1 Kwadratury Gaussa - kwadratury o maksymalnym rzedzie

Poszukujemy kwadratury o maksymalnym rzedzie przyblizajacej funkcjonal liniowy

$$I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx \tag{1}$$

Z poprzednich rozwazan ('kwad') wiemy, ze rzad kwadratury opartej na wezlach o lacznej krotnosci $n+1$ moze byc rowny co najmniej $n+1$, gdyz co najmniej taki jest rzad kwadratur interpolacyjnych opartych na $n+1$ wezlach. Mozna sie spodziewac, ze przy odpowiednio wybranych, niekoniecznie rownoodleglych wezlach maksymalny rzad kwadratury bedzie istotnie wiekszy od $n+1$. Okazuje sie, ze dowolna kwadratura postaci

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n_0} A_{i,0} f(x_{i,0}) + \sum_{i=0}^{n_1} A_{i,1} f'(x_{i,1}) + ... + \sum_{i=0}^{n_k} A_{i,k} f^{(k)}(x_{i,k}) \tag{2}$$

rzedu wyzszego od $n+1$ jest kwadratura interpolacyjna.

Dodatkowo

Twierdzenie
Kwadratura postaci (2) o maksymalnym rzedzie (rownym $2n+2$) jest kwadratura interpolacyjna, ktorej wezlami sa pierwiastki $(n+1)$-go wielomianu ortogonalnego na przedziale $[a,b]$ z waga p.
Kwadratury takie nazywane sa *kwadraturami Gaussa*.

2 Wielomiany ortogonalne

2.1 Podstawowe pojecia

Definicja
Przestrzen liniowa V nazywamy unormowana, jesli jest okreslona w niej funkcja nazywana *norma*, ktora kazdemu elementowi $f \in V$ przyporzadkowuje liczbe rzeczywista $||f||$ i spelnia nastepujace warunki:

- $||f|| \geq 0$; $||f|| = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $f = 0$
- $||\alpha f|| = |\alpha| \, ||f||$
- $||f + g|| \leq ||f|| + ||g||$

dla dowolnych elementow $f, g \in V$ i liczb rzeczywistych α.

Na danym przedziale $[a,b]$ niech $p(x)$ bedzie funkcja nieujemna zerujaca sie w tym przedziale na zbiorze miary zero i taka, ze $\int_a^b p(x)dx < \infty$. Funkcja p o tych wlasnosciach bedziemy dalej nazywali funkcja *wagowa*. Przez $L_p^2[a,b]$ oznaczamy zbior funkcji mierzalnych na $[a,b]$ i takich, ze $\int_a^b f^2(x)p(x)dx < \infty$. Przy takich zalozeniach przestrzen $L_p^2[a,b]$ z norma rowna

$$||f|| = (\int_a^b f^2(x)p(x)dx)^{1/2} \tag{3}$$

jest przestrzenia liniowa unormowana. Jedna z jej podprzestrzeni liniowych stanowi zbior wielomianow.

Definicja
Przestrzen liniowa V nazywamy untarna, jesli jest okreslona w niej funkcja nazywana *iloczynem skalarnym.* ktora kazdej parze elementow $f, g \in V$ przyporzadkowuje liczbe rzeczywista (f,g) i spelnia nastepujace warunki:

- $(f,f) \geq 0$; $(f,f) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $f = 0$
- $(f,g) = (g,f)$
- $(\alpha f + \beta g, h) = \alpha(f,h) + \beta(g,h)$

dla dowolnych elementow $f, g, h \in V$ i liczb rzeczywistych α, β.

Przykladem przestrzeni unitarnej jest poprzednio zdefiniowana przestrzen $L_p^2[a,b]$ z iloczynem skalarnym okreslonym rownoscia

$$(f,g) = \int_a^b f(x)g(x)p(x)dx \tag{4}$$

Kazda przestrzen unitarna jest przestrzenia unormowana, jesli za norme przyjmiemy $||f|| = \sqrt{(f,f)}$. Mowiac dalej o normie w przestrzeni unitarnej, bedziemy rozumieli przez nia norme zdefiniowana przez (4).

Definicja

Jesli $(f,g) = 0$, to mowimy, ze elememty f i g sa wzajemnie prostopadle (ortogonalne). Skonczony lub nieskonczony zbior niezerowych elementow $f_1, f_2, \ldots, f_n, \ldots$ przestrzeni unitarnej nazywamy *ukladem ortogonalnym*, jesli dowolne rozne elementy sa wzajemnie ortogonalne, tzn $(f_k, f_l) = 0$ dla $k \neq l$. Jezeli procz tego $(f_k, f_k) = 1$ dla kazdego k, to uklad taki nazywamy *ortonormalnym*.

