1 Općenito o integracijskim formulama

Neka je zadana funkcija $f : I \to \mathbb{R}$, gdje je $I \subseteq \mathbb{R}$ (interval može biti i beskonačan). Želimo izračunati određeni integral

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x,$$

pri čemu je $[a, b] \subset I$.
Dok je deriviranje (barem analitički) jednostavan postupak, integriranje to nije, pa se integrali (u lijepoj analitičkoj formi) mogu izračunati samo za malen broj funkcija f. Zbog toga u većini slučajeva ne možemo iskorititi osnovni teorem integralnog računa, tj. *Newton-Leibnitzovu formulu* za računanje $\mathcal{I}(f)$ preko vrijednosti primitivne funkcije F na rubovima segmenta

$$\mathcal{I}(f; a, b) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a).$$

Drugim riječima, jedino što nam preostaje je približno, **numeričko računanje integrala** $\mathcal{I}(f; a, b)$.

Osnovna ideja numeričke integracije je izračunavanje $\mathcal{I}(f;a,b)$ (nadalje ćemo kraće pisati $\mathcal{I}(f)$) korištenjem vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. Neke integracijske formule koriste i vrijednosti derivacija funkcije f.
Opća integracijska formula ima oblik

$$\mathcal{I}(f) = \mathcal{I}_m(f) + E_m(f),$$

pri čemu je za $m \in \mathbb{N}_0$ prirodni broj $m+1$ broj korištenih točaka, $\mathcal{I}_m(f)$ pripadna **aproksimacija integrala**, a $E_m(f)$ pritom napravljena **greška**. Ovakve formule za približnu integraciju funkcija jedne varijable često se zovu i **kvadraturne formule** (zbog interpretacije određenog integrala kao površine ispod krivulje).
Ako koristimo samo funkcijeske vrijednosti za aproksimaciju integrala, onda aproksimacija $\mathcal{I}_m(f)$ ima oblik

$$\mathcal{I}_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f\left(x_k^{(m)}\right),$$

pri čemu je broj m unaprijed zadan. Koeficijenti $x_k^{(m)}$ zovu se **čvorovi integracije**, a realni brojevi $w_k^{(m)}$ **težinski koeficijenti**.

U općem slučaju, za fiksni m, moramo odrediti $m+1$ nepoznatih koeficijenata. Uobičajeni način njihovog određivanja je zahtjev da je integracijska formula egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja. No zašto baš tako? Ako postoji Taylorov red za funkciju f i ako on konvergira, onda bi to značilo da integracijska formula egzaktno integrira neki početni komad tog reda, točnije Taylorov polinom onolikog stupnja koliki je i stupanj egzaktnosti promatrane integracijske formule. Greška bi bila mala: bila bi jednaka integralu greške koja nastaje odbacivanjem dijela Taylorovog reda kada ga pretvaramo u Taylorov polinom. Zbog linearnosti integrala kao funkcionala vrijedi

$$\int (\alpha f(x) + \beta g(x))\,\mathrm{d}x = \int \alpha f(x)\,\mathrm{d}x + \int \beta g(x)\,\mathrm{d}x,$$

pa je dovoljno promatrati egzaktnost tih formula na nekoj bazi vektorskog prostora polinoma, recimo na standardnoj bazi

$$\mathcal{B} = \{1, x, x^2, \ldots, x^m, \ldots\}$$

jer svojstvo linearnosti osigurava egzaktnost za sve polinome do najvišeg stupnja baze $\mathcal{B}$.

Ako su čvorovi $x_k^{(m)}$ fiksirani i recimo ekvidistantni, onda dobivamo tzv. **Newton-Cotesove formule**, za koje moramo odrediti $m+1$ nepoznatih koeficijenata $w_k^{(m)}$. Uvjet egzaktosti na vektorskom prostoru polinoma tada vodi na sustav linearnih jednadžbi. Kasnije ćemo vidjeti da se formule mogu dobiti i kao integrali interpolacijskih polinoma stupnja m za funkciju f na zadanoj (ekvidistantnoj) mreži čvorova.

S druge strane, možemo fiksirati samo neke čvorove ili dozvoliti da su svi čvorovi slobodni. Ovakve formule zovu se **formule Gaussova tipa**. Kod ovakvih formula uobičajeno je pisati

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b w(x) f(x)\, \mathrm{d}x,$$

pri čemu je nenegativna funkcija w **težinska funkcija**. Ideja je razdvojiti podintegralnu funkciju na dva dijela, tako da singulariteti budu uključeni u w. Gaussove se formule nikada ne računaju direktno iz uvjeta egzaktnosti, jer to vodi na nelinearni sustav jednadžbi. Pokazuje se da postoji veza između Gaussovih formula, težinske funkcije w i ortogonalnih polinoma s obzirom na w na intervalu $[a, b]$, koja omogućava efikasno računanje svih parametara za Gaussove formule.

Podsjetimo se kratko jedne vrste interpolacijskih polinoma s kojima smo se već upoznali, **Newtonovih interpolacijskih polinoma**. Oni će nam poslužiti za ocjenu grešaka integracijskih formula.

Newtonov interpolacijski polinom koji interpolira funkciju $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ u $n+1$, $n \in \mathbb{N}$, točaka $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$, je oblika

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f[x_0] + (x-x_0) f[x_0,x_1] + (x-x_0)(x-x_1) f[x_0,x_1,x_2] \\ &\quad + \cdots + (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) f[x_0,x_1,\ldots,x_n]. \end{aligned}$$

Posjetimo se da je $f[x_0] = f(x_0)$ i

$$f[x_0,x_1] = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}, \qquad f[x_0,x_1,x_2] = \frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0},$$

a računanje se dalje nastavlja rekurzivno, pa je

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_n] = \frac{f[x_1,\ldots,x_n]-f[x_0,\ldots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}.$$

Pod uvjetom da je funkcija f neprekidno $(n+1)$-derivabilna na segmentu $[a,b]$, te da su $x_0, x_1, \ldots, x_n$ međusobno različiti interpolacijski čvorovi iz $[a,b]$, greška Newtonovog interpolacijskog polinoma u točki $x \in [a,b]$ je dana s

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x],$$

gdje je

$$\min\{x_0, x_1, \ldots, x_n\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}.$$

2 Newton-Cotesove formule

Newton-Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, s tim da su prvi i posljednji uvijek krajevi segmenta $[a, b]$ (dakle, $x_0 = a$ i $x_m = b$). Preciznije, za zatvorenu Newton-Cotesovu formulu s $(m+1)$-nom točkom čvorovi su dani s

$$x_k^{(m)} = x_0 + kh_m, \quad k = 0, \ldots, m, \ : h_m = \frac{b-a}{m}.$$

Dakle, osnovni oblik ovakvih formula je ovakav:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m).$$

