljava sva svojstva skalarnog produkta.) U tom smislu kažemo da su dvije funkcije f i g medjusobno ortogonalne ako je

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) dx = 0.$$

Od posebnog interesa su familije ortogonalnih polinoma. Jednu takvu familiju čine Legendreovi polinomi $U_n(x)$ koji se definiraju na segmentu $[-1, 1]$ pomoću relacije

$$U_n(x) = \frac{1}{n!2^n} \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n \right].$$

Za njih vrijedi da je

$$\langle U_j, U_k \rangle = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ \frac{2}{2j+1}, & j = k, \end{cases} \tag{38}$$

tj. oni zaista tvore ortogonalnu familiju. Nije teško naći da je $U_0(x) = 1$ i $U_1(x) = x$, pa se preostali Legendreovi polinomi mogu izračunati iz sljedeće relacije

$$(n+1)U_{n+1}(x) - (2n+1)xU_n(x) + nU_{n-1}(x) = 0.$$

Npr., nalazimo da je $U_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$, $U_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-3x)$, itd. Za nas su ovdje važna sljedeća dva svojstva tih polinoma.

Lema 17 *Svaki Legendreov polinom stupnja n ortogonalan je na svim polinomima stupnja $< n$, tj. vrijedi*

$$\int_{-1}^{1} U_n(x)P_k(x)dx = 0, \tag{39}$$

za svaki polinom P_k stupnja $k < n$.

Dokaz. Dokaz slijedi iz činjenice da se svaki polinom stupnja k može prikazati pomoću Legendreovih polinoma stupnja $\leq k$,

$$P_k(x) = \alpha_0 U_0(x) + \cdots + \alpha_k U_k(x). \tag{40}$$

Ako sada uvrstimo (40) u lijevu stranu od (39) tada iz (38) slijedi da (39) vrijedi. ■

Lema 18 *Svi korijeni Legendreovih polinoma su jednostruki, relani i nalaze se u $(-1,1)$.*

Dokaz. Pretpostavimo da $U_n(x)$ ima $k < n$ različitih realnih korijena neparne kratnosti u $(-1,1)$. Označimo te korijene sa $x_1, ..., x_k$ i definirajmo polinom

$$P_k(x) = \begin{cases} (x-x_1)\cdots(x-x_k), & k > 0 \\ 1, & k = 0. \end{cases}$$

Tada polinom $P_k(x)U_n(x)$ ne mijenja predznak na $(-1,1)$ i nije identički jednak nuli. Zato je

$$\int_{-1}^{1} P_k(x)U_n(x)dx \neq 0,\ (k < n).$$

Ovo je u suprotnosti sa tvrdnjom leme 17. Zaključujemo da $U_n(x)$ ima točno n različitih realnih korijena. ■

2.6.2 Kanonske Gaussove formule

Do Gaussovih formula doći ćemo rješavajući sljedeći problem.

Problem 19 *Naći kvadraturnu formulu sa takvim težinskim koeficijentima* w_j *i takvim čvorovima* x_j, $j = 1, 2, ..., n$, *na segmentu* $[a, b]$ *da ona bude egzaktna za polinome maksimalnog stupnja, tj. da vrijedi*

$$\int_a^b P(x)dx = \sum_{k=1}^{n} w_k P(x_k). \tag{41}$$

gdje je $P(x)$ *polinom maksimalnog stupnja.*

Lema 20 *Stupanj polinoma iz problema 19 je manji od* $2n$.

Dokaz. Neka su $x_1, ..., x_n$ proizvoljni čvorovi iz $[a, b]$. Tada je polinom

$$P_{2n}(x) = (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 \geq 0$$

i nije identički jednak nuli pa je

$$\int_a^b P_{2n}(x)dx > 0. \tag{42}$$

S druge strane, za bilo koje težinske koeficijente w_k vrijedi

$$\sum_{k=1}^{n} w_k P_{2n}(x_k) = 0, \tag{43}$$

jer je $P_{2n}(x_k) = 0$, $k = 1, 2, ..., n$. Iz (42) i (43) vidimo da ne može nikada biti zadovoljeno (41). ■

Naša daljnja proučavanja ograničit ćemo, za sada, na segment $[a, b] = [-1, 1]$. Označimo sa $x_1, ..., x_n$ čvorove iz $[-1, 1]$. Neka su, za sada, oni proizvoljni. Označimo sa

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

Ovo su bazični interpolacijski polinomi za Lagrangeov interpolacijski polinom stupnja $n - 1$.

Lema 21 *Neka su težinski koeficijenti zadani sa*

$$w_i = \int_{-1}^{1} p_{n-1,i}(x)dx, \quad i = 1, 2, ..., n. \tag{44}$$

Tada je odgovarajuća kvadraturna formula egzaktna za polinome stupnja $n-1$.

Dokaz. Neka je $P_{n-1}(x)$ bilo koji polinom stupnja $n-1$. Tada je $L_{n-1}(x) = P_{n-1}(x)$, gdje je $L_{n-1}(x)$ Lagrangeov interpolacijski polinom stupnja $n-1$ za polinom $P_{n-1}(x)$. Vrijedi

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} P_{n-1}(x)dx &= \int_{-1}^{1} L_{n-1}(x)dx = \int_{-1}^{1} \left(\sum_{i=1}^{n} p_{n-1,i}(x) P_{n-1}(x_i) \right) dx \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left(\int_{-1}^{1} p_{n-1,i}(x)dx \right) P_{n-1}(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i P_{n-1}(x_i),\end{aligned}$$

jer vrijedi (44). Time je dokaz gotov. ■

Teorem 22 *Neka se težinski koeficijenti kvadraturne formule biraju po (44) i neka su čvorovi te formule korijeni Legendreovog polinoma $U_n(x)$. Tada je ta formula egzaktna za polinome stupnja $2n-1$.*

Dokaz. Neka je $P_{2n-1}(x)$ proizvoljan polinom stupnja $2n-1$. Ako taj polinom podijelimo sa Legendreovim polinomom $U_n(x)$ tada dobivamo

$$\frac{P_{2n-1}(x)}{U_n(x)} = W_{n-1}(x) + \frac{V_{n-1}(x)}{U_n(x)},$$

odnosno

$$P_{2n-1}(x) = W_{n-1}(x)U_n(x) + V_{n-1}(x),$$

gdje su $W_{n-1}(x)$, $V_{n-1}(x)$ polinomi stupnja $n-1$. Koristimo sada svojstvo ortogonalnosti Legendreovog polinoma $U_n(x)$ na svim polinomima stupnja $< n$, da bi dobili

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} P_{2n-1}(x)dx &= \int_{-1}^{1} W_{n-1}(x)U_n(x)dx + \int_{-1}^{1} V_{n-1}(x)dx \qquad (45) \\ &= \int_{-1}^{1} V_{n-1}(x)dx.\end{aligned}$$

Kako je $U_n(x_j) = 0$, $j = 1, 2, ..., n$, po uvjetu iz teorema, to je

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} w_j P_{2n-1}(x_j) &= \sum_{j=1}^{n} w_j W_{n-1}(x_j) U_n(x_j) + \sum_{j=1}^{n} w_j V_{n-1}(x_j) \\ &= \sum_{j=1}^{n} w_j V_{n-1}(x_j).\end{aligned} \tag{46}$$

Po lemi 21 kvadraturna formula

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} w_j f(x_j)$$

je egzaktna za polinome stupnja $n-1$ pa je

$$\int_{-1}^{1} V_{n-1}(x)dx = \sum_{j=1}^{n} w_j V_{n-1}(x_j).$$

Iz zadnje relacije i (45), (46) dobivamo

$$\int_{-1}^{1} P_{2n-1}(x)dx = \sum_{j=1}^{n} w_j P_{2n-1}(x_j)$$

što je trebalo dokazati. ■

Definicija 23 *Kvadraturna formula iz gornjeg teorema čiji su čvorovi korijeni Legendreovog polinoma $U_n(x)$, a težinski koeficijenti se biraju po (44) i koja je egzaktna za polinome stupnja $2n-1$, naziva se Gaussovom kvadraturnom formulom.*

Napomena 24 *Kako smo pokazali da rješenje problema 19 ne mogu biti polinomi stupnja $2n$, a da to jesu polinomi stupnja $2n-1$, time je taj problem riješen.*

Moguće je pokazati da su čvorovi Gaussove formule smješteni simetrično s obzirom na ishodište $x = 0$, a težinski koeficijenti u simetrično smještenim čvorovima su medjusobno jednaki. Ovdje ćemo dati čvorove x_j i težinske koeficijente w_j za $n = 2$ i $n = 3$.

Za $n = 2$ imamo

$$x_i = \pm\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad w_i = 1, \; i = 1, 2$$

Za $n = 3$ imamo

$$\begin{aligned} x_i &= \pm\frac{\sqrt{15}}{5}, \quad w_i = \frac{5}{9}, \; i = 1, 3, \\ x_2 &= 0, \quad w_2 = \frac{8}{9}. \end{aligned}$$

2.6.3 Gaussove formule na općem intervalu

Gaussove kvadraturne formule koje smo do sada promatrali na segmentu $[-1, 1]$ nazivat ćemo kanonskim formulama. Pomoću tih formula možemo konstruirati Gaussove kvadraturne formule na proizvoljnom segmentu $[a, b]$.

Uvedimo particiju segmenta $[a, b]$ na m jednakih djelova, tj. podsegmenata $[y_k, y_{k+1}]$, tako da je $y_k = a + kh$, $h = (b - a)/m$, $k = 0, 1, 2, ..., m - 1$, $y_m = b$. Na svakom od tih podsegmenata zadajmo čvorne točke

$$x_{kj} = \frac{y_k + y_{k+1}}{2} + x_j\frac{b - a}{2m}, \; j = 1, 2, ..., n,$$

gdje su x_j čvorovi Gaussove kanonske formule. (Ti čvorovi x_{kj} odgovaraju zapravo čvorovima Gaussove kanonske formule, ali na segmentu $[y_k, y_{k+1}]$. Ako uvrstimo $m = 1$, $a = -1$ $b = 1$ dobivamo čvor x_j, jer je $y_k = a = -1$ i $y_{k+1} = b = 1$.) Neka su w_j težinski koeficijenti Gaussove kanonske formule. Tada je

$$\int_{y_k}^{y_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{b - a}{2m}\sum_{j=1}^{n} w_j f(x_{kj})$$

i ova formula je egzaktna za polinome stupnja $2n - 1$. Ako tu formulu sumiramo po k od 0 do $m - 1$ dobivamo Gaussovu kompozitnu formulu

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b - a}{2m}\sum_{j=1}^{n} w_j \sum_{k=0}^{m-1} f(x_{kj})$$

i ova formula takodjer je egzaktna za polinome stupnja $2n - 1$.

Ovdje nećemo izvoditi formulu za ostatak u gornjoj kompozitnoj formuli, već ćemo odmah dati gotov rezultat za funkcije klase $C^{2n}(a, b)$,

$$R_n = \frac{(b-a)^{2n+1}}{m^{2n}} \frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3\,(2n+1)} f^{(2n)}(\xi),$$

gdje je ξ neodredjeno. Npr., ostatak u Gaussovoj kompozitnoj formuli za $n = 2$ je

$$R_2 = \frac{(b-a)^5}{4320m^4} f^{(4)}(\xi).$$

Ako to usporedimo sa Simpsonovom formulom vidimo da je ovaj ostatak manji. Inače, Gaussove formule koristimo najčešće onda kad je integrand funkcija visoke glatkosti, tj. postoji $f^{(k)}$, za neki dovoljno veliki k.

3 Nelinearne jednadžbe

Potreba za izučavanjem približnih metoda za odredjivanje rješenja nelinearne jednadžbe $f(x) = 0$ pojavila se odavno. Naime, pokazalo se da već kod algebarske jednadžbe

$$a_n x^n + \cdots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0$$

općenito ne možemo naći formulu za njezino rješavanje ako je njezin stupanj veći od četiri. Kažemo da jednadžba nije rješiva pomoću radikala. Npr., jednadžba

$$x^5 + 4x^2 - 2 = 0$$

nije rješiva pomoću radikala nad Q.