Przykladem ukladu ortogonalnego moze byc zbior funkcji $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \ldots$ w przestrzeni $L_p^2[a,b]$ z funkcja wagowa $p(x) = 1$. Normujac te funkcje otrzymujemy uklad ortonormalny $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\cos x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos 2x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin 2x}{\sqrt{\pi}}, \ldots$

2.2 Ciagi wielomianow ortogonalnych

Definicja

Ciag $P_0, P_1, \ldots, P_n$, gdzie $P_k (k = 0, 1, \ldots, n)$ jest wielomianem stopnia dokladnie k nazywamy ciagiem wielomianow ortogonalnych na przedziale $[a,b]$ z waga p, jesli tworza uklad ortogonalny w przestrzeni $L_p^2[a,b]$, tzn.

$$(P_k, P_l) = \int_a^b P_k(x)P_l(x)p(x)dx = 0 \tag{5}$$

dla $k \neq l$, $k, l = 0, 1, ...$ $(n \leq \infty)$.

Twierdzenie

Wielomiany ortogonalne $P_k (k = 0, 1, \ldots, n)$ spelniaja zaleznosc rekurencyjna (tzw. *regule trojczlonowa*)

$$\begin{aligned} &P_k(x) = (\alpha_k x + \beta_k)P_{k-1}(x) + \gamma_k P_{k-2}(x), \quad k = 1, 2, \ldots, n \\ &P_{-1}(x) = 0, \quad P_0(x) = a_0 \end{aligned} \tag{6}$$

gdzie

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{a_k}{a_{k-1}} \neq 0 \\ \beta_k &= -\frac{\alpha_k (xP_{k-1}, P_{k-1})}{(P_{k-1}, P_{k-1})} \neq 0 \\ \gamma_k &= -\frac{\alpha_k}{\alpha_{k-1}} \frac{(P_{k-1}, P_{k-1})}{P_{k-2}, P_{k-2}} \neq 0 \end{aligned} \tag{7}$$

a_k zas oznacza wspolczynnik wielomianu P_k przy x^k, $P_k(x) = a_k x^k + \dots$

Twierdzenie
Pierwiastki wielomianow ortogonalnych w przestrzeni $L_p^2[a,b]$ sa rzeczywiste , jednokrotne i leza wewnatrz przedzialu $[a,b]$.

Twierdzenie
Niech $P_0, P_1, \dots, P_n$ bedzie ciagiem wielomianow ortonormalnych o najwyzszych wspolczynnikach rownych a_k, $P_k = a_k x^k + \dots$. Spelniaja one tozsamosc

$$\sum_{i=0}^{k} P_i(x)P_i(y) = \frac{a_k}{a_{k+1}} \frac{P_{k+1}(x)P_k(y) - P_k(x)P_{k+1}(y)}{x-y} \tag{8}$$

2.3 Przyklady ciagow wielomianow ortogonalnych

Wielomiany Legendre'a definiowane wzorami

$$P_0(x) = 1, \quad P_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k \quad k = 1, 2, \dots \tag{9}$$

sa wielomianami ortogonalnymi na przedziale $[-1,1]$ z funkcja wagowa $p(x) = 1$. Spelniaja one zaleznosc rekurencyjna

$$\begin{aligned} &P_k(x) = \frac{2k-1}{k} x P_{k-1}(x) - \frac{k-1}{k} P_{k-2}(x), \quad k = 1, 2, \dots \\ &P_0(x) = 1 \end{aligned} \tag{10}$$

Wielomiany Hermitte'a dane wzorem

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{d^k}{dx^k} e^{-x^2} \tag{11}$$

lub w postaci jawnej

$$H_k(x) = k! \sum_{i=0}^{[k/2]} (-1)^i \frac{(2x)^{k-2i}}{i!(k-2i)!} \tag{12}$$

sa wielomianami ortogonalnymi w przestrzeni $L_p^2(-\infty, +\infty)$ z funkcja wagowa $p(x) = e^{-x^2}$.
Regula trojczlonowa ma w tym przypadku postac

$$\begin{aligned} &H_k(x) = 2xH_{k-1}(x) - (2k-2)H_{k-2}(x), \quad k = 1, 2, \dots \\ &H_0(x) = 1 \end{aligned} \tag{13}$$

Norma $||H_k||$ jest rowna

$$||H_k||^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} (H_k(x))^2 dx = \sqrt{\pi} 2^k k! \tag{14}$$

Wielomianami Czebyszewa pierwszego rodzaju definiowane sa wzorem

$$T_k(x) = \frac{(x + \sqrt{x^2-1})^k + (x - \sqrt{x^2-1})^k}{2}, \quad k = 0, 1, \dots \tag{15}$$