2.1 Trapezna formula

Najjednostavnija zatvorena Newton-Cotesova formula je **trapezna formula** koja se dobije kada je $m = 1$. U tom slučaju aproksimacija integrala ima oblik

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_1(f) = w_0^{(1)} f(a) + w_1^{(1)} f(b),$$

jer je

$$x_0^{(1)} = a + 0 \cdot \frac{b-a}{1} = a, \quad x_1^{(1)} = a + 1 \cdot \frac{b-a}{1} = b.$$

Kako ćemo u ovoj točki stalno uzimati $m = 1$ izostavit ćemo pisanje gornjih indeksa, pa ćemo imati

$$w_k^{(m)} = w_k, \qquad k = 0, \ldots, m.$$

Dakle, moramo pronaći težine w_0 i w_1 tako da integracijska formula egzaktno integrira polinome što višeg stupnja, tj. da za polinome što višeg stupnja vrijedi

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_1(f) = w_0 f(a) + w_1 f(b).$$

Pogledajmo integrale članova naše baze $\mathcal{B}$.

$$\int_a^b x^k \mathrm{d}x = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}, \quad k \geq 0.$$

U našem slučaju za $k = 0$ i $k = 1$ imamo

$$\begin{aligned}\int_a^b x^0 \mathrm{d}x &= b - a = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1, \\ \int_a^b x^1 \mathrm{d}x &= \frac{b^2 - a^2}{2} = w_0 \cdot a + w_1 \cdot b.\end{aligned}$$

Rješavanjem ovog kvadratnog sustava dobijemo

$$w_0 = w_1 = \frac{b-a}{2} = \frac{h}{2}.$$

Dakle, integracijska formula dobivena iz egzaktnosti na svim polinomima stupnja najviše 1 glasi

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_1(f) = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) = \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)\right],$$

pa se zato i zove *trapezna formula*. Naime, površinu ispod krivulje $y = f(x)$ na $[a,b]$ zamijenili smo površinom trapeza komu je $(f(a)+f(b))/2$ je srednjica, a $b-a$ visina. Koliko je ta zamjena dobra ovisi, naravno, o funkciji f. Sve dok pravac "razumno" aproksimira oblik grafa funkcije f, greška je mala. Lako se vidi da za mnoge funkcije ipak nije tako.
Trapezna formula neće egzaktno integrirati sve polinome stupnja 2. Npr., već za polinom stupnja 2 koji je element baze $\mathcal{B}$ vrijedi

$$\frac{b^3-a^3}{3} = \int_a^b x^2\mathrm{d}x \neq \mathcal{I}_1\left(x^2\right) = \frac{a^3+b^3}{2}(b-a).$$

Primjetimo još nešto: provučemo li kroz točke $(a, f(a)), (b, f(b))$ linearni interpolacijski polinom, a zatim ga egzaktno integriramo od a do b, dobit ćemo trapeznu formulu. Interpolacijski polinom koji prolazi kroz dane točke je dan formulom

$$p_1(x) = f(a) + f[a,b](x-a).$$

Integriranjem na $[a, b]$ dobijemo

$$\begin{aligned}\int_a^b p_1(x)\,\mathrm{d}x &= \left(f(a)x + af[a,b]x + f[a,b]\frac{x^2}{2} \right) \Big|_a^b \\ &= f(a)(b-a) + f[a,b]\frac{(b-a)^2}{2} \\ &= (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}.\end{aligned}$$

Ovaj nam pristup omogućava i ocjenu greške integracijske formule preko ocjene greške interpolacijskog polinoma, uz uvjet da f ima dovoljan broj neprekidnih derivacija.

Pretpostavimo sada da je funkcija f dvaput neprekidno derivabilna. Greška interpolacijskog polinoma stupnja 1 koji funkciju f interpolira u točkama $(a, f(a)), (b, f(b))$ na segmentu $[a, b]$ jednaka je

$$e_1(x) = f(x) - p_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b),$$

pa vrijedi

$$E_1(f) = \int_a^b e_1(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x.$$

Dakle, ostaje izračunati $E_1(f)$.

Da bismo to učinili iskoristit ćemo generalizaciju Teorema o srednjoj vrijednosti za integrale. Podsjetimo se najprije sljedećega: ako su funkcije g i $w \geq 0$ integrabilne na $[a, b]$, te ako je

$$m = \inf_{x \in [a,b]} g(x), \quad M = \sup_{x \in [a,b]} g(x),$$

onda vrijedi

$$m \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x \leq \int_a^b w(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x \leq M \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x.$$

Iz ovoga lako slijedi naredni teorem.

TEOREM. (*Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti*) Neka su funkcije g i $w \geq 0$ integrabilne na $[a, b]$, te neka je

$$m = \inf_{x \in [a,b]} g(x), \quad M = \sup_{x \in [a,b]} g(x).$$

Tada postoji broj $\mu \in [m, M]$ takav da vrijedi

$$\int_a^b w(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x = \mu \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x.$$

Posebno, ako je g neprekidna na $[a, b]$, onda postoji i broj $\nu \in [a, b]$ takav da vrijedi

$$\int_a^b w(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x = g(\nu) \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x.$$

Sada ćemo to iskoristiti za ocjenu greške $E_1(f)$.
Primjetimo da je

$$\frac{(x-a)(x-b)}{2} \leq 0, \quad x \in [a,b],$$

pa možemo staviti da je

$$w(x) = -\frac{(x-a)(x-b)}{2}, \quad g(x) = -f''(\xi), \quad x \in [a,b].$$

Ako je derivacija f'' neprekidna na $[a,b]$, onda po *Teoremu o integralnoj srednjoj vrijednosti* dobijemo

$$E_1(f) = -f''(\nu) \int_a^b -\frac{(x-a)(x-b)}{2} \mathrm{d}x = -f''(\nu) \frac{(b-a)^3}{12} = -f''(\nu) \frac{h^3}{12}.$$

2.2 Simpsonova formula

Sljedeća zatvorena Newton-Cotesova formula je **Simpsonova formula** koja se dobije kada je $m = 2$. U tom slučaju imamo

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_2(f) = w_0^{(2)} f(x_0) + w_1^{(2)} f(x_0 + h_2) + w_2^{(2)} f(x_0 + 2h_2), \tag{1}$$

pri čemu je

$$h := h_2 = \frac{b-a}{2}.$$

I opet ćemo radi jednostavnosti izostaviti pisanje gornjih indeksa, no treba voditi računa da nisu isti kao kod trapezne formule.
Kada takav h uvrstimo u gornju formulu (1), dobijemo