Glavna tematika ovog paragrafa bit će, dakle, izučavanje aproksimativnih metoda za rješavanje nelinearnih jednadžbi. Osim u matematičkoj teoriji takve jednadžbe se pojavljuju i u praksi. Npr., jedna takva jednadžba je

$$S = P(1+r)\left[\frac{(1+r)^n - 1}{r}\right],$$

gdje je $r = R/100$, a treba odrediti R, dok su S, P i n zadani.

Mi ćemo ovdje obraditi glavne metode rješavanja nelinearne jednadžbe općeg oblika $f(x) = 0$, a koje su danas poznate. To su prije svega Newtonova metoda, iteracijska metoda, metoda sekante i metoda polovljenja intervala. Osim njih navest ćemo još neke dodatne metode radi boljeg uvida u cjelokupni spektar takvih metoda. Pri tom ćemo posebnu pozornost obratiti na odredjivanje grešaka u tim metodama, odnosno njihovim brzinama konvergencije. Kao što ćemo vidjeti, neke od metoda za svoju realizaciju zahtjevaju poznavanje derivacija funkcije f, dok se druge mogu relizirati samo pomoću vrijednosti funkcije f u nekim točkama. U principu, metode koje zahtjevaju da f bude diferencijabilna funkcija brže su od ovih drugih metoda, koje to ne zahtjevaju. Na kraju ćemo obraditi sustave nelinearnih jednadžbi i dati jednu metodu njihova rješavanja.

3.1 Iteracijska metoda

Prva metoda za rješavanje nelinearne jednadžbe $f(x) = 0$, koju ćemo obraditi, jeste tzv. iteracijska metoda. Ova metoda zapravo rješava jednadžbu tipa $x = \varphi(x)$. Najednostavniji način da vidimo kakve to veze ima sa našom jednadžbom $f(x) = 0$ jeste da izaberemo $\varphi(x) = x + f(x)$. Tada jednadžba $x = \varphi(x)$ prelazi u jednadžbu $x = x + f(x)$ što je očigledno ekvivalentno sa jednadžbom $f(x) = 0$. Postoji mnogo načina na koje iz jednadžbe $f(x) = 0$ možemo doći do ekvivalentne jednadžbe $x = \varphi(x)$.

Prije nego li obradimo ovu metodu definirat ćemo Lipschitzove funkcije. Kažemo da funkcija $\varphi(x)$ definirana na segmentu $[a, b]$ zadovoljava Lipschitzov uvjet sa konstantom α ako za svaka dva elementa $x_1, x_2 \in [a, b]$ vrijedi

$$|\varphi(x_1) - \varphi(x_2)| \leq \alpha \, |x_1 - x_2| \, .$$

Npr. ako je funkcija φ neprekidno diferencijabilna tada možemo uzeti

$$\alpha = \max_{x \in [a,b]} |\varphi'(x)| \, .$$

Lipshitzov uvjet tada slijedi iz teorema srednje vrijednosti: $\varphi(x_1) - \varphi(x_2) = \varphi'(\xi)(x_1 - x_2)$.

Specijalno, funkciju $\varphi : [a, b] \to [a, b]$ koja zadovoljava Lipshitzov uvjet sa konstantom α, $0 < \alpha < 1$, nazivamo kontrakcija.

Teorem 25 *Neka na segmentu $[x_0, x_0 + r]$ funkcija φ zadovoljava Lipschitzov uvjet sa konstantom α, $0 < \alpha < 1$, i neka je*

$$0 \leq \varphi(x_0) - x_0 \leq (1 - \alpha)r. \tag{47}$$

Tada na segmentu $[x_0, x_0 + r]$ jednadžba $x = \varphi(x)$ ima jedinstveno rješenje $x^* = \lim\limits_{k \to \infty} x_k$, gdje je niz (x_k) zadan sa $x_k = \varphi(x_{k-1})$, $k = 1, 2, \ldots$. Vrijede sljedeće ocjene

$$|x^* - x_k| \leq \rho \alpha^k \tag{48}$$

i

$$|x^* - x_k| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} |x_k - x_{k-1}| \, , \tag{49}$$

gdje je $\rho = (\varphi(x_0) - x_0)/(1 - \alpha) \leq r$, $k = 1, 2, \ldots$.

Dokaz. Prvi korak u dokazu je pokazivanje da je čitav niz $x_k = \varphi(x_{k-1})$ sadržan u segmentu $[x_0, x_0+\rho]$. Jednostavnosti radi uzet ćemo $x_0 = 0$, pa moramo pokazati da je $x_k \in [0,\rho]$, $\forall k$. Iz definicije veličine ρ slijedi

$$\varphi(0) = (1-\alpha)\rho. \tag{50}$$

Iz Lipschitzova uvjeta uz $x_1 = x$, $x_2 = 0$ slijedi

$$-\alpha x \leq \varphi(x) - \varphi(0) \leq \alpha x,$$

odnosno

$$\varphi(0) - \alpha x \leq \varphi(x) \leq \alpha x + \varphi(0). \tag{51}$$

Iz (50) i desne nejednakosti u (51) nalazimo da je

$$\varphi(x) \leq \rho + (x-\rho)\alpha$$

što za $x \in [0,\rho]$, tj. $(x-\rho) \leq 0$, daje $\rho + (x-\rho)\alpha \leq \rho$, odnosno

$$\varphi(x) \leq \rho. \tag{52}$$

Dokaz da je $x_k \geq 0$ provest ćemo indukcijom. Pretpostavimo da smo našli x_k, $k = 0, 1, ..., m-1$, i da je

$$0 \leq x_k \leq \rho,\ k = 0, 1, ..., m-1. \tag{53}$$

(Za $m = 2$ lako se provjeri da to vrijedi.) Treba pokazati da je $x_m = \varphi(x_{m-1}) \in [0,\rho]$. Promatramo dva slučaja.

(i) Neka je $0 \leq x_{m-1} \leq \min\left\{\rho, \frac{\varphi(0)}{\alpha}\right\}$. Tada po lijevoj nejednakosti u (51),

$$\begin{aligned} x_m &= \varphi(x_{m-1}) \geq \varphi(0) - \alpha x_{m-1} \geq \varphi(0) - \alpha \min\left\{\rho, \frac{\varphi(0)}{\alpha}\right\} \\ &\geq \varphi(0) - \alpha\frac{\varphi(0)}{\alpha} = 0. \end{aligned}$$

(ii) Neka je $\frac{\varphi(0)}{\alpha} \leq x_{m-1} \leq \rho$. Tada iz Lipschitzova uvjeta dobivamo

$$|x_m - x_{m-1}| = |\varphi(x_{m-1}) - \varphi(x_{m-2})| \leq \alpha\,|x_{m-1} - x_{m-2}|\,.$$

Analogno je

$$|x_{m-1} - x_{m-2}| \leq \alpha\,|x_{m-2} - x_{m-3}|\,.$$

Ako tako nastavimo dobivamo

$$|x_m - x_{m-1}| \leq \alpha^{m-1} |x_1 - x_0| . \tag{54}$$

Kako je $|x_1 - x_0| = \varphi(0)$ i $x_{m-1} \geq \frac{\varphi(0)}{\alpha} \geq \alpha^{m-1}\varphi(0)$, jer je $0 < \alpha < 1$, to je

$$x_m \geq x_{m-1} - |x_m - x_{m-1}| > 0.$$

Gornja dva slučaja (i) i (ii) jedina su moguća pa zaključujemo da je uvijek $x_m \geq 0$. Iz (52) znamo da je $x_m = \varphi(x_{m-1}) \leq \rho$, čim je $x_{m-1} \in [0, \rho]$. Dokazano je dakle da je čitav niz (x_k) unutar segmenta $[0, \rho]$. Ako je $x_0 \neq 0$ tada je $x_k \in [x_0, x_0 + \rho]$, $\forall k$.

Drugi korak u dokazu sastoji se od pokazivanja da je niz (x_k) Cauchyjev niz. Treba pokazati da za $\varepsilon > 0$ vrijedi $|x_{n+p} - x_n| < \varepsilon$, čim je $n > n_0$. Iz (54) i činjenice da je $|x_1 - x_0| = |\varphi(x_0) - x_0| < r$ imamo da je

$$\begin{aligned} |x_{n+p} - x_n| &\leq \sum_{m=n+1}^{n+p} |x_m - x_{m-1}| \leq \sum_{m=n+1}^{n+p} \alpha^{m-1} |x_1 - x_0| \qquad (55) \\ &\leq r \sum_{m=n+1}^{n+p} \alpha^{m-1} = r\alpha^n \frac{1-\alpha^p}{1-\alpha} < \alpha^n \frac{r}{1-\alpha}. \end{aligned}$$

Kako je $\alpha < 1$ to $\alpha^n \to 0$, $n \to \infty$, pa iz (55) vidimo da za $n > n_0$ je $|x_{n+p} - x_n| < \varepsilon$, za proizvoljno malen $\varepsilon > 0$, a to znači da je niz (x_k) Cauchyjev niz.

Kako je segment $[x_0, x_0 + r]$ potpun prostor to postoji limes tog niza iz $[x_0, x_0 + r]$,

$$x^* = \lim x_k.$$

S druge strane, funkcija φ zadovoljava Lipschitzov uvjet, pa je ona neprekidna, a neprekidna funkcija i limes komutiraju. Zato je

$$x^* = \lim x_k = \lim \varphi(x_{k-1}) = \varphi(\lim x_k) = \varphi(x^*).$$

Time je dokazano da je x^* rješenje naše jednadžbe $x = \varphi(x)$.

Preostaje dokazati da je rješenje jedinstveno. U tu svrhu pretpostavimo da postoji još jedno rješenje x^{**}, tj. $x^{**} = \varphi(x^{**})$. Tada je

$$|x^* - x^{**}| \leq |\varphi(x^*) - \varphi(x^{**})| \leq \alpha |x^* - x^{**}| .$$

Kako je $\alpha < 1$ gornja nejednakost je moguća samo ako su obje strane jednake nuli, tj. ako je $x^* = x^{**}$. Time je jedinstvenost rješenja dokazana.

Još treba dokazati ocjene iz teorema. Imamo

$$\begin{aligned} |x^* - x_k| &= |\varphi(x^*) - \varphi(x_{k-1})| \leq \alpha\, |x^* - x_{k-1}| \\ &= \alpha\, |\varphi(x^*) - \varphi(x_{k-2})| \leq \alpha^2\, |x^* - x_{k-2}| \\ &\leq \cdots \leq \alpha^k\, |x^* - x_0|\,. \end{aligned}$$

Kako je $x^* \in [x_0, x_0 + \rho]$ to je $|x^* - x_0| \leq \rho$ pa je $|x^* - x_k| \leq \alpha^k \rho$, čime je prva nejednakost dokazana. Preostaje dokazati drugu nejednakost. Imamo da je

$$x^* - x_{k-1} = x_k - x_{k-1} + \varphi(x^*) - \varphi(x_{k-1})$$

pa je

$$\begin{aligned} |x^* - x_{k-1}| &\leq |x_k - x_{k-1}| + |\varphi(x^*) - \varphi(x_{k-1})| \\ &\leq |x_k - x_{k-1}| + \alpha\, |x^* - x_{k-1}| \end{aligned}$$

ili

$$|x^* - x_{k-1}| \leq \frac{1}{1-\alpha}\, |x_k - x_{k-1}|\,.$$

Takodjer je

$$|x^* - x_k| = |\varphi(x^*) - \varphi(x_{k-1})| \leq \alpha\, |x^* - x_{k-1}|\,.$$

Gornje dvije relacije daju

$$|x^* - x_k| \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}\, |x_k - x_{k-1}|\,,$$

a to je druga nejednakost iz teorema. ■

Napomena 26 *Gornji teorem nam kaže: ako funkcija φ zadovoljava uvjete teorema onda jednadžba $x = \varphi(x)$, odnosno njoj odgovarajuća jednadžba $f(x) = 0$, ima jedinstveno rješenje. Ne postoji neko generalno pravilo kako ćemo od jednadžbe $f(x) = 0$ doći do jednadžbe $x = \varphi(x)$, već za svaki primjer to posebno moramo "namjestiti". Postupak sa početka, kad smo birali $\varphi(x) = x + f(x)$, prevodi jednadžbu $f(x) = 0$ u jednadžbu tipa $x = \varphi(x)$, medjutim ništa ne garantira da će tako izabrana funkcija $\varphi(x)$ zadovoljavati uvjete gornjeg teorema. No, ako su svi uvjeti zadovoljeni tada približno rješenje jednadžbe nalazimo kao neki član niza koji se formira po pravilu $x_k = \varphi(x_{k-1})$.*

