

1 Kwadratury wysokiego rzędu

Mając dostępne wartości funkcji f w n punktach a_1, a_2, \dots, a_n naturalne jest użycie przybliżenia zadanego wzorem:

$$\int_l^h f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(a_i).$$

Punkty a_i nazywamy węzłami kwadratury, liczby w_i wagami. Chcemy dobrać a_i oraz w_i tak by uzyskać możliwie dobrą dokładność. Prostym warunkiem jest by wzór dawał dokładną wartość dla wybranych funkcji. W szczególności chcemy by wzór był dokładny dla wielomianów stopnia mniejszego lub równego N z możliwie dużym N . Warunek dokładności na wielomianach stopnia mniejszego lub równego N daje nam $N + 1$ równań, powyżej mamy $2n$ parametrów (n wartości a_i i n wartości w_i), więc można liczyć że istnieje rozwiązanie gdy $N = 2n - 1$. Dalej otrzymamy odpowiedni wzór używając wielomiany ortogonalne. Dla uproszczenia większość rozważań będziemy prowadzić na przedziale $[-1, 1]$.

2 Podstawowe własności

Powiemy że wielomiany p_i są ortogonalne (na odcinku $[-1, 1]$) jeśli

$$\langle p_i, p_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{dla } i = j \\ 0 & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$$

gdzie

$$\langle p_i, p_j \rangle = \int_{-1}^1 p_i(x)p_j(x)dx.$$

Startując z ciągu x^i , $i = 0, 1, \dots$ procedura Gramma-Schmidta produkuje ciąg wielomianów ortogonalnych p_i takich że $\text{lin}\{x^i : i = 0, 1, \dots, n\} = \text{lin}\{p_i : i = 0, 1, \dots, n\}$. Przy tym p_i są wyznaczone jednoznacznie z dokładnością do znaku przez warunki wyżej. Niekiedy wygodnie jest pomnożyć te wielomiany przez stałe zależne od i . Jeśli stała jest dobrana tak by współczynnik przy najwyższej potędze był dodatni zaś

$$\langle p_i, p_i \rangle = \frac{2}{2i + 1}$$

to tak otrzymane wielomiany nazywa się wielomianami Legendre'a.

Lemat 2.1 *Jeśli q jest wielomianem stopnia co najwyżej $i - 1$ to*

$$\langle q, p_i \rangle = 0$$

Dowód: $q \in \text{lin}\{1, \dots, x^{i-1}\} = \text{lin}\{p_j : j = 0, \dots, i - 1\}$. Czyli

$$q = \sum_{j=0}^{i-1} c_j p_j.$$

Teraz

$$\langle q, p_i \rangle = \left\langle \sum_{j=0}^{i-1} c_j p_j, p_i \right\rangle = \sum_{j=0}^{i-1} c_j \langle p_j, p_i \rangle = 0$$

bo $\langle p_j, p_i \rangle = 0$ dla $j < i$. □

Kwadraturę Gaussa rzędu N definiujemy jako sumę

$$G_N(f) = \sum_{i=1}^N w_i f(a_i)$$

gdzie a_i są zerami p_N , zaś w_i są dobrane tak by wzór wyżej był dokładny dla wielomianów stopnia mniejszego niż N . Można to zrobić bo jak pokażemy później a_i są różne. Pokażemy też że $a_i \in (-1, 1)$, a więc w obliczeniach nie trzeba używać wartości f spoza odcinka.

Lemat 2.2 *Kwadratura Gaussa na N punktach jest dokładna dla wielomianów stopnia $\leq 2N - 1$.*

Dowód: Niech f będzie wielomianem stopnia $\leq 2N - 1$, zaś p_N będzie wielomianem ortogonalnym stopnia N . Dzieląc z resztą piszemy

$$f = qp_N + r$$

gdzie stopnie q i r nie przekraczają $N - 1$. Wtedy

$$\int f = \int (qp_N + r) = \langle q, p_N \rangle + \int r = \int r$$

gdzie $\langle q, p_N \rangle = 0$ na mocy Lematu 2.1.