Dla $|x| \le 1$ podstawiajac $x = \cos t$ (tzn. $t = \arccos x$) dostajemy

$$T_k(t) = \frac{(\cos t + i \sin t)^k + (\cos t - i \sin t)^k}{2} = \cos(kt) \quad (i = \sqrt{-1}) \tag{16}$$

a zatem

$$T_k(x) = \cos(k \arccos x) \tag{17}$$

Stad i z tozsamosci trygonometrycznej

$$\cos kt + \cos(k-2)t = 2\cos t \cos(k-1)t \tag{18}$$

wynika zaleznosc rekurencyjna dla wielomianow Czebyszewa

$$\begin{aligned} &T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k = 2,3,\ldots \\ &T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x \end{aligned} \tag{19}$$

Mamy wiec

$$\begin{aligned} &T_0(x) = 1 \\ &T_1(x) = x \\ &T_2(x) = 2x^2 - 1 \\ &T_3(x) = 4x^3 - 3x \\ &T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1 \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{20}$$

Z definicji wynika, ze wielomiany Czebyszewa stopnia parzystego sa funkcjami parzystymi, a stopnia nieparzystego nieparzystymi, tzn. $T_k(-x) = (-1)^k T_k(x)$.

Wielomiany Czebyszewa T_k, $k = 0, 1, \ldots$, tworza uklad ortogonalny w przestrzeni $L_p^2[-1,1]$ z funkcja wagowa $p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, a dokladniej

$$(T_k, T_l) = \int_{-1}^{1} T_k(x) T_l(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} \pi & dla \quad k = l = 0 \\ \frac{\pi}{2} & dla \quad k = l \neq 0 \\ 0 & dla \quad k \neq l \end{cases}$$

3 Kwadratury Gaussa - przyklady

Na mocy podawanego wczesniej twierdzenia wezly kwadratur Gaussa sa rzeczywiste , jednokrotne i leza wewnatrz przedzialu calkowania $[a, b]$. Kwadratury Gaussa sa zatem postaci

$$Q(f) \ = \ \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \ , \tag{21}$$

gdzie x_i sa ustalonymi wezlami, a wspolczynniki A_i sa okreslone wzorem:

$$A_i \ = \ \int_a^b p(x) \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \ . \tag{22}$$

Korzystajac z powyzszego wzoru i formuly Christoffela-Darboux (twierdzenie i wzor (8)) dowodzi sie, ze:

$$A_i \ = \ \frac{a_{n+1}}{a_n} \frac{||P_n||^2}{P'_{n+1}(x_i) P_n(x_i)} \tag{23}$$

gdzie a_k jest wspolczynnikiem przy najwyzszej potedze k-tego wielomianu ortogonalnego, $P_k = a_k x^k + \cdots$.

Wspolczynniki A_i mozna tez przedstawic w postaci:

$$A_i \ = \ \frac{1}{\sum_{k=0}^{n} (\tilde{P}_k(x_i))^2} \tag{24}$$

gdzie $\tilde{P}_k$ sa wielomianami ortonormalnymi.

Wynika stad, ze wspolczynniki kwadratur Gaussa sa dodatnie.
Prawdziwe jest wiec nastepujace twierdzenie:

Twierdzenie
Dla dowolnego przedzialu $[a,b]$ i funkcji wagowej p ciag kwadratur Gaussa jest zbiezny do calki

$$\int_a^b p(x)f(x)dx \tag{25}$$

dla wszystkich funkcji f ciaglych na $[a,b]$.

Aby moc stosowac kwadratury Gaussa do przyblizania calek $\int_a^b p(x)f(x)dx$, musimy znac pierwiastki odpowiednich wielomianow ortogonalnych.

3.1 Kwadratura Gaussa-Legendre'a

Przyklad
Calke $\int_2^3 g(t)dt$,z funkcja wagowa $v(t) = 1$, nalezy przyblizyc kwadratura Gaussa oparta na czterech wezlach.
Wielomiany Legendre'a sa ortogonalne z powyzsza waga na przedziale $[-1,1]$. Konstruujemy wiec najpierw pomocnicza kwadrature przyblizajaca calke $\int_{-1}^1 g(t)dt$, a nastepnie dokonujemy liniowej zamiany zmiennych.
Korzystajac z zaleznosci rekurencyjnej dla wielomianow Legendre'a P_k obliczamy

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \tag{26}$$

i

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x + \frac{3}{8} \tag{27}$$

Wezly kwadratury, czyli pierwiastki P_4, sa rowne

$$-x_0 = x_3 \;=\; \sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} \;\sim\; 0.86113\cdots \tag{28}$$

$$-x_1 = x_2 \;=\; \sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} \;\sim\; 0.33998\cdots \tag{29}$$