Primjer 27 *Promotrimo jednadžbu*

$$x^3 - 4x^2 + x - 10 = 0.$$

Ovdje je $f(x) = x^3 - 4x^2 + x - 10$. *Jedno rješenje te jednadžbe nalazi se u segmentu* $[4,6]$, *naime* $f(4) < 0$ *i* $f(6) > 0$ *daje* $f(4)f(6) < 0$. *Ako izaberemo* $\varphi(x) = 10 + 4x^2 - x^3$ *tada je jednadžba* $x = \varphi(x)$ *ekvivalentna gornjoj jednadžbi. Medjutim,* $\varphi'(x) = 8x - 3x^2$ *nije manja od* 1 *na zadanom segmentu pa nema garancije da će iteracijska metoda konvergirati prema rješenju. S druge strane, ako izaberemo* $\varphi(x) = \frac{4x^2-x+10}{x^2}$ *tada je ponovo jednadžba* $x = \varphi(x)$ *ekvivalentna gornjoj jednadžbi. Osim toga je* $\varphi'(x) = \frac{x-20}{x^3}$ *pa je* $|\varphi'(x)| < 1$ *na segmentu* $[4,6]$. *To znači da će iteracijska metoda konvergirati. Ako izaberemo* $x_0 = 4$ *dobivamo*

$$x_1 = \varphi(x_0) = 4.4, \; \dots \; , x_7 = \varphi(x_6) = 4.3069.$$

Vratimo se ponovo na Teorem 25. Taj teorem je specijalan slučaj sljedećeg teorema.

Teorem 28 *(teorem o fiksnoj točki)*
Neka je $\varphi : [a,b] \to [a,b]$ *kontrakcija. Tada jednadžba* $x = \varphi(x)$ *ima jedistveno rješenje koje se dobiva kao limes niza* $x_k = \varphi(x_{k-1})$.

Dokaz ovog teorema analogan je dokazu prethodnog teorema. Napomenimo da je z fiksna točka za preslikavanje φ ako je $\varphi(z) = z$.

3.2 Newtonova metoda

3.2.1 Opis metode i konvergencija

Ponovo promatramo jednadžbu $f(x) = 0$ i dajemo jednu novu metodu za njezino rješavanje. Pretpostavit ćemo da je $f \in C^2(a,b)$ i $f'(x) \neq 0$, $x \in [a,b]$. Taylorova formula prvog reda ima oblik

$$f(x) = f(c) + f'(c)(x-c) + \frac{1}{2}f''(\xi)(x-c)^2,$$

gdje je $c \in [a,b]$, a $\xi \in (a,b)$ je neodredjeno. Ako pretpostavimo da je $(x^* - c)^2$ zanemarivo malo, gdje je x^* rješenje naše jednadžbe, tada iz Taylorove formule i $f(x^*) = 0$ slijedi $(x = x^*)$

$$0 \approx f(c) + f'(c)(x^* - c)$$

ili

$$x^* \approx c - \frac{f(c)}{f'(c)}.$$

Ako sada stavimo $x^* \to x_{k+1}$ i $c \to x_k$ tada dobivamo

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Ovo je Newtonova (ili Newton-Raphsonova) metoda. Napisat ćemo sada algoritam za ovu metodu koji se koristi u praksi.

Algoritam 29 *(Newtonova metoda)*

(0) Zadajmo početnu aproksimaciju rješenja x_0, toleranciju greške $\varepsilon > 0$ i maksimalan broj iteracija N.

(1) Stavimo $i = 0$.

(2) Ako je $f'(x_i) = 0$ onda zaustavimo algoritam sa porukom da metoda ne nalazi rješenje.

(3) Izračunajmo $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$.

(4) Ako je $|x_{i+1} - x_i| < \varepsilon$ zaustavimo algoritam i ispišimo približno rješenje x_{i+1}.

(5) Ako je $i + 1 > N$ zaustavimo algoritam i ispišimo da je prekoračen maksimalan broj iteracija.

(6) Stavimo $i \to i + 1$ i vratimo se na korak (2).

Teorem 30 *Neka je $f \in C^2(a,b)$. Ako je x^* takav da je $f(x^*) = 0$ i $f'(x^*) \neq 0$ tada postoji $\delta > 0$ takav da Newtonova metoda generira niz (x_k) koji konvergira ka rješenju x^* za svaku početnu aproksimaciju iz segmenta $I = [x^* - \delta, x^* + \delta]$.*

Dokaz. Dokaz ćemo provesti na osnovu teorema 28 o fiksnoj točki. U tu svrhu definiramo funkciju

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Pokazat ćemo da je $\varphi : I \to I$ kontrakcija pa ćemo moći primijeniti teorem o fiksnoj točki. No, mi najprije moramo naći segment $I = [x^* - \delta, x^* + \delta]$ takav da φ preslikava I u I i da je kontrakcija na tom segmentu. Uvjet o kontrakciji bit će ispunjen ako nadjemo da je $|\varphi'(x)| < 1$, $x \in I$. Naime, tada je

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| = |\varphi'(\xi)|\, |x - y|\,,$$

pa ako definiramo $\alpha = \max\limits_{x \in I} |\varphi'(x)|$ onda je $|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq \alpha\, |x - y|$, tj. φ jeste kontrakcija.

Kako je $f'(x^*) \neq 0$ i f' je neprekidna funkcija to postoji $\delta_1 > 0$ takav da je $f'(x) \neq 0$, za $x \in I_1 = [x^* - \delta_1, x^* + \delta_1]$. Zato je φ definirana i neprekidna na I_1. Takodjer vrijedi

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{f'(x)^2 - f(x) f''(x)}{f'(x)^2} = \frac{f(x) f''(x)}{f'(x)^2},\ x \in I_1,$$

jer je f klase $C^2(a, b)$ i $\varphi \in C^1(I_1)$. Po pretpostavci je $f(x^*) = 0$ pa iz gornjeg dobivamo

$$\varphi'(x^*) = \frac{f(x^*) f''(x^*)}{f'(x^*)^2} = 0.$$

Kako je φ' neprekidna funkcija zadnja jednakost povlači da postoji δ, $0 < \delta < \delta_1$, tako da je

$$|\varphi'(x)| \leq \alpha < 1,\ x \in I = [x^* - \delta, x^* + \delta]\,.$$

Dakle, φ jeste kontrakcija. Preostaje pokazati da je $\varphi : I \to I$. Ako je $x \in I$ tada teorem srednje vrijednosti povlači da za neki ξ izmedju x i x^* vrijedi

$$|\varphi(x) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi)|\, |x - x^*|\,.$$

Zato

$$\begin{aligned} |\varphi(x) - x^*| &= |\varphi(x) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi)|\, |x - x^*| \\ &\leq \alpha\, |x - x^*| < |x - x^*|\,. \end{aligned}$$

Ako je $x \in I$ to je $|x - x^*| < \delta$ i $|\varphi(x) - x^*| < \delta$, a to znači da $\varphi : I \to I$.

Dobili smo da su sve pretpostavke teorema o fiksnoj točki zadovoljene pa niz

$$x_{k+1} = \varphi(x_k) = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

konvergira ka fiksnoj točki $z = \varphi(z)$. Očigledno je $z = x^*$. ■

Gornji teorem nam kaže da za funkciju $f \in C^2(a,b)$ koja ima nul-točku unutar (a,b), $f(x^*) = 0$, a za koju je $f'(x^*) \neq 0$, Newtonova metoda će konvergirati ka rješenju jednadžbe $f(x) = 0$, čim odaberemo početnu aproksimaciju dovoljno blizu rješenju x^*. To znači da ako nismo odabrali početnu aproksimaciju dovoljno blizu rješenju x^* tada Newtonova metoda ne mora konvergirati. Štoviše, imamo sljedeći primjer.

Primjer 31 *Promotrimo jednadžbu*

$$\sqrt[3]{x} = 0.$$

Očigledno je $x^* = 0$ rješenje te jednadžbe. Ovdje je $f(x) = \sqrt[3]{x}$ pa je $f'(x) = \frac{1}{3\sqrt[3]{x^2}}$. Tada je

$$x_{k+1} = x_k - 3\sqrt[3]{x_k}\sqrt[3]{x_k^2} = -2x_k.$$

Odaberimo sada početnu aproksimaciju $x_0 = a$, gdje je $a \neq 0$ bilo koji broj. Tada je

$$x_1 = -2a,\ x_2 = 4a,\ x_3 = -8a,\ x_4 = 16a,\ ...$$

ili općenito

$$x_k = (-2)^k a.$$

Očigledno je da ovaj niz, dobiven po Newtonovoj metodi, divergira. Dakle, Newtonova metoda u ovom slučaju ne daje rješenje, čak i kada početnu aproksimaciju izaberemo po volji blizu točnom rješenju gornje jednadžbe.

3.2.2 Brzina konvergencije

Newtonova metoda ima kvadratičnu brzinu konvergencije, tj. vrijedi

$$|x_{k+1} - x^*| \leq C\,|x_k - x^*|^2,$$

gdje je C neka konstanta. Sada ćemo to pokazati.

Definiramo grešku $e_k = x_k - x^*$ i promatramo

$$\begin{aligned} e_{k+1} &= x_{k+1} - x^* = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} - x^* \qquad (56) \\ &= e_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = \frac{e_k f'(x_k) - f(x_k)}{f'(x_k)}. \end{aligned}$$

Po definiciji je $f(x^*) = 0$ i vrijedi $x^* = x_k - e_k$ tako da je

$$\begin{aligned} 0 &= f(x^*) = f(x_k - e_k) \\ &= f(x_k) - e_k f'(x_k) + \frac{1}{2} e_k^2 f''(\xi_k) \end{aligned}$$

po Taylorovoj formuli, a to možemo ovako zapisati

$$e_k f'(x_k) - f(x_k) = \frac{1}{2} e_k^2 f''(\xi_k). \tag{57}$$

Ako uvrstimo (57) u (56) dobivamo

$$e_{k+1} = \frac{e_k f'(x_k) - f(x_k)}{f'(x_k)} = \frac{1}{2} e_k^2 \left[\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)} \right].$$

Definiramo

$$C = \frac{1}{2} \frac{\max f''(\xi_k)}{\min f'(x_k)}$$

pa gornja relacija prelazi u

$$|e_{k+1}| \leq C e_k^2,$$

odnosno

$$|x_{k+1} - x^*| \leq C \left| x_k - x^* \right|^2$$

što je i trebalo dobiti.

3.2.3 Geometrijska interpretacija

Neka je $f \in C^2(a, b)$, $f(a)f(b) < 0$ i neka f'' ne mijenja predznak na $[a, b]$. Tada jednadžba $f(x) = 0$ ima jedinstveno rješenje na $[a, b]$. Uzmimo sada neku točku x_0 i povucimo tangentu u toj točki na graf funkcije f. Jednadžba te tangente je

$$y = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0).$$

Nadjimo presjek te tangente sa osi x, tj. stavimo $y = 0$,

$$0 = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0)$$

i označimo rješenje gornje jednadžbe sa x_1,

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Tako smo odredili prvu aproksimaciju našeg rješenja. Ponovimo sada sve to sa točkom x_1 pa ćemo dobiti

$$y = f(x_1) + (x - x_1)f'(x_1)$$

što nakon nalaženja presjeka ove tangente sa osi x daje

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}.$$

Općenito, povlačeći tangente u točkama $x_0, x_1, ..., x_k$ i tražeći njihov presjek sa osi x dobivamo da je

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

a ovo je Newtonova metoda. Zato se ova metoda naziva još i metodom tangenti.