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_2(f) = w_0 f(a) + w_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + w_2 f(b).$$

Sada ćemo izračunati koeficijente w_k iz uvjeta egzaktnosti na prostoru polinoma što višeg stupnja. Kako imamo tri nepoznata koeficijenta, moramo postaviti najmanje tri jednadžbe.

$$\begin{aligned} b - a &= \int_a^b x^0 \mathrm{d}x = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1, \\ \frac{b^2 - a^2}{2} &= \int_a^b x^1 \mathrm{d}x = w_0 \cdot a + w_1 \cdot \frac{a+b}{2} + w_2 \cdot b, \\ \frac{b^3 - a^3}{3} &= \int_a^b x^2 \mathrm{d}x = w_0 \cdot a^2 + w_1 \cdot \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 + w_2 \cdot b^2. \end{aligned}$$

Rješavanjem ovog sustava dobijemo

$$w_0 = w_2 = \frac{1}{6}(b-a) = \frac{1}{3}h, \quad w_1 = \frac{4}{6}(b-a) = \frac{4}{3}h.$$

Dakle, integralna formula glasi

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

Simpsonova formula ima jednu prednost: iako je dobivena iz uvjeta egzaktnosti za polinome stupnja najviše dva, ona egzaktno integrira i sve polinome stupnja tri. Dovoljno je pokazati da egzaktno integrira element stupnja 3 baze $\mathcal{B}$.

$$\int_a^b x^3 \mathrm{d}x = \frac{b^4 - a^4}{4} = \frac{b-a}{6}\left[a^3 + 4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3 + b^3\right] = \mathcal{I}_2\left(x^3\right).$$

Nadalje, opet nije teško pokazati da je i ova formula interpolacijska. Ako provučemo kvadratni interpolacijski polinom kroz točke

$$(a, f(a)), \quad \left(\frac{a+b}{2}, f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right), \quad (b, f(b)),$$

a zatim ga egzaktno integriramo na $[a, b]$, dobijemo upravo Simpsonovu formulu.

Pokazat ćemo da Simpsonova formula ima manju grešku nego trapezna.
Grešku ćemo opet izračunati integracijom greške pripadnog interpolacijskog polinoma.
Pod uvjetom da je f triput neprekidno derivabilna vrijedi

$$e_2(x) = f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{6}(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b), \quad \xi \in [a,b],$$

pa je

$$E_1(f) = \int_a^b e_2(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f'''(\xi)}{6}(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)\,\mathrm{d}x.$$

Na žalost, funkcija

$$y = (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)$$

nije stalnog predznaka na $[a,b]$, pa ne možemo direktno primijeniti *Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti.*

Označimo

$$c := \frac{a+b}{2}$$

i definirajmo

$$w(x) = \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b)\,\mathrm{d}t, \quad x \in [a,b].$$

Tvrdimo da vrijedi

$$w(x) = \begin{cases} 0, & x = a \\ y > 0, & x \in (a,b) \\ 0, & x = b \end{cases}.$$

Naime, skiciramo li funkciju f definiranu s $f(t) = (t-a)(t-c)(t-b)$, $t \in [a,b]$, odmah vidimo da je centralno simetrična oko središnje točke c segmenta $[a,b]$. Dakle, w će rasti na $[a,c]$, a padati na $[c,b]$, dok će c biti točka maksimuma. Očito je da je $w(a) = w(b) = 0$.

Prisjetimo li se Newtonovog interpolacijskog polinoma, znamo da za $m = 2$ vrijedi

$$e(x) = f[a, b, c, x] = \frac{f'''(\xi)}{6},$$

pri čemu je

$$a < \xi < b,$$

pa je greška Simpsonove formule dana s

$$E_2(f) = \int_a^b w'(x) f[a, b, c, x] \, \mathrm{d}x.$$

Parcijalnom integracijom dobivamo

$$E_2(f) = w'(x) f[a, b, c, x] \, \Big|_a^b - \int_a^b w(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f[a, b, c, x] \, \mathrm{d}x.$$

Prvi član je očito jednak nuli jer je $w'(a) = w'(b) = 0$, pa ostaje još srediti drugi član. Može se pokazati da je derivacija po x treće podijeljene razlike $f[a, b, c, x]$ u stvari četvrta podijeljena razlika s dvostrukim čvorom x.

Prema tome, imamo

$$E_2(f) = -\int_a^b w(x)\, f[a, b, c, x, x]\, \mathrm{d}x.$$

Kako je funkcija w nenegativna, možemo primjeniti *Teorem o integralnoj srednjoj vrijednosti*, pa dobijemo

$$E_2(f) = -f[a, b, c, \eta, \eta] \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x,$$

gdje je $\eta \in [a, b]$. Ako je još postoji i neprekidna $f^{(4)}$ na $[a, b]$, možemo pisati

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x.$$

Ostaje još integrirati funkciju w.

Imamo

$$\begin{aligned} w(x) &= \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b)\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{(x-c)^4}{4} - h^2\frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4}, \end{aligned}$$

pa je

$$\int_a^b w(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \left[\frac{(x-c)^4}{4} - h^2\frac{(x-c)^2}{2} + \frac{h^4}{4}\right]\mathrm{d}x = \frac{4}{15}h^5.$$

Kada to uključimo u formulu za grešku, dobijemo

$$E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b w(x)\,\mathrm{d}x = E_2(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\cdot\frac{4}{15}h^5 = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta).$$

Odmah uočavamo da je greška za jedna red veličine bolja nego što bi trebala biti s obzirom na upotrijebljeni interpolacijski polinom.

2.3 Produljene formule

Nije teško pokazati da su sve Newton-Cotesove formule integrali interpolacijskih polinoma na ekvidistantnoj mreži. Kao što ni podizanje stupnja interpolacijskog polinoma na ekvidistantnoj mreži može dovesti do divergencije procesa, tako se može dogoditi i s Newton-Cotesovim integraciskim formulama višega reda. Drugim riječima, ako podizanjem reda integracijske formule ne povećavamo točnost, već je u nekim slučajevima i drastično smanjujemo, što preostaje za učiniti u cilju smanjenja greške?

Rješenje je sljedeće: umjesto da podižemo red formule, podijelimo područje integracije na više djelova (recimo, jednake duljine), a zatim na svakom od njih primijenimo odgovarajuću integracijsku formulu niskog reda. Tako dobivene formule zovu se **produljene formule**.

Pogledajmo kako to radimo u slučaju trapezne formule.