Również

$$\sum_i w_i f(a_i) = \sum_i w_i (q(a_i)p_N(a_i) + r(a_i)) = \sum_i w_i r(a_i) = \int r$$

gdzie pomieliliśmy człony $q(a_i)p_N(a_i)$ bo a_i to zera p_N , zaś ostatnia równość wynika z wyboru w_i . □

Powyższy rachunki wyjaśniają też jak można było wymyśleć kwadraturę Gaussa. Mianowicie, zakładamy że kwadratura z węzłami a_i i wagami w_i jest dokładna dla wielomianów stopnia do $2n - 1$. Niech

$$W(x) = \prod_{i=1}^n (x - a_i)$$

będzie wielomianem stopnia n zerującym się w punktach a_i . Jeśli P jest wielomianem stopnia mniejszego lub równego $n - 1$ to nasza kwadratura ma dać dokładny wynik dla PW (który jest stopnia mniejszego lub równego $2n - 1$). Ale PW zeruje się w punktach a_i czyli suma przybliżająca całkę jest zerem. A więc

$$\int_{-1}^1 P(x)W(x)dx = 0$$

czyli W jest ortogonalny do wszystkich wielomianów stopnia mniejszego lub równego $n - 1$. Innymi słowy, kwadratura Gaussa jest jedyną możliwą kwadraturą dokładną dla wielomianów stopnia mniejszego lub równego $2n - 1$.

Rozważamy teraz operator M_x mnożenia przez x w $L^2([-1, 1])$, tzn.

$$(M_x f)(x) = xf(x).$$

M_x jest operatorem samosprzężonym, tzn.

$$\langle M_x f, g \rangle = \langle f, M_x g \rangle.$$

Niech $V_N = \text{lin}\{p_i : i = 0, \dots, N - 1\}$ będzie przestrzenią wielomianów stopnia nie przekraczającego $N - 1$. Niech P_N będzie operatorem rzutu ortogonalnego z $L^2([-1, 1])$ na V_N i niech

$$Tf = P_N M_x P_N$$

Lemat 2.3 Dla $f \in V_N$ mamy

$$Tf = xf \quad \text{mod } p_N$$

tzn. Tf to reszta z dzielenia xf przez p_N .

Dowód: Dla $f \in V_N$ mamy $P_N f = f$. xf jest wielomianem stopnia N , czyli dzieląc z resztą przez p_N mamy

$$xf = cp_N + r$$

Lecz $r \in V_N$, zaś p_N jest ortogonalne do V_N , czyli

$$P_N(xf) = r.$$

Teraz

$$Tf = P_N M_x P_N f = P_N(xf) = r = xf \quad \text{mod } p_N.$$

□

Lemat 2.4 Jeśli $q = \sum_j c_j x^j$ jest wielomianem to

$$q(T)f = \sum_j c_j T^j f = (qf) \quad \text{mod } p_N.$$

W szczególności $p_N(T) = 0$.

Dowód: Pierwszy wzór to prosta indukcja bazująca na Lemacie 2.3. Drugi wynika bezpośrednio z pierwszego. □

Lemat 2.5 T obcięte do V_N diagonalizuje się i ma wartości własne zawarte w przedziale $(-1, 1)$.

Dowód: T jest macierzą samosprzężoną, czyli diagonalizuje się i wartości własne T są rzeczywiste. Ponadto $T + I$ obcięty do przestrzeni V_N jest operatorem dodatnio określonym:

$$\begin{aligned}\langle (T + I)f, f \rangle &= \langle P_N M_x P_N f, f \rangle + \langle f, f \rangle = \langle M_x P_N f, P_N f \rangle + \langle f, f \rangle \\ &= \langle M_x f, f \rangle - \langle f, f \rangle = \int_{-1}^1 (x + 1)|f|^2(x) dx\end{aligned}$$

gdzie użyliśmy fakt że dla $f \in V_N$ mamy $P_N f = f$. Na przedziale $[-1, 1]$ zachodzi $x + 1 \geq 0$, czyli funkcja pod całką jest nieujemna. Ponadto jako wielomian nie może być stale równa zero dla niezerowego f . Czyli

$$\langle (T + I)f, f \rangle \geq 0$$

co oznacza że $T + I$ jest operatorem dodatnio określonym. Stąd wynika że wartości własne $T + I$ są dodatnie, czyli wartości własne T leżą w $(-1, \infty)$.