3.3 Metoda sekante

Neka je $f : [a, b] \to R$ takva da je $f(a) < 0$, $f(b) > 0$ i neka f ima jedinstvenu nul-točku $x^* \in [a, b]$, $f(x^*) = 0$. Kroz točke $A(a, f(a))$ i $B(b, f(b))$ povucimo sekantu AB čija je jednadžba

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

Odredimo sada presjek te sekante sa osi x i označimo točku presjeka sa x_1 (trebamo rješiti jednadžbu $y = 0$),

$$x_1 = a - \frac{f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a).$$

Točku x_1 možemo uzeti za prvu aproksimaciju našeg rješenja x^*. Taj postupak možemo ponoviti. Općenito, ako smo dobili $x_0 = a, x_1, ..., x_{k-1}, x_k$ tada napišemo jednadžbu sekante kroz točke x_{k-1} i x_k,

$$y - f(x_k) = \frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k}(x - x_k).$$

Nadjemo sada presjek ove sekante sa osi x (tj. riješimo jednadžbu $y = 0$) i označimo točku presjeka sa x_{k+1},

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_{k-1}) - f(x_k)}(x_{k-1} - x_k)$$

ili

$$x_{k+1} = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}. \tag{58}$$

Ovo što smo dobili naziva se metodom sekante. Formula (58) daje nam način kako računamo aproksimacije po ovoj metodi. Primijetimo da za ovu metodu moramo imati dvije početne aproksimacije x_0 i x_1.

Naći ćemo sada ocjenu greške za ovu metodu. Iz (58) dobivamo

$$-f(x_k) = (x_{k+1} - x_k)\frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k}.$$

Ako na lijevu stranu gornje relacije dodamo $f(x^*) = 0$ dobivamo

$$f(x^*) - f(x_k) = (x_{k+1} - x_k)\frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k}. \tag{59}$$

Iz teorema srednje vrijednosti imamo da je

$$\begin{aligned} f(x^*) - f(x_k) &= f'(\xi)(x^* - x_k), \\ f(x_{k-1}) - f(x_k) &= f'(\eta)(x_{k-1} - x_k). \end{aligned}$$

Ako gornje dvije relacije uvrstimo u (59) dobivamo

$$x^* - x_k = \frac{f'(\eta)}{f'(\xi)}(x_{k+1} - x_k).$$

Neka je $\gamma \leq |f'(x)| \leq \Gamma$, $x \in [a, b]$. Tada je

$$|x^* - x_k| \leq \frac{\Gamma}{\gamma}|x_{k+1} - x_k|$$

što nam daje ocjenu za grešku metode sekante.

Specijalno, ako je $f''(x) \geq 0$, tj. f je konveksna funkcija na $[a, b]$, tada možemo jedan kraj segmenta "učvrstiti". Npr., ako je $f(a) > 0$ ($f(b) < 0$) tada je niz dobiven po formuli

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}(x_k - a),\ x_0 = b, \tag{60}$$

monotono opadajući i ograničen odozdo ($x_{k+1} \leq x_k$, $f(x_{k+1}) \leq 0$ (dobiva se iz uvjeta konveksnosti funkcije)) pa ima limes, $x^* = \lim\limits_{k\to\infty} x_k$. Ako je $f(a) < 0$ ($f(b) > 0$) tada je niz dobiven po formuli

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(b) - f(x_k)}(b - x_k),\ x_0 = a, \tag{61}$$

monotono rastući i ograničen je odozgo pa ima limes $x^* = \lim\limits_{k\to\infty} x_k$.

Primijetimo sljedeće. Kako je f neprekidna funkcija (što znači da komutira sa limesom) to možemo prijeći na limes u (60) da bi dobili

$$x^* = x^* - \frac{f(x^*)}{f(x^*) - f(a)}(x^* - a)$$

što je ekvivalentno sa $f(x^*) = 0$. Slično se pokaže za (61). I ovdje možemo dobiti ocjenu greške

$$|x_k - x^*| \leq C\,|x_k - x_{k-1}|\,.$$

Ova metoda općenito je sporija od Newtonove metode, medjutim ona se može primijeniti i ako ne znamo derivaciju funkcije f.

3.4 Metoda polovljenja intervala

Neka je $f \in C(a,b)$, $f(a)f(b) < 0$ i neka postoji samo jedna nul-točka funkcije f na segmentu $[a,b]$.

Stavimo $a_0 = a$, $b_0 = b$ i izračunajmo

$$c_0 = \frac{a_0 + b_0}{2}.$$

Ako je $f(c_0) = 0$ onda je nadjeno rješenje $x^* = c_0$ i postupak je gotov. Ako je $f(c_0) \neq 0$ tada odredimo a_1, b_1 po formulama

$$a_1 = \begin{cases} c_0, & sgnf(a_0) = sgnf(c_0) \\ a_0, & sgnf(a_0) \neq sgnf(c_0) \end{cases}$$

$$b_1 = \begin{cases} c_0, & sgnf(b_0) = sgnf(c_0) \\ b_0, & sgnf(b_0) \neq sgnf(c_0) \end{cases}$$

gdje je sgn predznak zadane veličine (broja), tj.

$$sgn(d) = \begin{cases} +1, & \text{ako je } d > 0 \\ -1, & \text{ako je } d < 0 \\ 0, & \text{ako je } d = 0. \end{cases}$$

Nije teško provjeriti da je $f(a_1)f(b_1) < 0$ pa je rješenje x^* jednadžbe $f(x) = 0$ iz segmenta $[a_1, b_1]$. Primijetimo da je duljina zadnjeg segmenta upola manja od duljine početnog segmenta. Tako smo duljinu segmenta unutar kojega tražimo našu nul-točku smanjili za pola. Sada taj postupak nastavljamo dok ne dodjemo do nekog segmenta $[a_k, b_k] \subset [a, b]$ takvog da funkcija f u njegovim krajnjim točkama ponovo ima različite predznake, pa računamo

$$c_k = \frac{a_k + b_k}{2}.$$

Ako je $f(c_k) = 0$ onda je nadjeno rješenje $x^* = c_k$ i postupak je gotov. Ako je $f(c_k) \neq 0$ tada odredimo a_{k+1}, b_{k+1} po formulama

$$a_{k+1} = \begin{cases} c_k, & sgnf(a_k) = sgnf(c_k) \\ a_k, & sgnf(a_k) \neq sgnf(c_k) \end{cases}$$

$$b_{k+1} = \begin{cases} c_k, & sgnf(b_k) = sgnf(c_k) \\ b_k, & sgnf(b_k) \neq sgnf(c_k) \end{cases} .$$

Ovaj postupak može biti beskonačan. Jedina mogućnost da on bude konačan jeste da je rješenje x^* neka od središnjih točaka dobivenih segmenata $[a_k, b_k]$. Nije teško vidjeti da vrijedi ocjena za grešku

$$|x^* - c_k| \leq \frac{b - a}{2^{k+1}},$$

jer u svakom novom koraku smanjujemo duljinu segmenta traženja rješenja za pola (duljina narednog segmenta je polovina duljine prethodnog segmenta).

Jedan kriterij zaustavljanja poviše opisanog procesa sastoji se u tome da unaprijed zadamo toleranciju greške $\varepsilon > 0$ i tražimo da je $\frac{b-a}{2^{k+1}} < \varepsilon$. Iz zadnje nejednakosti možemo izračunati broj iteracija potreban da se dobije rješenje sa unaprijed zadanom točnošću.

Ova metoda je jednostavna, ne zahtjeva poznavanje derivacija i lako se realizira, ali može biti veoma spora; preciznije rečeno mnogo je sporija od npr. Newtonove metode.

3.5 Ubrzavanje konvergencije

Definirat ćemo prvo red konvergencije nekog niza realnih brojeva. Neka je (x_k) niz realnih brojeva koji konvergira prema x^* i definirajmo grešku $e_k =$

$x_k - x^*$ za svaki $k \geq 0$. Ako postoji pozitivna konstanta λ takva da je

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^\alpha} = \lambda,$$

tada kažemo da niz (x_k) konvergira prema x^* sa redom α.

Neka je sada x^* fiksna točka preslikavanja φ i neka je $\varphi \in C\,[a,b]$, $\varphi(x) \in [a,b]$, $\forall x \in [a,b]$ te postoji derivacija φ' na (a,b) uz $|\varphi'(x)| \leq \beta < 1$, $\forall x \in [a,b]$. Drugim riječima, φ zadovoljava uvjete teorema o fiksnoj točki. Ovdje dodatno pretpostavljamo da je $\varphi \in C^{k+1}(a,b)$. Želimo odrediti kako opada greška $e_{k+1} = x_{k+1} - x^*$. U tu svrhu, razvijmo φ u Taylorov red oko $x = x^*$,

$$\begin{aligned} e_{k+1} &= \varphi(x_k) - \varphi(x^*) \\ &= \varphi'(x^*)e_k + \frac{1}{2}\varphi''(x^*)e_k^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\varphi^{(k)}(x^*)e_k^n + E_{k,n}, \end{aligned}$$

gdje je

$$E_{k,n} = \frac{\varphi^{(n+1)}(\xi_k)}{(n+1)!}e_k^{n+1},$$

a ξ_k je izmedju x_k i x^*. Ako pretpostavimo da je $\varphi'(x) \neq 0$ za sve $x \in [a,b]$ tada za $n = 0$ dobivamo

$$e_{k+1} = \varphi'(\xi_k)e_k \text{ ili } \frac{e_{k+1}}{e_k} = \varphi'(\xi_k).$$

Znamo da je $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$ pa je onda $\lim\limits_{k\to\infty} \xi_k = x^*$, takodjer. Kako je φ' neprekidna, po pretpostavci, to je

$$\lim \frac{e_{k+1}}{e_k} = \varphi'(x^*).$$

Pretpostavka $\varphi'(x^*) \neq 0$ znači da za dovoljno velike k vrijedi $e_{k+1} = \varphi'(x^*)e_k$, a takva brzina konvergencije naziva se linearnom brzinom konvergencije.

S druge strane, ako je $\varphi'(x^*) = 0$ i $\varphi''(x^*) \neq 0$ za sve $x \in [a,b]$ dobivamo jači rezultat

$$\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k^2} = \frac{\varphi''(x^*)}{2}.$$

Ovo je sada kvadratična konvergencija.

Teorem 32 *Neka je x^* rješenje jednadžbe $x = \varphi(x)$. Pretpostavimo da je $\varphi'(x^*) = 0$ i da je $\varphi''(x)$ neprekidna na nekom otvorenom intervalu koji sadrži x^*. Tada postoji $\delta > 0$ takav da za $x_0 \in I = [x^* - \delta, x^* + \delta]$ niz $x_k = \varphi(x_{k-1})$ kvadratično konvergira ka x^*.*

Dokaz. Izaberimo $\delta > 0$ takav da je $|\varphi'(x)| \leq \beta < 1$ na $I = [x^* - \delta, x^* + \delta]$ i da je $\varphi''(x)$ neprekidna. Tada su svi članovi niza (x_k) sadržani u I. Primijenimo Taylorovu formulu prvog reda za $x \in I$,

$$\varphi(x) = \varphi(x^*) + \varphi'(x^*)(x - x^*) + \frac{1}{2}\varphi''(\xi)(x - x^*)^2,$$

gdje se ξ nalazi izmedju x i x^*. Uz pretpostavku $\varphi(x^*) = x^*$ i $\varphi'(x^*) = 0$ imamo

$$\varphi(x) = x^* + \frac{1}{2}\varphi''(\xi)(x - x^*)^2.$$

Za $x = x_k$,

$$x_{k+1} = \varphi(x_k) = x^* + \frac{1}{2}\varphi''(\xi_k)(x_k - x^*)^2,$$

gdje je ξ_k izmedju x_k i x^*. Zato

$$x_{k+1} - x^* = e_{k+1} = \frac{1}{2}\varphi''(\xi_k)e_k^2.$$

Kako je $|\varphi'(x)| \leq \beta < 1$ na I te φ preslikava I na samog sebe, slijedi iz teorema o fiksnoj točki da (x_k) konvergira ka x^*. Kako je ξ_k izmedju x_k i x^*, za svaki k, to niz (ξ_k) konvergira prema x^*, takodjer, i vrijedi

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^2} = \frac{1}{2}\left|\varphi''(x^*)\right|.$$

To znači da je konvergencija kvadratična. ■

Sada ćemo proučiti Aitkenov Δ^2 proces za ubrzavanje konvergencije linearno konvergentnih nizova. Iz linearne konvergencije imamo da je

$$\frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} \approx \frac{x^* - x_{k+2}}{x^* - x_{k+1}},\ k \geq 0,$$

s time da se aproksimacija poboljšava što je k veći. Rješavanjem ovoga po x^* dobivamo Aitkenov Δ^2 proces koji se bazira na pretpostavci da niz (y_k) definiran sa

$$y_k = x_k - \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{x_{k+2} - 2x_{k+1} + x_k}$$

konvergira brže prema x^* nego li originalni niz (x_k).