Podjelimo segment $[a,b]$ na n podintervala oblika $[x_{k-1},x_k]$, $k=1,\ldots,n$, s tim da je

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b,$$

i na svakome od njih primijenimo običnu trapeznu formulu. Tada je

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)\,\mathrm{d}x,$$

pa na isti način zbrojimo obične trapezne aproksimacije u produljenu trapeznu aproksimaciju.
Najjednostavniji je slučaj kada su točke x_k ekvidistantne, tj. kada je svaki podinterval $[x_{k-1},x_k]$ iste duljine h. To znači da je

$$x_k = a + kh, \quad k = 0,\ldots,n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Aproksimacija produljenom trapeznom formulom je

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right) + E_n^T(f),$$

pri čemu je $f_k = f(x_k)$, $k = 0, \ldots, n$, a $E_n^T(f)$ je greška produljene formule.

Pretpostavimo sada da je f dvaput neprekidno derivabilna na $[a, b]$. Grešku $E_n^T(f)$ možemo zapisati kao zbroj grešaka osnovnih trapeznih formula na podintervalima, pa je

$$E_n^T(f) = \sum_{k=1}^{n} -f''(\nu_k)\frac{h^3}{12} = -\frac{h^3 n}{12}\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f''(\nu_k)\right).$$

Kako izraz

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f''\left(\nu_k\right)$$

predstavlja aritmetičku sredinu brojeva $f''\left(\nu_k\right)$, to znamo da je ispunjeno

$$\min\left\{f''\left(\nu_1\right),\ldots,f''\left(\nu_n\right)\right\} \le \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f''\left(\nu_k\right) \le \max\left\{f''\left(\nu_1\right),\ldots,f''\left(\nu_n\right)\right\},$$

a zbog neprekidnosti f'' slijedi

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f''\left(\nu_k\right) = f''\left(\xi\right), \quad \xi \in [a,b].$$

Dakle, imamo

$$E_n^T\left(f\right) = -\frac{h^3 n}{12} f''\left(\xi\right) = -\frac{\left(b-a\right)h^2}{12} f''\left(\xi\right), \quad \xi \in [a,b].$$

Iz te formule lako dobijemo važnu ocjenu broja podintervala potrebnih da se postigne zadana točnost $\varepsilon > 0$ za produljenu trapeznu formulu. Vrijedi

$$\left|E_n^T(f)\right| \leq \frac{(b-a)\,h^2}{12}M = \frac{(b-a)^3}{12n^2}M, \quad M = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|,$$

pa želimo li da je

$$\left|E_n^T(f)\right| \leq \varepsilon,$$

dovoljno je tražiti

$$n \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3\,M}{12\varepsilon}}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

2.4 Formula srednje točke (midpoint formula)

Do sada smo se upoznali s dvije vrste Newton-Cotesovih kvadraturnih formula zatvorenog tipa. Ako, pak, prilikom intrepolacije ne koristimo jednu ili nijednu rubnu točku dobijemo **otvorene Newton-Cotesove formule**.
Stavimo li

$$x_{-1} := a, \quad x_{m+1} := b, \quad h_m = \frac{b-a}{m+2},$$

onda otvorene Newton-Cotesove formule imaju oblik

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \mathcal{I}_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m).$$

Najpoznatija i najkorištenija otvorena Newton-Cotesova formula je ona koja se dobije za $m = 0$, a poznata je pod nazivom **midpoint formula** ili **formula srednje točke**.

Da bismo odredili midpoint formulu dovoljno je naći koeficijent $w_0 := w_0^{(0)}$ takav da je formula

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = w_0 f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja, u ovom slučaju stupnja jedan. Dobijemo

$$b - a = \int_a^b 1\mathrm{d}x = w_0,$$

odakle slijedi

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = (b-a)\,f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Greška ove integracijske formule jednaka je integralu greške interpolacijskog polinoma stupnja nula (konstante) koji interpolira f u srednjoj točki segmenta $[a, b]$.

Ako definiramo

$$w(x) = \int_a^x (t - c)\,\mathrm{d}t, \quad c := \frac{a+b}{2},$$

onda koristeći istu tehniku kao kod Simpsonove formule dobijemo

$$E_0(f) = \int_a^b e_0(x)\,\mathrm{d}x = f''(\xi)\,\frac{(b-a)^3}{24}, \ \ \xi \in [a, b].$$

Koristimo li produljenu midpoint formulu na n podintervala jednake duljine h, dobijemo

$$\begin{aligned} I_n(f) &= h(f_1 + \cdots + f_n) + E_n^M(f), \quad h = \frac{b-a}{n}, \\ x_k &= a + \left(k - \frac{1}{2}\right) h, \ \ y_k = f(x_k), \ \ k = 1, \ldots, n, \end{aligned}$$

pri čemu je $E_n^M(f)$ ukupna greška produljene midpoint formule koja je jednaka

$$\begin{aligned} E_n^M(f) &= \sum_{k=1}^{n} f''(\xi_k) \frac{h^3}{24} = \frac{h^3 n}{24} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f''(\xi_k) \right) \\ &= \frac{h^3 n}{24} f''(\xi) = \frac{h^2 (b-a)}{24} f''(\xi), \end{aligned}$$

gdje je $\xi \in [a, b]$.

3 Rombergov algoritam

Pri izvodu **Rombergovog algoritma** koristimo se sljedećim principima:

- udvostručavanjem broja podintervala u produljenoj trapeznoj metodi,
- eliminacijom člana greške iz dviju susjednih produljenih formula (ponovljena primjena ovog principa zove se **Richardsonova ekstrapolacija**).

Da bismo nastavili moramo se najprije podsjetiti što su Bernoullijevi polinomi i iz njih definirani Bernoullijevi brojevi.

Bernoullijevi polinomi zadani su implicitno funkcijom izvodnicom

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

dok se **Bernoullijevi brojevi** implicitno definiraju s

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

Evo prvih nekoliko Bernoullijevih polinoma:

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

Općenito vrijedi

$$B_{2n+1}(0) = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Evo i prvih nekoliko Bernoullijevih brojeva:

- $B_0 = 1$
- $B_1 = -1/2$
- $B_2 = 1/6$
- $B_4 = -1/30$
- $B_6 = 1/42$
- $B_8 = 1/30$

Općenito vrijedi

$$B_n = B_n(0), \quad n \in \mathbb{N},$$

pa je

$$B_{2n+1} = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Bernoullijevi polinomi mogu se definirati i rekurzivno s

$$\begin{aligned} B_0(x) &= 1, \quad B_1(x) = x, \quad B_2(x) = x^2 - x, \\ B_n'(x) &= \begin{cases} nB_{n-1}(x), & n \geq 4 \text{ paran} \\ n\left(B_{n-1}(x) + B_{n-1}\right) & n \geq 3 \text{ neparan} \end{cases}. \end{aligned}$$

Za Bernoullijeve polinome vrijedi i

$$\int_0^1 B_n(x)\,\mathrm{d}x = 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Ponekad su nam potrebna i **periodička proširenja Bernoullijevih polinoma**. Ona se definiraju kao

$$B_n^*(x) = \begin{cases} B_n(x), & x \in [0,1] \\ B_n^*(x-1) & x > 1 \end{cases}.$$

Sada ćemo se upoznati s jednim od klasičnih teorema numeričke analize koji nam daje **asimptotski razvoj ocjene greške** za trapeznu formulu.