Ze wzoru (23) wyznaczamy wspolczynniki kwadratury

$$A_i \;=\; \frac{\frac{35}{8}}{\frac{5}{2}} \frac{\frac{2}{7}}{P_4'(x_i)P_3(x_i)}\,, \tag{30}$$

skad dostajemy

$$A_0 \;=\; A_3 \;=\; \frac{49}{6(18+\sqrt{30})} \;\sim\; 0.34785\cdots \tag{31}$$

$$A_1 \;=\; A_2 \;=\; \frac{49}{6(18-\sqrt{30})} \;\sim\; 0.65214\cdots \tag{32}$$

Skonstruowana w ten sposob kwadratura Q Gaussa-Legendre'a spelnia zaleznosc

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = Q(f) + R(f) = \sum_{i=0}^{3} A_i f(x_i) + R(f) \tag{33}$$

Podstawiajac $t = \frac{1}{2}(x+5)$ i przyjmujac $f(x) = g(\frac{1}{2}(x+5))$ otrzymujemy poszukiwana kwadrature $\tilde{Q}$,

dla ktorej zachodzi rownosc

$$\int_{2}^{3} g(t)dt = \tilde{Q}(g) + \tilde{R}(g) = \sum_{i=0}^{3} B_i \; g(t_i) + \tilde{R}(g) \tag{34}$$

gdzie

$$t_i = \frac{1}{2}(x_i+5)\;, \qquad B_i = \frac{1}{2}A_i \qquad dla \quad i = 0,1,2,3 \qquad oraz \quad R(g) = \frac{1}{2}R(f) \tag{35}$$

3.2 Kwadratura Gaussa-Laguerre'a

Do obliczania calek typu

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x} g(x)dx \tag{36}$$

gdzie g jest funkcja regularna w przedziale $[0,\infty)$, stosuje sie kwadratury Gaussa-Laguerre'a.

Wielomianami ortogonalnymi w $L^2_p[0,\infty)$ z funkcja wagowa $p(x) = e^{-x}$ sa wielomiany Laguerre'a L_n zdefiniowane wzorem

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \tag{37}$$

Przyklad
Na przyklad, kwadratura oparta na pieciu wezlach (a wiec rzedu 10) jest rowna

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{4} A_i f(x_i) \tag{38}$$

gdzie wspolczynniki A_i oraz wezly x_i $(i = 0, 1, \cdots, 4)$ sa odpowiednio rowne

A_i	x_i	
0.521756	0.263560	
0.398667	1.413403	
$0.759424 * 10^{-1}$	3.596426	(39)
$0.361176 * 10^{-2}$	7.085810	
$0.233700 * 10^{-4}$	12.640801	

3.3 Kwadratura Gaussa-Hermite'a

Do obliczania calek typu

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} g(x) dx \tag{40}$$

stosuje sie kwadratury Gaussa-Hermite'a.

Wielomianami ortogonalnymi w $L_p^2(-\infty, \infty)$ z funkcja wagowa $p(x) = e^{-x^2}$ sa wielomiany Hermite'a H_n zdefiniowane wzorem (11). Znajac wiec ich pierwiastki mozna budowac kwadratury Gaussa-Hermite'a przyblizajace calki rozwazanego typu.

3.4 Kwadratura Gaussa-Czebyszewa

Kwadratura ta przybliza calki funkcji z osobliwosciami.

Przyklad
Calkujemy funkcje

$$f(x) = \frac{g(x)}{\sqrt{1-x^2}} \tag{41}$$

na odcinku $[-1, 1]$, a wiec majaca osobliwosci w obu krancach przedzialu.

Osobliwosci te mozemy usunac traktujac funkcje $p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ jako wage. Wielomianami ortogonalnymi w $L_p^2[-1, 1]$ sa wielomiany Czebyszewa, wiec rozwazana calke nalezy przylizyc kwadratura Gaussa-Czebyszewa. Jej wezlami sa

$$x_i = \cos \frac{2i+1}{2n+2}\pi \ , \tag{42}$$

a wszystkie wspolczynniki sa rowne

$$A_i = \frac{\pi}{n+1} \ . \tag{43}$$

Mamy zatem

$$\int_{-1}^{1} \frac{g(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^{n} g\ (\ \cos \frac{2i+1}{2n+2}\pi\ ) + R(g) \tag{44}$$

gdzie

$$R(g) = \frac{\pi}{2^{2n+1}} \frac{g^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \ , \qquad \xi \in (-1, 1) \tag{45}$$