U terminima operatora konačnih diferencija Δ, koji za nizove djeluje kao $\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$ i $\Delta^2 y_k = y_{k+2} - 2y_{k+1} + y_k$, gornji niz možemo zapisati kao

$$y_k = x_k - \frac{(\Delta x_k)^2}{\Delta^2 x_k}.$$

Očigledno ovdje x_k, x_{k+1} i x_{k+2} moraju biti poznati.

Ako Aitkenov Δ^2 proces primjenimo na iteracije za fiksnu točku dobivamo tzv. Steffensenovu metodu.

Algoritam 33 *Za naći fiksnu točku od $\varphi(x)$ zadajmo početnu aproksimaciju x_0.*

(1) Stavimo $i = 0$.
(2) Izračunajmo $x_{i+1} = \varphi(x_i)$.
(3) Izračunajmo $x_{i+2} = \varphi(x_{i+1})$.
(4) Nova aproksimacija je $x_{i+1} \leftarrow x_i - \frac{(\Delta x_i)^2}{\Delta^2 x_i}$.
(5) Zadajmo kriterij zaustavljanja.
(6) Stavimo $i \to i + 1$ i vratimo se na (2).

Ova metoda ima kvadratičnu brzinu konvergencije, no to nećemo dokazivati.

3.6 Metode većeg reda

3.6.1 Halleyjeva racionalna metoda

Kada smo proučavali Newtonovu metodu vidjeli smo kako se ona može dobiti iz Taylorove formule prvog reda. Postavlja se prirodno pitanje može li se dobiti slična metoda (za rješavanje jednadžbe $f(x) = 0$) pomoću Taylorove formule drugog reda. Odgovor na ovo pitanje dat ćemo u ovoj i narednoj podsekciji.

Napišimo prvo Taylorovu formulu drugog reda,

$$f(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) + \frac{1}{2}f''(x_n)(x - x_n)^2 + R_2.$$

Zanemarimo li ostatak R_2 i izjednačimo li ovo sa nulom ($f(x) = 0$) dobivamo

$$f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) + \frac{1}{2}f''(x_n)(x - x_n)^2 = 0.$$

Napišimo gornju relaciju u obliku

$$f(x_n) + (x - x_n)\left[f'(x_n) + \frac{1}{2}f''(x_n)(x - x_n)\right] = 0.$$

Odavde dobivamo

$$x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n) + \frac{1}{2}f''(x_n)(x - x_n)}.$$

Iz Newtonove metode imamo da je

$$x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ ili } x - x_n = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

pa ako to uvrstimo u gornju relaciju (u nazivnik razlomka) dobivamo

$$\begin{aligned}
x = x_n &- \frac{f(x_n)}{f'(x_n) - \frac{1}{2}f''(x_n)\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}} \\
&= x_n - \frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2\left[f'(x_n)\right]^2 - f(x_n)f''(x_n)} \\
&= x_n - \left[\frac{2\left[f'(x_n)\right]^2 - f(x_n)f''(x_n)}{2f(x_n)f'(x_n)}\right]^{-1} \\
&= x_n - \left[\frac{2\left[f'(x_n)\right]^2}{2f(x_n)f'(x_n)} - \frac{f(x_n)f''(x_n)}{2f(x_n)f'(x_n)}\right]^{-1} \\
&= x_n - \left[\frac{f'(x_n)}{f(x_n)} - \frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}\right]^{-1} \\
&= x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\left[1 - \frac{f(x_n)f''(x_n)}{2\left[f'(x_n)\right]^2}\right]^{-1}.
\end{aligned}$$

Halleyjeva racionalna formula je onda dana sa

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\left[1 - \frac{f(x_n)f''(x_n)}{2\left[f'(x_n)\right]^2}\right]^{-1}.$$

Iz računskih razloga ona se može zapisati kao

$$x_{n+1} = x_n - u_n \left[1 - \frac{u_n v_n}{2}\right]^{-1},$$

gdje je

$$u_n = \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad v_n = \frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Ovdje ćemo sada bez dokaza dati jedan kriterij odredjivanja reda konvergencije iteracijskog postupka $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ za kojeg u limesu dobivamo fiksnu točku x^*, $x^* = \varphi(x^*)$. Ako je $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = 0$, a $\varphi'''(x^*) \neq 0$ onda je red konvergencije tog niza jednak tri. (Ovo se može poopćiti za bilo koje derivacije.)

Iteracijska funkcija u našem slučaju ima oblik

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \left[1 - \frac{f(x)f''(x)}{2\,[f'(x)]^2}\right]^{-1}$$

pa njezinim deriviranjem dva puta i nalaženjem vrijednosti prve i druge derivacije u točki x^* dobivamo da je $\varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = 0$, a $\varphi'''(x^*) = \frac{3}{2}\left[\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right]^2 - \frac{f'''(x^*)}{f'(x^*)}$ je općenito različito od nule pa Halleyjeva metoda ima red konvergencije jednak tri.

3.6.2 Halleyjeva iracionalna metoda

Ponovo polazimo od Taylorove formule drugog reda

$$f(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) + \frac{1}{2} f''(x_n)(x - x_n)^2 + R_2.$$

Zanemarimo ostatak R_2 pa dobivamo polinom

$$p(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) + \frac{1}{2} f''(x_n)(x - x_n)^2.$$

Iz jednadžbe $p(x) = 0$, koju ćemo riješiti po $x - x_n$, dobivamo

$$x - x_n = \frac{-f'(x_n) \pm \sqrt{[f'(x_n)]^2 - 2f''(x_n)f(x_n)}}{f''(x_n)}.$$

Sada to prepišemo u oblik (dijelimo sa $f'(x_n)$ brojnik i nazivnik u gornjoj relaciji)

$$x - x_n = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}}{\frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}}.$$

Predznak biramo tako da je x_n bliži x-u,

$$\begin{aligned} x &= x_n + \frac{-1 + \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}}{\frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}} \\ &= x_n - \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}}{\frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}}. \end{aligned}$$

Iz numeričkih razloga ovo sada zapisujemo u drugačijem obliku. U tu svrhu pomnožimo brojnik i nazivnik u gornjoj relaciji sa faktorom

$$1 + \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}$$

i uvažimo elementarnu jednakost

$$\left(1 - \sqrt{1-u}\right)\left(1 + \sqrt{1-u}\right) = u$$

pa dobivamo

$$x = x_n - \frac{\frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}{\frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}\right)}$$

što nakon sredjivanja prelazi u

$$x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}}.$$

Tako smo dobili Halleyjevu iracionalnu formulu

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{2f''(x_n)f(x_n)}{[f'(x_n)]^2}}}.$$

Iz računskih razloga prepisujemo je u sljedeći oblik

$$x_{n+1} = x_n - u_n \frac{1}{1 + \sqrt{1 - u_n v_n}},$$

gdje su

$$u_n = 2\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ i } v_n = \frac{f''(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Ova metoda takodjer ima treći red konvergencije.

3.6.3 Još neke metode

Mnoge metode za rješavanje nelinearne jednadžbe $f(x) = 0$ mogu se dobiti ako Newtonovu metodu

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

primijenimo na različite funkcije. Npr., te funkcije mogu biti

$$g(x) = \frac{f(x)}{f'(x)},$$

u kom slučaju dobivamo

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) - \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)} f(x_k)},$$

ili

$$g(x) = \frac{f(x)}{\sqrt{f'(x)}}$$

u kom slučaju dobivamo

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) - \frac{f''(x_k)}{2f'(x_k)} f(x_k)},$$

što je zapravo Halleyjeva metoda. Napomenimo da se prva od gornje dvije metode koristi za nalaženje nul-točaka bilo koje višestrukosti. Ako znamo višestrukost nul-točke (npr. neka je ona jednaka m) tada koristimo metodu

$$x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

koja se može dobiti iz Newtonove metode uz funkciju

$$g(x) = f^{1/m}(x).$$

Općenito možemo uzeti funkciju

$$g(x) = e^{-\int \alpha(x)dx} f(x),$$

uz pogodno odabranu funkciju $\alpha(x)$. Za tu funkciju Newtonova metoda daje

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) - \alpha(x_k)f(x_k)},\ k = 0, 1, 2, ...$$

Npr., odabir $\alpha(x) = \frac{f''(x)}{2f'(x)}$ daje Halleyjevu metodu.

Spomenimo još jednom da se red konvergencije neke metode gornjeg tipa može odrediti tako da tražimo derivacije iterirajuće funkcije, koja je ovdje

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x) - \alpha(x)f(x)},$$

i onda nalazimo prvu po redu derivaciju koja je različita od nule u rješenju x^* jednadžbe $f(x) = 0$. U našem slučaju imamo da je

$$\varphi'(x^*) = 0$$

i

$$\varphi''(x^*) = \frac{f''(x^*) - 2\alpha(x^*)f'(x^*)}{f'(x^*)}.$$

Očigledno, ako je $\alpha(x)$ kao kod Halleyjeve metode tada je $\varphi''(x^*) = 0$ pa metoda ima red konvergencije jednak tri, što smo već ranije vidjeli.

Na kraju, napomenimo kako postoje i metode još većeg reda, četiri, pet, itd. Ovdje ćemo, samo radi ilustracije, navesti metodu reda četiri,

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{f'(x_k)^2 - f(x_k)f''(x_k)/2}{f'(x_k)^3 - f(x_k)f'(x_k)f''(x_k) + f'''(x_k)f^2(x_k)/6}.$$

3.7 Sustavi nelinearnih jednadžbi

3.7.1 Osnovni pojmovi

Neka su $f_i : R^n \to R$, $i = 1, 2, ..., n$, zadane funkcije. Sustav nelinearnih jednadžbi ima oblik

$$\begin{aligned} f_1(x_1, ..., x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, ..., x_n) &= 0 \end{aligned}$$

$$\cdots$$

$$f_n(x_1, ..., x_n) = 0$$

Ako uvedemo vektorske oznake

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

tada taj sustav možemo zapisati kao

$$F(x) = 0.$$

Prisjetit ćemo se sada nekoliko bazičnih činjenica o funkcijama $f : R^n \to R$ i $F : R^n \to R^n$. Kao prvo, derivacija funkcije f je gradijent

$$f'(x) = \nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}.$$

Kažemo da je f neprekidno diferencijabilna u točki x ako su sve parcijalne derivacije $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ neprekidne u x. Funkcija f je neprekidno diferencijabilna na otvorenom skupu $D \subset R^n$ ako je $f'(x)$ neprekidna za svaki $x \in D$. Ako je $f : D \to R$ neprekidno diferencijabilna na otvorenom i konveksnom skupu $D \subset R^n$ tada za sve $x, x + p \in D$ vrijedi

$$f(x + p) = f(x) + \int_0^1 \langle \nabla f(x + tp), p \rangle \, dt \equiv f(x) + \int_x^{x+p} \nabla f(z) dz. \tag{62}$$

Derivacija funkcije $F : R^n \to R^n$ je Jacobijana

$$F'(x) = J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Ako je F neprekidno diferencijabilna na otvorenom konveksnom skupu $D \subset R^n$ tada za sve $x, x + p \in D$ vrijedi

$$F(x + p) = F(x) + \int_0^1 J(x + tp) p dt \equiv F(x) + \int_x^{x+p} F'(z) dz.$$

Ova formula može se dokazati po komponentama primjenom formule (62).