TEOREM. (*Euler-Maclaurinova formula*) Neka je $m \in \mathbb{N}_0$ i $n \in \mathbb{N}$. Definiramo ekvidistantnu mrežu na n podintervala segmenta $[a, b]$ s

$$x_k = a + kh, \quad k = 0, \ldots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Pretpostavimo da je $f \in C^{(2m+2)}[a, b]$. Za pogrešku produljene trapezne formule vrijedi

$$E_n(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^T(f) = \sum_{i=1}^{m} \frac{d_{2i}}{n^{2i}} + F_{n,m},$$

pri čemu je

$$d_{2i} = \frac{B_{2i}}{(2i)!}(b-a)^{2i}\left(f^{(2i-1)}(b) - f^{(2i-1)}(a)\right)$$

a ostatak $F_{n,m}$ je dan s

$$F_{n,m} = \frac{(b-a)^{2m+2}}{n^{2m+2}(2m+2)!}\int_a^b B_{2m+2}^{*}\left(\frac{b-a}{h}\right) f^{(2m+2)}(x)\,\mathrm{d}x.$$

Sada možemo izvesti **Rombergov algoritam**.

Označimo s $I_n^{(0)}$ trapeznu formulu duljine intervala $h = (b-a)/n$. Ako je n paran iz Euler-Maclaurinove formule dobijemo

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^{(0)}(f) &= \frac{d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{d_4^{(0)}}{n^4} + \cdots + \frac{d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n,m},\\ \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_{n/2}^{(0)}(f) &= \frac{4d_2^{(0)}}{n^2} + \frac{16d_4^{(0)}}{n^4} + \cdots + \frac{2^{2m}d_{2m}^{(0)}}{n^{2m}} + F_{n/2,m}.\end{aligned}$$

Ako prvi razvoj pomnožimo s 4 i oduzmemo mu drugi razvoj, dobit ćemo

$$4\left(\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^{(0)}(f)\right) - \left(\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_{n/2}^{(0)}(f)\right) = -\frac{12d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{60d_6^{(0)}}{n^6} + \cdots .$$

Sređivanjem dobijemo

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{4I_n^{(0)}(f) - I_{n/2}^{(0)}(f)}{3} - \frac{4d_4^{(0)}}{n^4} - \frac{20d_6^{(0)}}{n^6} + \cdots .$$

Prvi član s desne strane jednakosti možemo uzeti kao novu, bolju aproksimaciju integrala, u oznaci

$$I_n^{(1)}(f) = \frac{4I_n^{(0)}(f) - I_{n/2}^{(0)}(f)}{3}, \quad n \geq 2 \text{ paran.}$$

Greška ove nove aproksimacije iznosi

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^{(1)}(f) = \frac{d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots,$$

pri čemu je

$$d_4^{(1)} = -4d_4^{(0)}, \quad d_4^{(1)} = -20d_4^{(0)}, \ \ldots.$$

Cilj nam je naći eksplicitnu formulu za $I_n^{(1)}(f)$.

Vrijedi (vidi produljenu trapeznu formulu)

$$\begin{aligned} I_n^{(0)} &= h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right), \\ I_{n/2}^{(0)} &= h_1\left(\frac{1}{2}f_0 + f_2 + \cdots + f_{n-2} + \frac{1}{2}f_n\right), \quad h_1 = 2h. \end{aligned}$$

Uvrštavanjem u $I_n^{(1)}(f)$ dobijemo

$$\begin{aligned} I_n^{(1)}(f) &= \frac{4h}{3}\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right) - \frac{2h}{3}\left(\frac{1}{2}f_0 + f_2 + \cdots + f_{n-2} + f_n\right) \\ &= \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\right), \end{aligned}$$

što je u stvari Simpsonova formula s n podintervala.

Postupak možemo nastaviti na analogan način. Dobijemo

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_{n/2}^{(1)}(f) = \frac{16d_4^{(1)}}{n^4} + \frac{64d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots \quad ,$$

pa je

$$16\left(\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^{(1)}(f)\right) - \left(\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_{n/2}^{(1)}(f)\right) = -\frac{48d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots \quad ,$$

odnosno

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{16I_n^{(1)}(f) - I_{n/2}^{(1)}(f)}{15} - \frac{48d_6^{(1)}}{n^6} + \cdots .$$

Ponovno prvi član s desne strane jednakosti proglasimo novom aproksimacijom integrala

$$I_n^{(2)}(f) = \frac{16I_n^{(1)}(f) - I_{n/2}^{(1)}(f)}{15}, \quad n \geq 4 \text{ djeljiv s 4.}$$

Ako ovaj postupak nastavimo induktivno, dobijemo Richardsonovu ekstrapolaciju

$$I_n^{(k)}(f) = \frac{4^k I_n^{(k-1)}(f) - I_{n/2}^{(k-1)}(f)}{4^k - 1}, \quad n \geq 2^k \text{ djeljiv s } 2^k,$$

pri čemu je greška za $f \in C^{(2k+2)}[a,b]$ jednaka

$$E_n^{(k)}(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_n^{(k)}(f) = \frac{d_{2k+2}^{(k)}}{n^{2k+2}} + \cdots = \beta_k (b-a) h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Može se pokazati i da vrijedi

$$\frac{E_n^{(k)}(f)}{E_{2n}^{(k)}(f)} = 2^{2k+2}.$$

Rombergova tablica

$$
\begin{array}{llll}
I_1^{(0)} & & & \\
I_2^{(0)} & I_2^{(1)} & & \\
I_4^{(0)} & I_4^{(1)} & I_4^{(2)} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

Omjeri pogrešaka u stupcima Rombergove tablice

$$
\begin{array}{lllll}
1 & & & & \\
4 & 1 & & & \\
4 & 16 & 1 & & \\
4 & 16 & 64 & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

OBAVEZNO POGLEDATI PRIMJERE U KNJIZI, STR. 503.!!!!!!