Podobnie pokazujemy że $-T + I$ jest dodatnio określony i że wartości własne T leżą w przedziale $(-\infty, 1)$. Łącznie wartości własne T leżą w przedziale $(-1, 1)$. \square

Lemat 2.6 *Jeśli wielomian q stopnia N ma zero wielokrotne (być może zespolone) to operator U na V_N zadany wzorem*

$$Uf = (xf) \pmod{q}$$

ma nietrywialną klatkę Jordana (nie diagonalizuje się). Jeśli a jest zerem q to a jest wartością własną U .

Dowód: Niech a będzie zerem wielokrotnym q . Zapiszmy q w postaci $q = (x - a)^j q_1$ gdzie $j > 1$. Bierzemy $h_i = (x - a)^i q_1$ dla $i = 0, \dots, j$. Wtedy

$$xh_i = (a + (x - a))h_i = ah_i + h_{i+1}$$

dla $i < j$. Przy tym dla $i < j$ stopień h_i jest mniejszy niż N , czyli $h_i \in P_N$. Zaś $h_j = q = 0 \pmod{q}$. A więc dla $j > 1$ mamy

$$\begin{aligned}(U - a)h_0 &\neq 0, \\ (U - a)^j h_0 &= 0\end{aligned}$$

czyli U nie diagonalizuje się.

Jeśli a jest zerem q to jak wyżej rozpatrujemy h_{j-1} (gdzie teraz $j > 0$, lecz może być równe 1). Mamy

$$(U - a)h_{j-1} = h_j = 0 \pmod{q}$$

czyli faktycznie a jest wartością własną zaś h_{j-1} odpowiednim wektorem własnym. \square

Lemat 2.7 *Zera p_N są pojedyncze i zawarte w przedziale $(-1, 1)$.*

Dowód: Z Lematu 2.3 wiemy że na V_N operator T jest zadany wzorem

$$Tf = xf \pmod{p_N}.$$

Gdyby p_N miał zero wielokrotne to na mocy Lematu 2.6 T nie mógłby się diagonalizować. Lecz na mocy Lematu 2.5 operator T diagonalizuje się na V_N , czyli zera p_N są pojedyncze. Na mocy Lematu 2.6 zera p_N są wartościami własnymi T które na mocy Lematu 2.5 leżą w $(-1, 1)$. \square

Lemat 2.8 *Wagi w_j kwadratury Gaussa są nieujemne. Zachodzi wzór*

$$w_j = \int_{-1}^1 l_j(x) dx$$

gdzie l_j jest wielomianem stopnia $N - 1$ takim że $l_j(a_j) = 1$, zaś $l_j(a_i) = 0$ dla $i \neq j$.

Dowód: Jako że l_j^2 jest wielomianem stopnia $2N - 2$ to kwadratura Gaussa jest dokładna dla l_j^2 , czyli

$$0 < \int_{-1}^1 l_j^2(x) dx = \sum_i w_i l_j^2(a_i) = w_j l_j^2(a_j) = w_j.$$

A więc $w_j > 0$. Podobnie, skoro l_j jest stopnia $N - 1$ to

$$\int_{-1}^1 l_j(x) dx = \sum_i w_i l_j(a_i) = w_j l_j(a_j) = w_j.$$

\square

3 Dalsze wzory, wagi

Lemat 3.1 *Wielomiany p_i spełniają równość*

$$p_i(x) = (-1)^i p_i(-x)$$

Dowód: Istnieją tylko dwa wielomiany w stopnia i ortogonalne do wszystkich wielomianów stopnia nie przekraczającego $n - 1$ i takie że

$$\langle w, w \rangle = \langle p_i, p_i \rangle$$

tzn. p_i oraz $-p_i$. Mianowicie ortogonalność wyznacza w z dokładnością do mnożenia przez stałą, a warunek wyżej na iloczyn skalarny pozostawia tylko dwie możliwe stałe. Teraz patrzymy że $w(x) = p_i(-x)$ spełnia warunek wyżej, tzn. jest ortogonalne do wielomianów stopnia nie przekraczającego $n - 1$ i

$$\langle w, w \rangle = \langle p_i, p_i \rangle$$

czyli $p_i(-x) = p_i(x)$ lub $p_i(-x) = -p_i(x)$. Porównując współczynnik przy najwyższej potędze dostajemy znak plus dla parzystego i oraz minus dla nieparzystego i co daje wynik. \square