Promatramo još i funkcije $G : R^n \to R^{n\times n}$. Kažemo da je G Lipschitz-neprekidna funkcija u x ako postoji otvoren skup $D \subset R^n$, $x \in D$ i konstanta γ tako da za sve $v \in D$ vrijedi

$$\|G(v) - G(x)\| \leq \gamma \|v - x\| .$$

(Primijetimo da norme na lijevoj i desnoj strani u gornjoj relaciji nisu iste.) Ako ova relacija vrijedi za svaki $x \in D$ tada je $G \in Lip_\gamma(D)$.

Lema 34 *Neka je $F : R^n \to R^n$ neprekidno diferencijabilna na otvorenom konveksnom skupu $D \subset R^n$, $x \in D$ i neka je J Lipschitz-neprekidna u x. Tada za sve $x, x + p \in D$ vrijedi*

$$\|F(x+p) - F(x) - J(x)p\| \leq \frac{\gamma}{2} \|p\|^2 .$$

Dokaz. Imamo da je

$$\begin{aligned} & F(x+p) - F(x) - J(x)p \\ = & \int_0^1 J(x+tp)p dt - J(x)p \\ = & \int_0^1 [J(x+tp) - J(x)] p dt. \end{aligned}$$

Tada je

$$\begin{aligned} & \|F(x+p) - F(x) - J(x)p\| \\ \leq & \int_0^1 \|J(x+tp) - J(x)\| \|p\| dt \\ \leq & \gamma \int_0^1 \|tp\| \|p\| dt \\ = & \gamma \|p\|^2 \int_0^1 t dt = \frac{\gamma}{2} \|p\|^2 . \end{aligned}$$

■

3.7.2 Newtonova metoda

Prvo ćemo opisati kako dolazimo do Newtonove metode za iterativno rješavanje nelinearnog sustava jednadžbi. Ako u relaciji

$$F(x+p) = F(x) + \int_x^{x+p} J(z)dz$$

aproksimiramo integral sa linearnim članom $J(x)p$ tada je

$$F(x+p) \approx F(x) + J(x)p.$$

Ako ovo izjednačimo sa nulom dobivamo

$$J(x)p = -F(x)$$

odnosno

$$p = -J^{-1}(x)F(x).$$

Tada je

$$x + p = x - J^{-1}(x)F(x).$$

Ako supstituiramo $x + p \to x^{k+1}$, $x \to x^k$ tada dobivamo

$$x^{k+1} = x^k - J^{-1}(x^k)F(x^k).$$

Ovo je Newtonova metoda za traženje aproksimativnog rješenja sustava nelinearnih jednadžbi $F(x) = 0$. (Uočite analogiju sa jednodimenzionalnim slučajem.) U praksi se ova metoda realizira po sljedećoj shemi

$$\begin{aligned} \text{riješite } J(x^k)s^k &= -F(x^k), \\ \text{stavite } x^{k+1} &= x^k + s^k. \end{aligned}$$

Definirajmo još i kuglu u R^n,

$$K(x^0, r) = \left\{x \in R^n : \left\|x^0 - x\right\| < r\right\}$$

i prisjetimo se jedne činjenice iz linearne algebre koja kaže da ako je norma matrice I jednaka 1, $\|I\| = 1$, i matrica E je takva da je $\|E\| < 1$ tada postoji $(I - E)^{-1}$ i vrijedi

$$\left\|(I-E)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{1 - \|E\|}.$$

Iz ovoga lako nalazimo da za nesingularnu matricu A za koju je $\|A^{-1}(B-A)\| <$ 1 slijedi da je B nesingularna te da je

$$\left\|B^{-1}\right\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}(B-A)\|}.$$

Sada smo napravili sve potrebne pripreme da bi mogli dokazati teorem o konvergenciji Newtonove metode.

Teorem 35 *Neka je $F : R^n \to R^n$ neprekidno diferencijabilna funkcija na otvorenom konveksnom skupu $D \subset R^n$. Neka postoje $x^* \in R^n$ i $r, \beta > 0$ takvi da je kugla $K(x^*, r) \subset D$, $F(x^*) = 0$, $J^{-1}(x^*)$ postoji uz $\|J^{-1}(x^*)\| \leq \beta$ i $J \in Lip_\gamma(K(x^*, r))$. Tada postoji $\varepsilon > 0$ takav da za svaki $x^0 \in K(x^*, \varepsilon)$ niz (x^k) generiran sa*

$$x^{k+1} = x^k - J^{-1}(x^k)F(x^k),\ k = 0, 1, 2, ...$$

je dobro definiran i konvergira prema x^* te zadovoljava ocjenu

$$\left\|x^{k+1} - x^*\right\| \leq \beta\gamma \left\|x^k - x^*\right\|^2. \tag{63}$$

Dokaz. Biramo $\varepsilon > 0$ tako da je $J(x)$ nesingularna za svaki $x \in K(x^*, \varepsilon)$. Neka je

$$\varepsilon = \min\left\{r, \frac{1}{2\beta\gamma}\right\}. \tag{64}$$

Pokazat ćemo da vrijedi (63) te da je

$$\left\|x^{k+1} - x^*\right\| \leq \frac{1}{2}\left\|x^k - x^*\right\|$$

tako da je

$$x^{k+1} \in K(x^*, \varepsilon).$$

No, prvo pokažimo da je $J(x_0)$ nesingularna. Iz $\|x^0 - x^*\| \leq \varepsilon$, Lipschitzove neprekidnosti od J u x^* i (64) dobivamo

$$\begin{aligned}
& \left\|J^{-1}(x^*)\left[J(x^0) - J(x^*)\right]\right\| \\
\leq\ & \left\|J^{-1}(x^*)\right\|\left\|J(x^0) - J(x^*)\right\| \\
\leq\ & \beta\gamma\left\|x^0 - x^*\right\| \\
\leq\ & \beta\gamma\varepsilon \leq \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

Tada po činjenici koju smo pokazali neposredno prije ovog teorema slijedi da je $J(x^0)$ nesingularna te da vrijedi

$$\begin{aligned} \left\|J^{-1}(x^0)\right\| &\leq \frac{\|J^{-1}(x^*)\|}{1 - \|J^{-1}(x^*)\,[J(x^0) - J(x^*)]\|} \\ &\leq 2\left\|J^{-1}(x^*)\right\| \leq 2\beta. \end{aligned} \tag{65}$$

Zato je x^1 dobro definirano i vrijedi

$$\begin{aligned} & x^1 - x^* \\ = \;& x^0 - x^* - J^{-1}(x^0)F(x^0) \\ = \;& x^0 - x^* - J^{-1}(x^0)\left[F(x^0) - F(x^*)\right] \\ = \;& J^{-1}(x^0)\left[F(x^*) - F(x^0) - J(x^0)(x^* - x^0)\right]. \end{aligned}$$

Po (65) i lemi ,

$$\begin{aligned} & \left\|x^1 - x^*\right\| \\ \leq \;& \left\|J^{-1}(x^0)\right\| \left\|F(x^*) - F(x^0) - J(x^0)(x^* - x^0)\right\| \\ \leq \;& 2\beta\frac{\gamma}{2}\left\|x^* - x^0\right\|^2 \\ = \;& \beta\gamma\left\|x^* - x^0\right\|^2. \end{aligned}$$

Time je (63) dokazana za $k = 0$. Kako je

$$\left\|x^* - x^0\right\| \leq \frac{1}{2\beta\gamma}$$

to je

$$\left\|x^* - x^1\right\| \leq \frac{1}{2}\left\|x^* - x^0\right\|$$

što pokazuje da je $x^1 \in K(x^*, \varepsilon)$. Time je teorem dokazan za slučaj $k = 0$. Opći slučaj dokazuje se indukcijom. (Zapravo sve je isto kao poviše, samo uradimo zamjene $0 \to k$, $1 \to k + 1$.) ■

4 Vježbe

4.1 Zadaci

Zadatak 36 *Napišite Hornerov algoritam za računanje vrijednosti polinoma u točki $x = a$ ako je polinom*
a) parna funkcija,
b) neparna funkcija.

Zadatak 37 *Dokažite da vrijede formule*

$$\sum_{k=0}^{n} k^2 \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = nt(1-t+nt),$$

$$\sum_{k=0}^{n} (nt-k)^2 \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} = nt(1-t).$$

Zadatak 38 *Dokažite Cauchyjeve formule*

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n} p_i(x) &= 1, \\ \sum_{i=0}^{n} p_i(x)(x-x_i)^j &= 0,\ j = 1, 2, ..., n, \end{aligned}$$

gdje su $p_i(x)$ bazični interpolacijski polinomi.

Zadatak 39 *Napišite kompjuterski program za približno računanje vrijednosti funkcije $f(x)$ pomoću Lagrangeovog interpolacijskog polinoma.*

Zadatak 40 *Dokažite da je*

$$\Delta^n y_k = h^n f^{(n)}(\xi).$$

Zadatak 41 *Dokažite da je*

$$f\left[x_0; ...; x_n\right] = \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n}.$$

Zadatak 42 *Dokažite da je*

$$f\left[x_0;...;x_n\right] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Zadatak 43 *Neka je* $L_{(k,k+1,...,m)}(x)$ *interpolacijski polinom sa interpolacijskim čvorovima* $x_k, x_{k+1}, ..., x_m$. *Specijalno stavljamo* $L_{(k)}(x) = f(x_k)$. *Dokažite da vrijedi*

$$L_{(k,k+1,...,m+1)}(x) = \frac{L_{(k+1,...,m+1)}(x)(x-x_k) - L_{(k,k+1,...,m)}(x)(x-x_{m+1})}{x_{m+1}-x_k}.$$

Zadatak 44 *Izvedite formulu za Newtonov interpolacijski polinom unaprijed na ekvidistantnoj mreži čvorova.*

Zadatak 45 *Izvedite formule*

$$y_1' = \frac{y_2 - y_0}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi),$$

$$y_2' = \frac{3(y_2-y_1)-(y_1-y_0)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

pomoću Lagrangeovog interpolacijskog polinoma $L_2(x)$.

Zadatak 46 *Dokažite formule*

$$y_0'' = \frac{1}{h^2}\left(2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3\right) + \frac{11}{12} h^2 f^{(4)}(\xi),$$

$$y_1'' = \frac{1}{h^2}\left(y_0 - 2y_1 + y_2\right) - \frac{1}{12} h^2 f^{(4)}(\xi),$$

$$y_2'' = \frac{1}{h^2}\left(y_1 - 2y_2 + y_3\right) - \frac{1}{12} h^2 f^{(4)}(\xi),$$

$$y_3'' = \frac{1}{h^2}\left(-y_0 + 4y_1 - 5y_2 + 2y_3\right) + \frac{11}{12} h^2 f^{(4)}(\xi).$$

Zadatak 47 *Izvedite formulu za kubični splajn* $S_3(x)$.

Zadatak 48 *Polazeći od Lagrangeovog interpolacijskog polinoma* $L_3(x)$ *izvedite odgovarajuću Newton-Cotesovu kvadraturnu formulu. (Dobivena kvadraturna formula nosi naziv "3/8 Simpsonova formula".)*

Zadatak 49 *Dokažite*

$$\left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right]\right| \leq \frac{1}{162}(\Gamma_2 - \gamma_2)h^3,$$

gdje je po pretpostavci $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, *za* $x \in [x_i, x_{i+1}]$ *i* $h = x_{i+1} - x_i$.

Zadatak 50 *Dokažite*

$$\left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right]\right| \leq \frac{\Gamma_3 - \gamma_3}{1152}h^4,$$

gdje je $\gamma_3 \leq f'''(x) \leq \Gamma_3$, *za* $x \in [x_i, x_{i+1}]$ *i* $h = x_{i+1} - x_i$.