4 Težinske integracijske formule

Pretpostavimo da želimo približno izračunati integral

$$I_w(f) = \int_a^b w(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x,$$

pri čemu je w pozitivna, ili barem nenegativna, **težinska funkcija** za koju pretpostavljamo da je integrabila na (a, b), s time da dozvaljavamo mogućnost njene nedefiniranosti na rubovima a i b. Pri tom interval integracije može biti i beskonačan. Drugim riječima, promatramo opći problem jednodimenzionalne integracije zadane funkcije f po zadanoj neprekidnoj mjeri $\mathrm{d}\lambda$ generiranoj težinskom funkcijom w na zadanoj domeni. Ako je $w(x) = 1$ za sve $x \in [a, b]$, onda koristimo kraću oznaku $I(f)$ umjesto $I_w(f)$. Takvu kraću oznaku koristimo i ako je iz konteksta jasno o kojoj se težinskoj funkciji radi.

Kao i prije, ovaj integral aproksimiramo težinskom sumom vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. U ovo poglavlju ćemo točke numerirati od 1, a ne od 0, zato jer nam više neće postojati onakva povezanost između egzaktnosti i broja točaka kava je postojala kod netežinskih formula.

Dakle, **opća težinska integracijska formula** za aproksimaciju integrala $I_w(f)$ ima oblik

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i^{(n)} f\left(x_i^{(n)}\right), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Kao i prije, gornje indekse (n) ćemo radi jednostavnosti izostaviti iz zapisa, no stalno treba voditi računa da formula ovisi i o izboru prirodnog broja n. Brojeve w_i nazivamo **težinskim koeficijentima** ili **težinama** integracijske formule.

Dakle, sasvim općenito možemo pisati

$$I_w(f) = \int_a^b w(x) f(x) \, \mathrm{d}x = I_n(f) + E_n(f),$$

gdje je $E_n(f)$ **greška aproksimacije**.

Podsjetimo se da je u Uvodu definirano

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{a}\|_1 &= |a_1| + \cdots + |a_n|\,, \\ \|\boldsymbol{a}\|_\infty &= \max\{|a_1|\,,\ldots,|a_n|\}\,, \end{aligned}$$

pri čemu je $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_n)$, no sada će nam trebati **norme funkcija**. Za funkciju $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ definiramo

$$\begin{aligned} \|g\|_1 &= \int_a^b |g(x)|\,\mathrm{d}x, \\ \|g\|_\infty &= \sup_{x\in[a,b]} |g(x)|\,. \end{aligned}$$

Osnovnu podlogu za konstrukcije formula i ocjenu grešaka daje sljedeći rezultat.

TEOREM. Ako je

$$I_w(f) = \int_a^b w(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x$$

Riemannov integral na konačnoj domeni $[a, b]$ i ako je $\hat{f}$ bilo koja druga funkcija za koju postoji $I_w\left(\hat{f}\right)$, onda vrijedi ocjena

$$\left| I_w(f) - I_w\left(\hat{f}\right) \right| \leq \|w\|_1 \left\| f - \hat{f} \right\|_\infty .$$

DOKAZ. Podsjetimo se da smo u uvodu naglasili kako ćemo promatrati težinske funkcije w koje su nenegativne i integrabilne, no u ovom slučaju je dovoljno promatrati w takvu da je $|w|$ integrabilna (a ona je svakako i nenegativna).

Ocjenu dobivamo direktno iz svojstava Riemannovog integrala. Imamo

$$\begin{aligned}\left|I_w(f) - I_w\left(\hat{f}\right)\right| &= \left|\int_a^b w(x)\, f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b w(x)\,\hat{f}(x)\,\mathrm{d}x\right| \\ &\leq \left|\int_a^b w(x)\left(f(x) - \hat{f}(x)\right)\mathrm{d}x\right| \\ &\leq \int_a^b |w(x)|\left|f(x) - \hat{f}(x)\right|\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

Znamo da je

$$\left|f(x)-\hat{f}(x)\right| \leq \sup_{x\in[a,b]}\left|f(x)-\hat{f}(x)\right| = \left\|f-\hat{f}\right\|_\infty, \quad \forall x\in[a,b],$$

pa dobijemo

$$\left|I_w(f)-I_w\left(\hat{f}\right)\right| \leq \left\|f-\hat{f}\right\|_\infty \int_a^b |w(x)|\,\mathrm{d}x = \|w\|_1 \left\|f-\hat{f}\right\|_\infty \qquad \blacksquare$$

NAPOMENA. Ako za perturbiranu funkciju $\hat{f}$ uzmemo funkciju $\hat{f} : [a, b] \to \mathbb{R}$ definiranu s

$$\hat{f}(x) = f(x) + c\,\mathsf{sign}(w(x)),$$

onda je

$$\left\| f - \hat{f} \right\|_{\infty} = c,$$

a u ocjeni dobivamo jednakost, tj.

$$\left| I_w(f) - I_w\left(\hat{f}\right) \right| = c\,\|w\|_1 .$$

Vidimo da apsolutni broj uvjetovanosti za $I_w(f)$ ne ovisi o f, već samo o w.

Zamislimo sada da je $\hat{f}$ neka aproksimacija, a ne perturbacija funkcije f, koju želimo iskoristiti za približno računanje integrala $I_w(f)$. U to slučaju nejednakost

$$\left|I_w(f) - I_w\left(\hat{f}\right)\right| \leq \|w\|_1 \left\|f - \hat{f}\right\|_\infty$$

daje ocjenu apsolutne pogreške u integralu $I_w\left(\hat{f}\right)$ izraženu preko greške aproksimacije funkcije f u normi ∞.

Ono što stvarno želimo je dobiti niz aproksimacija integrala koji konvergira prema $I_w(f)$. Jedan od načina za to postići je izbor odgovarajućeg niza aproksimacija $\hat{f}_n,\ n \in \mathbb{N}$, funkcije f. Očito treba birati aproksimacije $\hat{f}_n$ za koje znamo da *uniformno aproksimiraju* funkciju f, jer tada vrijedi

$$\left\|f - \hat{f}\right\|_\infty \to 0,\ n \to \infty,$$

pa dobijemo

$$\left|I_w(f) - I_w\left(\hat{f}\right)\right| \to 0,\ n \to \infty.$$

Naravno da ove aproksimacije ovise o funkciji f, no nije nam cilj prilikom svake integracije posebno konstruirati novi niz aproksimacija. Poželjno bi bilo da svaku funkciju f za koju postoji $I_w(f)$ možemo aproksimirati nekim prostorom funkcija.