Lemat 3.2 *Wielomiany p_n spełniają związek rekurencyjny postaci*

$$xp_n = a_np_{n+1} + b_np_{n-1}.$$

Dowód: Z lematu 2.3 dla $N = n + 1$ wiemy że

$$xp_n - a_np_{n+1} \in V_N$$

gdzie a_n jest dobrane tak by współczynnik przy x^{n+1} w $xp_n - a_np_{n+1}$ był równy 0. Czyli

$$xp_n - a_np_{n+1} = \sum_{i=0}^n c_{n,i}p_i$$

Mamy

$$\langle p_i, p_i \rangle c_{n,i} = \langle xp_n, p_i \rangle - a_n \langle p_{n+1}, p_i \rangle = \langle xp_n, p_i \rangle$$

gdzie ostatnia równość zachodzi bo p_{n+1} jest ortogonalne do p_i . Dalej

$$\langle xp_n, p_i \rangle = \langle p_n, xp_i \rangle.$$

Dla $i < n - 1$ wielomian xp_i ma stopień mniejszy od n czyli $c_{n,i} = 0$. Dla $i = n$ na mocy Lematu 3.1 p_n^2 jest funkcją parzystą, czyli xp_n^2 jest funkcją nieparzystą i

$$\langle xp_n, p_n \rangle = \int_{-1}^1 xp_n^2(x)dx = 0$$

czyli również $c_{n,n} = 0$. A więc mamy równość

$$xp_n - a_np_{n+1} = c_{n,n-1}p_{n-1}$$

co daje wynik z $b_n = c_{n,n-1}$. □

Lemat 3.3 *Zachodzi wzór Christoffela-Darboux:*

$$\sum_{i=0}^n c_i p_i(x)p_i(y) = d_n \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x - y}$$

gdzie $c_i = \frac{1}{\langle p_i, p_i \rangle}$, $d_i = c_i \frac{\alpha_i}{\alpha_{i+1}}$ zaś α_i jest współczynnikiem przy x^i w p_i .

Dowód. Odejmując wzór dla $n - 1$ od wzoru dla n widzimy że wzór Christoffela-Darboux jest równoważy równości

$$c_n p_n(x)p_n(y) = d_n \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x - y} - d_{n-1} \frac{p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)}{x - y}$$

czyli

$$c_n(x - y)p_n(x)p_n(y) = d_n(p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)) - d_{n-1}(p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y))$$

Lewą stronę możemy rozpisać jako

$$(c_n x p_n(x)) p_n(y) - p_n(x) (c_n y p_n(y)).$$

Prawą stronę możemy przekształcić następująco:

$$\begin{aligned} d_n(p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)) - d_{n-1}(p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)) = \\ (d_n p_{n+1}(x) + d_{n-1} p_{n-1}(x)) p_n(y) - p_n(x) (d_n p_{n+1}(y) + d_{n-1} p_{n-1}(y)). \end{aligned}$$

Porównując obie strony widać że wystarczy pokazać że

$$c_n x p_n(x) = d_n p_{n+1}(x) + d_{n-1} p_{n-1}(x)$$

i

$$c_n y p_n(y) = d_n p_{n+1}(y) + d_{n-1} p_{n-1}(y)$$

Drugą równość otrzymujemy z pierwszej podstawiając y zamiast x . Czyli wystarczy pokazać że

$$c_n x p_n = d_n p_{n+1} + d_{n-1} p_{n-1}.$$

W Lemacie 3.2 pokazaliśmy że

$$x p_n = a_n p_{n+1} + b_n p_{n-1}.$$

A więc wystarczy pokazać że $c_n a_n = d_n$ i że $c_n b_n = d_{n-1}$. Współczynnik a_n jest wyznaczony jednoznacznie przez warunek równości wyrazów z x^{n+1} . d_n jest dobrane tak że zachodzi równość współczynników przy x^{n+1} . Czyli faktycznie $c_n a_n = d_n$. A więc aby pokazać równość