Zadatak 51 *Ne koristeći Peanov teorem o jezgri dokažite da je*

$$\int_{xi}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x)f^{(4)}(x)dx,$$

gdje je $K_4(t)$ *Peanova jezgra za Simpsonovo pravilo.*

Zadatak 52 *Ne koristeći Peanov teorem o jezgri dokažite da je*

$$\int_{xi}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_j(x)f^{(j)}(x)dx,$$

gdje su $K_j(x)$, $j = 1, 2, 3$, *odgovarajuće Peanove jezgre za Simpsonovo pravilo zadane do na predznak.*

Zadatak 53 *Polazeći od zadataka 49 i 50 nadjite ocjene za grešku u kompozitnom Simpsonovom pravilu.*

Zadatak 54 *Dokažite teorem 13.*

Zadatak 55 *Neka su* $B_n(x)$ *Bernoullijevi polinomi. Dokažite da je*

$$\int_0^1 B_n(x)dx = 0,\ n = 1, 2, ...$$

Zadatak 56 *Dokažite teorem 14.*

Zadatak 57 *Dokažite teorem 15.*

Zadatak 58 *Napišite kompjuterski program za*
a) kompozitno pravilo središnje točke,
b) kompozitno trapezno pravilo,
c) kompozitno Simpsonovo pravilo.

Zadatak 59 *Iskoristite programe iz zadatka 58 za računanje približne vrijednosti integrala*

$$\int_0^3 \frac{\sin 2x}{1+x^5}dx.$$

Zadatak 60 *Iskoristite Rolleov teorem da pokažete kako jednadžba*

$$x^4 + 3x + 1 = 0$$

ima točno jedno rješenje u intervalu $(-2, -1)$.

Zadatak 61 *Nadjite segment* $[a, b]$ *takav da na njemu metoda iteracija za jednadžbu*

$$x = \frac{1}{3}(2 - e^x + x^2)$$

konvergira.

Zadatak 62 *Pokažite da su sve Lipschitzove funkcije neprekidne.*

Zadatak 63 *Dokažite teorem o fiksnoj točki.*

Zadatak 64 *Napišite kompjuterski program za rješavanje jednadžbe iz primjera 27 pomoću metode iteracija.*

Zadatak 65 *Napišite kompjuterski program za rješavanje jednadžbe iz primjera 27 pomoću Newtonove metode.*

Zadatak 66 *Dokažite da metoda sekante za konveksne funkcije daje konvergentan niz koji konvergira prema rješenju jednadžbe* $f(x) = 0$.

Zadatak 67 *Napišite kompjuterski program za rješavanje jednadžbe iz primjera 27*
a) pomoću metode sekante,
b) pomoću metode polovljenja intervala.

Zadatak 68 *Uradite usporedbu brzine konvergencije svih metoda za koje ste napisali kompjuterske programe na promatranom primjeru 27.*

Zadatak 69 *Riješite približno nelinearne jednadžbe*

$$\begin{aligned} e^x + 2^{-x} + 2\cos x - 6 &= 0,\ x \in [1,2]\,, \\ e^x - x^2 + 3x - 2 &= 0,\ \ x \in [0,1]\,. \end{aligned}$$

Koristite komjuterske programe za približno nalaženje rješenja.

Zadatak 70 *Pokažite da je red konvergencije Halleyjeve metode jednak tri.*

Zadatak 71 *Izvedite formule za sljedeće metode*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) - \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)} f(x_k)},$$

$$x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Zadatak 72 *Napišite kompjuterski program za rješavanje sustava nelinearnih jednadžbi pomoću Newtonove metode.*

Zadatak 73 *Pomoću programa iz zadatka 72 riješite nelinearan sustav*

$$\begin{aligned} x^2 + xy + y^2 - 1 &= 0 \\ x^3 y + y^2 - x + 1 &= 0. \end{aligned}$$

4.2 Upute i rješenja

Zadatak 36 Ako je polinom parna funkcija tada ga možemo zapisati kao

$$P_{2n}(x) = \sum_{k=0}^{n} a_{2k} x^{2k}.$$

Hornerov algoritam za računanje vrijednosti tog polinoma u točki $x = a$ onda ima oblik

$$\begin{aligned} b_n &= a_{2n} \\ b_{n-1} &= a_{2n-2} + a^2 b_n \\ &\vdots \\ b_1 &= a_2 + a^2 b_2 \\ b_0 &= a_0 + a^2 b_1 \end{aligned}$$

i vrijedi $P_{2n}(a) = b_0$.

Ako je polinom neparna funkcija tada ga možemo zapisati kao

$$P_{2n+1}(x) = \sum_{k=0}^{n} a_{2k+1} x^{2k+1} = x \sum_{k=0}^{n} a_{2k+1} x^{2k}.$$

Hornerov algoritam za računanje vrijednosti tog polinoma u točki $x = a$ onda ima oblik

$$\begin{aligned} b_n &= a_{2n+1} \\ b_{n-1} &= a_{2n-1} + a^2 b_n \\ &\vdots \\ b_1 &= a_3 + a^2 b_2 \\ b_0 &= (a_1 + a^2 b_1)a \end{aligned}$$

i vrijedi $P_{2n+1}(a) = b_0$.

Zadatak 37 Uputa: derivirajte jednakost (2) po t, a zatim dalje radite kao kod dokaza formule (2). Iz (2) i (3) neposredno se dobiva (4).

Zadatak 38 Da bi dobili prvu jednakost definirajmo polinom

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} p_i(x) - 1$$

i pretpostavimo da je on različit od nule. Očigledno je stupanj polinoma $P(x)$ manji ili jednak n, jer su svi $p_i(x)$ polinomi stupnja jednakog n. S druge strane,

$$P(x_j) = \sum_{i=0}^{n} p_i(x_j) - 1 = \sum_{i=0}^{n} \delta_{ij} - 1 = 1 - 1 = 0,$$

za sve $j = 0, 1, ..., n$, pa taj polinom ima $(n+1)$-u nul-točku. To je u kontradikciji sa osnovnim teoremom algebre koji kaže da polinom stupnja n može imati najviše n nul-točaka. Dakle, $P(x) = 0$, tj. $\sum\limits_{i=0}^{n} p_i(x) = 1$.

Za dokaz druge jednakosti prvo dokažimo da je

$$\sum_{i=0}^{n} p_i(x) x_i^k = x^k,\ k = 1, 2, ..., n. \tag{66}$$

U tu svrhu, definirajmo polinom

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} p_i(x) x_i^k - x^k.$$

Očigledno je stupanj tog polinoma $\leq n$. Opet imamo da je

$$\begin{aligned} P(x_j) &= \sum_{i=0}^{n} p_i(x_j) x_i^k - x_j^k = \sum_{i=0}^{n} \delta_{ij} x_i^k - x_j^k \\ &= x_j^k - x_j^k = 0,\ \ j = 0, 1, 2, ..., n, \end{aligned}$$

pa iz poviše iznesenih razloga zaključujemo da (66) vrijedi. Sada, po binomnom poučku,

$$(x - x_i)^j = \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} x^k x_i^{j-k} (-1)^{j-k}$$

pa iz (66) i gornje relacije dobivamo

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{n} p_i(x)(x-x_i)^j &= \sum_{i=0}^{n} p_i(x) \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} x^k x_i^{j-k} (-1)^{j-k} \\
&= \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} (-1)^{j-k} x^k \sum_{i=0}^{n} p_i(x) x_i^{j-k} \\
&= \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} (-1)^{j-k} x^k x^{j-k} \\
&= (x-x)^j = 0, \ j = 1, 2, ..., n.
\end{aligned}$$

Zadatak 40 Treba dokazati

$$\Delta^n y_k = h^n f^{(n)}(\xi),$$

uz mrežu kako je zadana u ranijem tekstu ($y_k = f(x_k)$, $x_{k+1} = x_k + h$). Provjerimo da to vrijedi za $n = 1$. Po teoremu srednje vrijednosti

$$\Delta y_k = f(x_k + h) - f(x_k) = f'(\xi)h$$

pa gornja relacija vrijedi za $n = 1$. Neka je sada $n = 2$. Definirajmo funkciju $g(x) = f(x+h) - f(x)$. Nije teško provjeriti da je

$$\Delta^2 y_k = g(x_k + h) - g(x_k).$$

Po teoremu srednje vrijednosti,

$$g(x_k + h) - g(x_k) = g'(\eta)h,$$

a takodjer je

$$g'(\eta) = f'(\eta + h) - f'(\eta) = f''(\xi)h.$$

Iz gornjih relacija dobivamo

$$\Delta^2 y_k = g'(\eta)h = f''(\xi)h^2.$$

Time je relacija dokazana za $n = 2$. Opći dokaz sada se može dobiti indukcijom uz korištenje poviše opisanog postupka za $n = 2$.

Zadatak 41 Uputa: provjerite jednakost za $n = 1, 2$ pa opći slučaj dokažite indukcijom.

Zadatak 42 Uputa: usporedite ostatke za Lagrangeov i Newtonov interpolacijski polinom.

Zadatak 43 Trebamo pokazati da je

$$L_{(k,k+1,...,m,m+1)}(x_j) = y_j,\ j = k, k+1, ..., m, m+1.$$

Najprije pokažimo to za rubne točke x_k i x_{m+1}. Imamo da je

$$L_{(k,k+1,...,m,m+1)}(x_k) = \frac{0 - L_{(k,k+1,...,m)}(x_k)(x_k - x_{m+1})}{x_{m+1} - x_k} = y_k,$$

jer je $L_{(k,k+1,...,m)}$ interpolacijski polinom kome je x_k jedan čvor, te je

$$L_{(k,k+1,...,m,m+1)}(x_{m+1}) = \frac{L_{(k+1,...,m,m+1)}(x_{m+1})\,(x_{m+1} - x_k)}{x_{m+1} - x_k} = y_{m+1},$$

jer je $L_{(k+1,...,m,m+1)}$ interpolacijski polinom kome je x_{m+1} jedan čvor.

Za čvorove x_j, $j = k+1, ..., m$ imamo da je

$$\begin{aligned}
& L_{(k,k+1,...,m,m+1)}(x_j) \\
= & \frac{L_{(k+1,...,m,m+1)}(x_j)\,(x_j - x_k) - L_{(k,k+1,...,m)}(x_j)(x_j - x_{m+1})}{x_{m+1} - x_k} \\
= & y_j \frac{x_j - x_k - x_j + x_{m+1}}{x_{m+1} - x_k} = y_j.
\end{aligned}$$

Time smo pokazali da $L_{(k,k+1,...,m,m+1)}(x)$ jeste traženi interpolacijski polinom.

Zadatak 45 Ranije smo našli da je

$$f'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} y_0 - \frac{2x - x_0 - x_2}{h^2} y_1 + \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2} y_2 + E_2'(x).$$

Derivaciju greške $E_2'(x)$ računamo samo u čvornoj točki x_1 pa dobivamo

$$\begin{aligned}
E_2'(x_1) &= \frac{f'''(\xi(x_1))}{6} \frac{d}{dx} \left[(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\right]_{x=x_1} \\
&= \frac{f'''(\xi(x_1))}{6} (x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \\
&= -\frac{h^2}{6} f'''(\xi).
\end{aligned}$$

S druge strane je

$$f'(x_1) = \frac{2x_1 - x_1 - x_2}{2h^2} y_0 - \frac{2x_1 - x_0 - x_2}{h^2} y_1 + \frac{2x_1 - x_0 - x_1}{2h^2} y_2 + E_2'(x_1).$$

Tada je

$$y_1' = \frac{y_2 - y_0}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

Postupak za dobivanje formule

$$y_2' = \frac{3(y_2 - y_1) - (y_1 - y_0)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

potpuno je analogan.