Weierstrassov teorem o uniformnoj aproskimaciji neprekidnih funkcija polinomima na konačnom intervalu $[a, b]$ sugerira da je za spomenuti prostor funkcija treba uzeti prostor polinoma $\mathcal{P}_d$ stupnja najviše d, pričemu d ovisi o n (čak i raste s n). Kao što se pokazuje, korisno je uzeti $d \neq n$.

Za praktičnu primjenu ovog pristupa moramo moći efektivno izračunati integral $I_w\left(\hat{f}\right)$ aproksimacijske funkcije, i to za bilo koju funkciju f za koju postoji $I_w\left(f\right)$. To se najlakše postiže tako da konstruiramo pripadnu integracijsku formulu I_n koja je egzaktna na cijelom prostoru polinoma $\mathcal{P}_d$. Dakle, uvjet egzaktnosti za I_n je

$$I_w\left(f\right) = I_n\left(f\right) \text{ ili } E_n\left(f\right) = 0, \quad \forall f \in \mathcal{P}_d.$$

Pri tom imamo **ocjenu greške** pripadne integracijske formule $I_n\left(f\right)$ za bilo koju f

$$\left|E_n\left(f\right)\right| = \left|I_w\left(f\right) - I_n\left(f\right)\right| = \left|I_w\left(f\right) - I_w\left(\hat{f}\right)\right| \leq \|w\|_1 \left\|f - \hat{f}\right\|_\infty .$$

5 Gaussove integracijske formule

Za razliku od Newton-Cotesovih formula, Gaussove integracijske formule su oblika

$$\int_a^b w\left(x\right) f\left(x\right) \mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f\left(x_i\right),$$

pri čemu točke integracije $x_1, \ldots, x_n$ nisu unaprijed zadane, nego se izračunaju tako da greška takve formula bude što manja.

Bitno je znati da se za neke važne težinske funkcije na određenim intervalima čvorovi i težine standardno tabeliraju u priručnicima. Evo nekih koje se često javljaju:

težinska funkcija w	interval	ime formule Gauss-*
1	$[-1, 1]$	Legendre
$1/\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 1. vrste
$\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 2. vrste
e^{-x}	$[0, \infty)$	Laguerre
e^{-x^2}	$(-\infty, \infty)$	Hermite

Glavni rezultat je sljedeći: ako zahtijevamo da formula integrira egzaktno polinome što je moguće većeg stupnja, onda su točke x_i u stvari nultočke polinoma koji su ortogonalni na intervalu (a, b) obzirom na težinsku funkciju w, a težine w_i mogu se eksplicitno izračunati po formuli

$$w_i = \int_a^b w(x)\, l_i(x)\, \mathrm{d}x, \quad i = 1, \ldots, n,$$

pri čemu su l_i polinomi Legrangeove baze definirani uvjetom

$$l_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

NAPOMENA. Kažemo da su funkcije $f, g : I \to \mathbb{R}$ **ortogonalne** na intervalu $(a, b) \subset I$ obzirom na težinsku funkciju $w : (a, b) \to \mathbb{R}$ ako vrijedi

$$\int_a^b w(x)\, f(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x = 0.$$

Slično kao i Newton-Cotesove integracijske formule, i Gaussove formule se mogu dobiti integracijom jedne vrste interpolacijskih polinoma, no u ovom slučaju se radi o Hermiteovim interpolacijskim polinomima. Takav pristup ekvivalentan je onomu da Gaussove formule integriraju egzaktno polinome što je moguće višeg stupnja, tj. da vrijedi

$$\int_a^b w(x)\, x^j \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^j, \quad j = 0, 1, \ldots, 2n-1.$$

Ovaj drugi pristup nas vodi do sustava s $2n$ jednadžbi i $2n$ nepoznanica x_k i w_k, no nepoznanice x_k ulaze u sustav nelinearno, pa je ovakav pristup težak: čak i dokaz da ovakav sustav ima jedinstveno rješenje nije jednostavan. Dakle, bolje je krenuti koristeći interpolacijske polinome.

Hermiteov interpolacijski polinom h_{2n-1} stupnja $2n-1$, koji u čvorovima integracije x_i interpolira vrijednosti $f_i = f(x_i)$, $i = 1, \ldots, n$, može se zapisati kao

$$h_{2n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} \Big([1 - 2(x - x_i)\, l_i'(x_i)]\, l_i^2(x)\, f_i + (x - x_i)\, l_i^2(x)\, f_i' \Big).$$

Integracijom dobijemo

$$\int_a^b w(x)\, h_{2n-1}(x)\, \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} (A_i f_i + B_i f_i').$$

gdje su

$$\begin{aligned} A_i &= \int_a^b w(x)\, [1 - 2(x - x_i)\, l_i'(x_i)]\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x, \\ B_i &= \int_a^b w(x)\, (x - x_i)\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x, \end{aligned}$$

za $i = 1, \ldots, n$.

Uočimo da se u integracijskoj formuli sada javljaju i dodatni članovi $B_i f_i'$ koji koriste i derivaciju funkcije f u čvorovima integracije, pa ovakva formula ne bi bila Gaussova.
Kada bi, kao kod Newton-Cotesovih formula, čvorovi integracije bili unaprijed zadani, iz uvjeta egzaktnosti bi se trebalo odrediti $2n$ nepoznatih parametara (težinskih koeficijenata) $A_i, B_i,\ i = 1, \ldots, n$. Shodno tomu, očekivali bismo da formula egzaktno integrira sve polinome najviše stupnja $2n - 1$. No za uporabu ove formule treba znati sve funkcijske vrijednosti u čvorovima, te još i sve vrijednosti prve derivacije funkcije u čvorovima.
To svakako želimo izbjeći.
Ideja je pokušati izbjeći korištenje derivacija, a to ćemo postići tako da odgovarajućim izborom čvorova x_i poništimo koeficijente B_i uz derivacije f_i'. Pri tom egzaktnost integracijske formule mora ostati ista (ostao je isti i broj nepoznatih parametara). Tako dobivena formula koristila bi samo vrijednosti funkcije f u čvorovima integracije, pa bi samim time bila Gaussova formula.

Može se pokazati da odgovarajućim izborom (različitih) čvorova x_i uvijek možemo poništiti koeficijente B_i, no za to nam je potrebno ponovno uvesti **polinom čvorova** (*node polynomial*) ω, koji ima nultočke u svim čvorovima integracije. On je zadan s

$$\omega(x) := (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n).$$

Očito je da ovaj polinom ima točno n jednostrukih nultočaka i da su to upravo čvorovi x_i. Sljedeća lema nam govori kako izabrati čvorove integracije.