$$c_n x p_n = d_n p_{n+1} + d_{n-1} p_{n-1}$$

wystarczy sprawdzić że iloczyny skalarny obu stron z p_{n-1} są równe. Lecz

$$\langle c_n x p_n, p_{n-1} \rangle = c_n \langle p_n, x p_{n-1} \rangle.$$

Na mocy już pokazanej równości $c_n a_n = d_n$, stosując ją dla $n-1$ mamy

$$c_{n-1} x p_{n-1} = d_{n-1} p_n + c_{n-1} b_{n-1} p_{n-2}$$

czyli

$$\begin{aligned} \langle c_n x p_n, p_{n-1} \rangle &= \frac{c_n}{c_{n-1}} \langle p_n, d_{n-1} p_n + c_{n-1} b_{n-1} p_{n-2} \rangle = \\ &= \frac{c_n d_{n-1}}{c_{n-1}} \langle p_n, p_n \rangle = \frac{d_{n-1}}{c_{n-1}} \end{aligned}$$

gdzie użyliśmy równość $c_n \langle p_n, p_n \rangle = 1$. Po prawej stronie liczymy

$$\langle d_n p_{n+1} + d_{n-1} p_{n-1}, p_{n-1} \rangle = d_{n-1} \langle p_{n-1}, p_{n-1} \rangle = \frac{d_{n-1}}{c_{n-1}}$$

gdzie ostatnia równość wynika z definicji c_{n-1} . A więc otrzymaliśmy równość iloczynów skalarnych, co kończy dowód. \square

Komentarz: Powyższy dowód jest rachunkowy i może wyglądać niezbyt intuicyjnie. Lecz znając Lemat 3.2 dość łatwo zauważyć że musi być proste wyrażenie dla $(x-y)p_n(x)p_n(y)$ i cały dowód sprowadza się do wyznaczenia współczynników w tym wyrażeniu. Standardową sztuczką jest porównywanie współczynników przy najwyższej potęgde, co zrobiliśmy. Dla wielomianów ortogonalnych iloczyny skalarne pomagają wyznaczać współczynniki i właśnie użyliśmy iloczyn skalarny do wyznaczenia drugiego współczynnika.

Lemat 3.4 *Zachodzi wzór*

$$(1-x^2)p_n' = \frac{-n\alpha_n}{\alpha_{n+1}}p_{n+1} + \frac{(n+1)c_{n-1}\alpha_{n-1}}{c_n\alpha_n}p_{n-1}$$

gdzie $c_i = \frac{1}{\langle p_i, p_i \rangle}$, zaś α_i jest współczynnikiem przy x^i w p_i .

Dowód: $(1-x^2)p_n'$ jest wielomianem stopnia $n+1$, a więc można go zapisać jako kombinację liniową p_i z $i \leq n+1$. Licząc iloczyn skalarny całkujemy przez części. $(1-x^2)p_i(x)$ jest zerem na końcach przedziału, więc wyrazy brzegowe znikają. Czyli

$$\begin{aligned} \langle (1-x^2)p_n', p_i \rangle &= \int_{-1}^1 p_n'(x)((1-x^2)p_i(x))' dx = - \int_{-1}^1 p_n(x)((1-x^2)p_i(x))' dx \\ &= - \langle p_n, ((1-x^2)p_i(x))' \rangle. \end{aligned}$$

Jeśli $i < n-1$ to $((1-x^2)p_i(x))'$ ma stopień mniejszy niż n i iloczyn wyżej znika. A więc $(1-x^2)p_n'$ jest kombinacją liniową p_{n+1} , p_n i p_{n-1} . Jednakże, z Lematu 3.1 wynika że p_n jest albo parzysty albo nieparzysty. Dla parzystego p_n wielomian $(1-x^2)p_n'$ jest nieparzysty i również p_{n+1} i p_{n-1} są nieparzyste. Czyli p_n nie pojawi się w wyrażeniu na $(1-x^2)p_n'$. Podobne rozumowanie działa dla nieparzystego p_n , więc $(1-x^2)p_n'$ jest kombinacją liniową p_{n+1} i p_{n-1} . Współczynnik przy p_{n+1} otrzymujemy porównując współczynniki przy najwyższych potęgach. Współczynnik przy p_{n-1} otrzymujemy zapisując $((1-x^2)p_i(x))'$ jako kombinację liniową p_i . W tej kombinacji p_n występuje ze współczynnikiem $-(n+1)\alpha_{n-1}/\alpha_n$. Czyli