Zadatak 46 Napisat ćemo detaljnu uputu za rješavanje ovog zadatka. Napišite Lagrangeov polinom $L_3(x)$ za čvorove $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, 2, 3$,

$$L_3(x) = \sum_{i=0}^{3} p_i(x) y_i.$$

Nadjite $p_i''(x)$, $i = 0, ..., 3$. Napišite grešku (ostatak),

$$E_3(x) = \omega_3(x) \frac{f^{(4)}(\xi)}{24}$$

i nadjite $E_3''(x_i)$, $i = 0, ..., 3$. Sada je

$$f''(x_i) = y_i'' = L_3''(x_i) + E_3''(x_i), \ i = 0, ..., 3.$$

Zadatak 48 Postupak za rješavanje ovog zadatka potpuno je analogan postupku dobivanja Simpsonovog pravila, samo što se umjesto Lagrangeovog interpolacijskog polinoma $L_2(x)$ ovdje koristi Lagrangeov interpolacijski polinom $L_3(x)$. Na kraju tog postupka dobiva se formula

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx \approx \frac{h}{8} \left[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3 \right],$$

gdje je $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, 3$, $h = x_3 - x_0$, $x_i = x_0 + i\frac{h}{3}$, $i = 0, ..., 3$. Dobiveno kvadraturno pravilo nosi naziv 3/8 Simpsonovo pravilo bez ostatka. Ostatak u tom pravilu je

$$R(f) = -\frac{h^5}{6480} f^{(4)}(\xi).$$

Zadatak 49 Moramo pokazati da je

$$\left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right]\right| \leq \frac{1}{162}(\Gamma_2 - \gamma_2)h^3,$$

gdje je po pretpostavci $\gamma_2 \leq f''(x) \leq \Gamma_2$, za $x \in [x_i, x_{i+1}]$ i $h = x_{i+1} - x_i$

Poći ćemo od Peanove jezgre za Simpsonovo pravilo $K_2(t)$ zadane ranije. Prvo moramo provjeriti da je

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_2(t)dt = 0.$$

Tada je zbog gornje relacije

$$\begin{aligned}
\left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_2(t)f''(t)dt\right| &= \left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_2(t)\left[f''(t) - \frac{\Gamma_2 + \gamma_2}{2}\right]dt\right| \\
&\leq \max_{t\in[x_i,x_{i+1}]}\left|f''(t) - \frac{\Gamma_2 + \gamma_2}{2}\right| \int_{x_i}^{x_{i+1}} |K_2(t)|\, dt.
\end{aligned}$$

Takodjer nalazimo

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} |K_2(t)|\, dt = \frac{h^3}{81}$$

i

$$\max_{t\in[x_i,x_{i+1}]}\left|f''(t) - \frac{\Gamma_2 + \gamma_2}{2}\right| \leq \frac{\Gamma_2 - \gamma_2}{2}.$$

Zato i zbog

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt = \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right] + \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_2(t)f''(t)dt$$

imamo da je

$$\left|\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt - \frac{h}{6}\left[f(x_i) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})\right]\right| \leq \frac{1}{162}(\Gamma_2 - \gamma_2)h^3.$$

Zadatak 50 Uputa: pogledajte rješenje prethodnog zadatka.
Zadatak 51 Uputa: uzastopno parcijalno integrirajte $\int_{x_i}^{x_{i+1}} K_4(x) f^{(4)}(x)dx$.
Zadatak 54 Pokazat ćemo samo glavni korak u dokazu ovog teorema. Za grešku imamo

$$\begin{aligned} E_{kn}(f) &= \sum_{j=1}^{k} C\left(\frac{b-a}{k}\right)^{p+1} f^{(p)}(\xi_j) \\ &= C\left(\frac{b-a}{k}\right)^{p+1} \sum_{j=1}^{k} f^{(p)}(\xi_j). \end{aligned}$$

Prijelazom na limes,

$$\begin{aligned} \lim_{k\to\infty} \frac{b-a}{k} \sum_{j=1}^{k} f^{(p)}(\xi_j) &= \int_a^b f^{(p)}(x)dx \\ &= f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a). \end{aligned}$$

Sad nije teško kompletirati čitav dokaz.

Zadatak 59 Rješenje: $I \approx 0.6717578646$.

Zadatak 63 Teorem o fiksnoj točki: ako je $\varphi : [a,b] \to [a,b]$ kontrakcija tada niz $x_k = \varphi(x_{k-1})$ konvergira ka jedinstvenoj fiksnoj točki x^* dokazat ćemo uz pretpostavku da je φ neprekidna funkcija.

Prvo ćemo pokazati da φ ima jedinstvenu fiksnu točku. Ako je $\varphi(a) = a$ ili $\varphi(b) = b$ tada je očigledno da fiksna točka postoji. Pretpostavimo zato da je $\varphi(a) > a$ i $\varphi(b) < b$. Definirajmo funkciju $h(x) = \varphi(x) - x$. Očigledno je h neprekidna funkcija na $[a,b]$. Osim toga je $h(a) = \varphi(a) - a > 0$ i $h(b) = \varphi(b) - b < 0$ pa je $h(a)h(b) < 0$. To znači da h ima barem jednu nul-točku u (a,b). Označimo tu nul-točku sa x^*. Tada je $h(x^*) = \varphi(x^*) - x^* = 0$ odnosno $\varphi(x^*) = x^*$ i egzistencija fiksne točke je dokazana. Dokažimo sada i jedinstvenost. U tu svrhu pretpostavimo da postoji još jedna fiksna točka x^{**} koja je različita od x^*. Po pretpostavci je φ kontrakcija ($|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq \alpha\,|x-y|$, za $\alpha < 1$) pa imamo da je

$$|x^* - x^{**}| = |\varphi(x^*) - \varphi(x^{**})| \leq \alpha\,|x^* - x^{**}| < |x^* - x^{**}|\,.$$

Ovo je kontradikcija koja izlazi iz pretpostavke da je x^{**} fiksna točka različita od x^*. Dakle je $x^* = x^{**}$ pa je i jedinstvenost dokazana. Preostaje dokazati da $x_k = \varphi(x_{k-1}) \to x^*$, kada $k \to \infty$. Imamo da je

$$|x_k - x^*| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x^*)| \leq \alpha\,|x_{k-1} - x^*|\,,$$

$$|x_{k-1} - x^*| = |\varphi(x_{k-2}) - \varphi(x^*)| \leq \alpha\, |x_{k-2} - x^*|$$

pa je

$$|x_k - x^*| \leq \alpha^2\, |x_{k-2} - x^*|\,.$$

Ako nastavimo ovako dobit ćemo da je

$$|x_k - x^*| \leq \alpha^k\, |x_0 - x^*|\,.$$

Prijelazom na limes kada $k \to \infty$ u gornjoj relaciji,

$$\lim |x_k - x^*| \leq |x_0 - x^*| \lim \alpha^k = 0,$$

jer je $0 < \alpha < 1$, što znači da $x_k \to x^*$, kada $k \to \infty$. Time je dokaz završen.

Zadatak 66 Neka je $f : [a, b] \to R$ konveksna funkcija. Tada vrijedi

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y),\;\; x, y \in [a, b]\,,$$

gdje je $0 \leq \lambda \leq 1$ i f je neprekidna funkcija. Promotrimo slučaj $f(a) > 0$ i $f(b) < 0$, uz jedinstvenu nul-točku x^*. Tada je metoda sekante zadana sa

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}(x_k - a), \quad x_0 = b. \tag{67}$$

Treba pokazati da ona generira konvergentan niz kojemu je limes jednak x^*.

Prvo ćemo pokazati da je $f(x_k) \leq 0$ za svaki k. Za $x_0 = b$ to jeste po pretpostavci. Pretpostavimo da smo to dokazali za $j = 1, 2, ..., k$. Provjerimo da li to vrijedi za $k + 1$. Imamo da je

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}(x_k - a) \\ &= x_k \left[1 - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}\right] + a\frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)} \\ &= \lambda a + (1-\lambda) x_k, \end{aligned}$$

gdje je očigledno $0 \leq \lambda = \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)} \leq 1$. Tada je

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq \lambda f(a) + (1-\lambda) f(x_k) \\ &= \frac{f(x_k) f(a)}{f(x_k) - f(a)} + \frac{-f(x_k) f(a)}{f(x_k) - f(a)} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Pokažimo sada da je niz (x_k) monotono opadajući. Imamo

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}(x_k - a) \leq x_k,$$

jer je $\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(a)}(x_k - a) \geq 0$.

Preostaje dokazati da je ograničen odozdo. Pokazat ćemo da je $x_k \geq a$, tj. da je

$$a \leq x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}(x_k - a),$$

odnosno

$$a - x_k \leq (a - x_k)\frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)}$$

ili

$$1 \geq \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(a)} = \lambda,$$

a to smo već vidjeli da vrijedi.

Dakle, niz (x_k) ima limes z. Treba pokazati da le $\lim x_k = x^*$. Ako u relaciji (67) prijedjemo na limes, a zbog neprekidnosti funkcije f, dobivamo

$$z = z - \frac{f(z)}{f(z) - f(a)}(z - a)$$

što je ekvivalentno sa $f(z) = 0$ pa je $z = x^*$.

Zadatak 71 Dokazat ćemo prvu formulu. Ako u Newtonovoj metodi

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

odaberemo $f(x) \to \frac{f(x)}{f'(x)}$ dobivamo

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}{\frac{f'(x_k)^2 - f(x_k)f''(x_k)}{f'(x_k)^2}} \\ &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) - \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)}f(x_k)}. \end{aligned}$$

Ako u poviše napisanu formulu za Newtonovu metodu uvrstimo $f(x) \to f(x)^{1/m}$ tada dobivamo da je

$$
\begin{aligned}
x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)^{1/m}}{\frac{1}{m} f(x_k)^{1/m-1} f'(x_k)} \\
&= x_k - m \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.
\end{aligned}
$$

Primijetimo da ako je x^* nul-točka kratnosti m za funkciju $f(x)$ onda je ona nul-točka kratnosti jedan za funkciju $\sqrt[m]{|f(x)|}$.

References

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

[2] D. N. Arnold, A Concise Introduction to Numerical Analysis, Institute for Mathematics and its Applications, Minneapolis, 2001.

[3] K. Atkinson and W. Han, Theoretical Numerical Analysis, Springer-Verlag, New York/Berlin/Heidelberg, 2001.

[4] N. S. Bakhvalov, Numerical Methods, Mir Publishers, Moscow, 1977.

[5] N. L. Carothers, Approximation Theory, Bowling Green State University, Ohio, 1998.

[6] J. Carroll, Numerical Analysis I,II, School of Mathematical Sciences, Dublin, 2002.

[7] P. Cerone and S. S. Dragomir, Midpoint-type Rules from an Inequalities Point of View, Handbook of Analytic-Computational Methods in Applied Mathematics, Editor: G. Anastassiou, CRC Press, New York, (2000), 135–200.

[8] P. Cerone and S. S. Dragomir, Trapezoidal-type Rules from an Inequalities Point of View, Handbook of Analytic-Computational Methods in Applied Mathematics, Editor: G. Anastassiou, CRC Press, New York, (2000), 65–134.

[9] B. P. Demidovich and I. A. Maron, Computational Methods, Mir Publishers, Moscow, 1987.

[10] J. E. Dennis and Jr. R. B. Schnabel, Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations, SIAM, Philadelphia, 1996.

[11] A. Ghizzetti and A. Ossicini, Quadrature Formulae, Birkhaüses Verlag, Basel/Stuttgart, 1970.

[12] K. Horvatić, Linearna algebra, MO PMF, Sveučilište u Zagrebu/HMD, Zagreb, 1995.

[13] I. Ivanšić, Numerička matematika, Element, Zagreb, 1998.

[14] A. R. Krommer and C. W. Ueberhuber, Computational Integration, SIAM, Philadelphia, 1998.

[15] V. I. Krylov (translated by A. H. Stroud), Approximate Calculation of Integrals, The MacMillan Company, New York, 1962.

[16] S. Kurepa, Matematička analiza II, Tehnička knjiga, Zagreb, 1971.

[17] P-J. Laurent, Approximation et Optimisation, Hermann, Paris, 1972.

[18] S. Mardešić, Matematička analiza I, Školska knjiga, Zagreb, 1988.

[19] H. N. Mhaskar and D. V. Pai, Fundamentals of Approximation Theory, CRC Press, Boca Raton/London/New York/Washington, D.C., 2000.

[20] G. W. Stewart, Afternotes on Numerical Analysis, Series of lectures presented at the University of Maryland at College Park, 1996.

[21] E. A. Volkov, Numerical Methods, Mir Publishers, Moscow, 1986.

[22] Ju. S. Zavjalov, B. I. Kvasov, B. L. Mirošničenko, Metode splajn funkcija, Nauka, Moskva, 1980, (na ruskom).