LEMA. Ako je polinom ω zadan s

$$\omega(x) := (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

ortogonalan s težinom w na sve polinome nižeg stupnja, tj. ako vrijedi

$$\int_a^b w(x)\,\omega(x)\,x^i \mathrm{d}x = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n-1,$$

onda su svi koeficijenti B_i jednaki nula.

DOKAZ. Direktno se može provjeriti identitet

$$(x - x_i)\, l_i\,(x) = \frac{\omega\,(x)}{\omega'\,(x_i)}.$$

Supstiucijom ovog identiteta u izraz za B_i dobijemo

$$B_i = \frac{1}{\omega'\,(x_i)} \int_a^b w\,(x)\,\omega\,(x)\,l_i\,(x)\,\mathrm{d}x.$$

Kako je po pretpostavci ω ortogonalan s težinom w na sve polinome nižeg stupnja, a stupanj polinoma l_i je najviše $n - 1$, to tvrdnja odmah slijedi ■

NAPOMENA. Lako se vidi da vrijedi i obrat ove leme. Razlog je to što su funkcije l_i zaista baza prostora $\mathcal{P}_{n-1}$.

Važno je napomenuti da ortogonalni polinom s obzirom na težinsku funkciju w zaista i **postoji**, a jednoznačan je do na vodeći koeficijent. Mi ćemo, zbog oblika Gaussove formule, izabrati onoga s vodećim koeficijentom 1, pa će za nas on uvijek biti **jedinstven**.

Nadalje, može se pokazati da uvijet ortogonalnosti iz prethodne leme jednoznačno određuje raspored čvorova za Gaussovu integraciju. To je posljedica činjenice da polinom ω ima točno n jednostrukih nultočaka koje možemo samo permutirati, a uz standardni dogovor da je

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n,$$

one su jednoznačno određene.

Time smo dokazali da **postoji jedinstvena Gaussova integracijska formula** oblika

$$\int_a^b w(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)\,.$$

Čvorovi integracije x_i su nultočke ortogonalnog polinoma stupnja n na $[a, b]$ s težinskom funkcijom w, a težinske koeficijente w_i izračunamo iz

$$A_i = \int_a^b w(x)\,[1 - 2\,(x - x_i)\, l_i'(x_i)]\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x, \quad i = 1, \ldots, n.$$

No koristimo li uvjet ortogonalnosti, možemo dobiti i jednostavniju formulu. Naime, vrijedi

$$\begin{aligned} A_i &= \int_a^b w(x)\,[1 - 2\,(x - x_i)\, l_i'(x_i)]\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x \\ &= \int_a^b w(x)\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x - 2 l_i'(x_i)\, B_i = \int_a^b w(x)\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x. \end{aligned}$$

Dakle,

$$w_i = A_i = \int_a^b w\left(x\right) l_i^2\left(x\right) \mathrm{d}x.$$

Uočimo da je podintegralna funkcija w nenegativna,a l_i^2 je različit od nulpolinoma, pa desna strana jednakosti mora biti pozitivna. Dakle, *svi težinski koeficijenti u Gaussovoj integracijskoj formuli su pozitivni, što je vrlo bitno za numeričku stabilnost i konvergenciju*.

Zgodno je još primijetiti da vrijedi

$$w_i = \int_a^b w\left(x\right) l_i^2\left(x\right) \mathrm{d}x = \int_a^b w\left(x\right) l_i\left(x\right) \mathrm{d}x.$$

DOKAZ. Očito je to isto kao i dokazati

$$\int_a^b w(x)\, l_i^2(x)\, \mathrm{d}x - \int_a^b w(x)\, l_i(x)\, \mathrm{d}x = \int_a^b w(x)\, l_i(x)\, (l_i(x) - 1)\, \mathrm{d}x = 0.$$

Jer je $l_i(x_j) = \delta_{ij}$ to se polinom $l_i - 1$ poništava u točki x_i, pa mora sadržavati faktor $(x - x_i)$. Dakle,

$$l_i(x) - 1 = (x - x_i)\, q(x)\,, \quad \partial q = \partial l_i - 1 = n - 2.$$

Dakle,

$$l_i(x)\,(l_i(x) - 1) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_i)\,(x - x_i)}\,(l_i(x) - 1) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_i)} q(x)\,.$$

Zbog ortogonalnosti polinoma ω_n na sve polinome nižeg stupnja dobijemo

$$\int_a^b w(x)\, l_i(x)\, (l_i(x) - 1)\, \mathrm{d}x = \frac{1}{\omega'(x_i)} \int_a^b w(x)\, \omega(x)\, q(x)\, \mathrm{d}x = 0 \quad \blacksquare$$

PRIMJER. Neka je $w(x) = 1$ za sve $x \in (-1, 1)$ i $n = 3$. Odredimo čvorove integracije iz uvjeta ortogonalnosti. Dakle, potrebno je odrediti nultočke funkcije

$$\omega_3(x) = a + bx + cx^2 + x^3$$

za koju vrijedi

$$\int_{-1}^{1} \omega_3(x)\, x^i \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \left(a + bx + cx^2 + x^3\right) x^i \mathrm{d}x = 0, \quad i = 0, 1, 2.$$

Nakon integracije dobijemo sustav

$$\begin{aligned} 2a + \frac{2}{3}c &= 0 \\ \frac{2}{3}b + \frac{2}{5} &= 0 \\ \frac{2}{3}a + \frac{2}{5}c &= 0. \end{aligned}$$

Nakon rješavanja sustava imamo

$$a = 0, \;\; b = -3/5, \quad c = 0,$$

pa je

$$\omega_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x = \left(x + \sqrt{\frac{3}{5}}\right) x \left(x - \sqrt{\frac{3}{5}}\right),$$

a čvorovi integracije su

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Ovaj jednostavni primjer nam je samo ilustrirao način rada. Često možemo na analitički način doći do rezultata i kada se radi o nekim pecijalnim težinama, pa se mnogi rezultati nalaze kao već gotovi u standardnim priručnicima (vidi tablicu na početku sekcije). Ipak, za velike n poželjno je doći i do nekih dodatnih informacija o ortogonalnim polinomima, no mi ovdje nećemo ulaziti u to.

Na kraju napomenimo da nije moguće odabrati čvorove integracije i težinske koeficijenate tako da dobivena Gaussova kvadraturna formula s n čvorova bude egzaktna na polinomima stupnja $2n$. Naime, definiramo li polinom P_{2n} s

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

gdje su $x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ različiti čvorovi integracije, u najjednostavnijem slučaju $w = 1$ imamo

$$I(f) = \int_a^b P_{2n}(x) \, \mathrm{d}x > 0,$$

dok je

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i P_{2n}(x_i) = 0 \neq I(f) \,.$$