$$\langle (1-x^2)p_n', p_{n-1} \rangle = - \langle p_n, ((1-x^2)p_{n-1})' \rangle = \frac{(n+1)\alpha_{n-1}}{\alpha_n} \langle p_n, p_n \rangle$$

Lemat 3.5 *Waga w_j kwadratury Gaussa z n węzłami wyraża się wzorem*

$$w_j = \frac{-1}{d_n p_{n+1}(a_j) p_n'(a_j)} = \frac{1}{d_{n-1} p_{n-1}(a_j) p_n'(a_j)} = \frac{2n+1}{c_n (1-a_j^2) (p_n'(a_j))^2}$$

gdzie d_n jest z Lematu 3.3.

Dowód: Przy ustalonym y mamy

$$\int_{-1}^1 \sum_{i=0}^n c_i p_i(x) p_i(y) p_0(x) dx = \sum_{i=0}^n c_i p_i(y) \langle p_i, p_0 \rangle = c_0 p_0(y) \langle p_0, p_0 \rangle = p_0(y)$$

A więc z wzoru Christoffela-Darboux

$$p_0(y) = \int_{-1}^1 d_n \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x-y} p_0(x) dx.$$

Dla $y = a_j$ dostaniemy

$$p_0(a_j) = -p_{n+1}(a_j) \int_{-1}^1 d_n \frac{p_n(x)}{x-a_j} p_0(x) dx.$$

Uwzględniając że p_0 jest wielomianem stałym powyższe upraszcza się do

$$1 = -d_n p_{n+1}(a_j) \int_{-1}^1 \frac{p_n(x)}{x-a_j} dx.$$

Teraz niech l_j będzie wielomianem z Lematu 2.8 (z $N = n$). Wielomian $(x - a_j)l_j$ jest stopnia n i ma te same zera co p_n , a więc jest wielokrotnością p_n , czyli $(x - a_j)l_j = \lambda p_n$. Obliczając pochodną mamy

$$((x - a_j)l_j)' = l_j + (x - a_j)l_j'$$

czyli $((x - a_j)l_j)'(a_j) = l_j(a_j) = 1$. A więc

$$p_n'(a_j)l_j(x) = \frac{p_n(x)}{x-a_j}.$$

Wstawiając to do wzoru wyżej mamy

$$1 = -d_n p_{n+1}(a_j) \int_{-1}^1 p_n'(a_j)l_j(x) dx$$

czyli dzięki Lematowi 2.8

$$w_j = \int_{-1}^1 l_j(x) dx = \frac{-1}{d_n p_{n+1}(a_j) p_n'(a_j)}$$

co daje pierwszy wzór.

Aby otrzymać drugi wzór stosujemy wzór Christoffela-Darboux z $n - 1$ otrzymując

$$1 = d_{n-1} p_{n-1}(a_j) \int_{-1}^1 \frac{p_n(x)}{x-a_j} dx.$$

Porównując z poprzednim dowodem widzimy że

$$-d_n p_{n+1}(a_j) = d_{n-1} p_{n-1}(a_j)$$

co daje drugi wzór.

Uwzględniając postać d_n wzór z Lematu 3.4 można zapisać jako

$$(1 - x^2)p_n' = \frac{1}{c_n} (-nd_n p_{n+1} + (n+1)d_{n-1} p_{n-1}).$$

Razem z równością $-d_n p_{n+1}(a_j) = d_{n-1} p_{n-1}(a_j)$ daje to

$$(1 - x^2)p_n'(a_j) = \frac{1}{c_n} (nd_{n-1} p_{n-1}(a_j) + (n+1)d_{n-1} p_{n-1}) = \frac{2n+1}{c_n} d_{n-1} p_{n-1}$$

czyli

$$\begin{aligned}\frac{c_n}{2n+1}(1-x^2)p'_n(a_j) &= d_{n-1}p_{n-1} \\ &= \frac{2}{(1-a_j^2)(p'_n(a_j))^2}\end{aligned}$$

co po podstawieniu do drugiego wzoru daje trzeci wzór. \square

Uwaga: Wielomiany Legendre'a p_n znormalizowaliśmy tak by

$$\langle p_i, p_i \rangle = \frac{2}{2i+1}$$

czyli

$$c_i = \frac{2i+1}{2}$$

podstawiając to do trzeciego wzoru z Lematu 3.5 dostajemy wzór

$$w_i = \frac{2}{(1-a_j^2)(p'_n(a_j))^2}$$

stosowany w programie przykładowym `ex_gauss.input`.

Komentarz. Dla kompletności należałoby powiedzieć jak można obliczać wielomiany p_n . Bezpośrednie użycie procedury Gramma-Schmidta działa, ale jest prostsza metoda: wielomiany można obliczać rekurencyjnie bazując na Lemacie 3.2. Łatwo sprawdzić że $p_0 = 1$, $p_1 = x$ zaś kolejne obliczamy jako

$$p_{n+1} = \frac{1}{a_n}(xp_n - b_np_{n-1}).$$

Wymaga to znajomości współczynników a_n i b_n . Wynoszą one

$$a_n = \frac{n+1}{2n+1}$$

$$b_n = \frac{n}{2n+1}.$$

Bez znajomości a_n i b_n też można użyć Lemat 3.2, wtedy w każdym kroku musimy obliczać iloczyn skalarny i przy jego pomocy wyznaczamy b_n . a_n zależy od przyjętej normalizacji, przy normalizacji przy pomocy c_n trzeba obliczać drugi iloczyn skalarny. Takie użycie Lematu 3.2 ciągle jest tańsze niż naiwna procedura Gramma-Schmidta startująca z x^i .

Wyniki części pierwszej i wiele wyników tej części stosuje się w ogólniejszej sytuacji gdy

$$\langle p_i, p_j \rangle = \int_a^b p_i(x)p_j(x)w(x)$$

gdzie $w(x) \geq 0$ na $[a, b]$, dla każdego i

$$\int_a^b |x|^i w(x) dx < \infty$$

i $w(x)$ jest niezerowe. Zarówn a jak i b mogą być nieskończone. Klasyczne przykłady to $w(x) = \exp(-x^2)$ na $(-\infty, \infty)$, $w(x) = x^\alpha \exp(-x)$ dla $\alpha > -1$ na $(0, \infty)$, $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ dla $\alpha, \beta > -1$ na $(-1, 1)$.

Bardziej ogólnie, można rozpatrywać skończone miary dodatnie μ takie że

$$\int_a^b |x|^i d\mu(x) < \infty.$$

Aby dostać nieskończony ciąg wielomianów trzeba zakładać że miara nie jest skupiona na skończonym zbiorze punktów, w przeciwnym razie ciąg się urywa.

Klasyczny przykład tego typu to miara odpowiadająca sumowaniu,

$$\mu = \sum_{n=1}^{\infty} n^\alpha \lambda^n$$

dla $\alpha \in \mathbb{R}$ i $\lambda \in (0, 1)$. Wtedy

$$\int f(x) d\mu(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n^\alpha \lambda^n f(n).$$

Klasyczny przykład dla miary na zbiorze skończonym to wielomiany Grama używane przy obliczaniu przybliżeń średniokwadratowych.

4 Oszacowanie błędu

Klasycznie szacuje się błąd dla kwadratury Gaussa na n punktach przez wielkość pochodnej rzędu $2n$ z całkowanej funkcji. Dokładniej, błąd nie przekracza

$$\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{2n+1)((2n)!)^3} \sup_{x \in [-1, 1]} |f^{(2n)}|.$$

To oszacowanie jest dość dokładne, ale kłopotliwe w użyciu. W szczególności nie jest całkiem jasne jak błąd zachowuje się ze wzrostem n . Poniżej pokażemy mniej dokładne oszacowanie w terminach przedłużenia zespolonego f , które jest prawie tak dobre dla regularnych f , ma prostą zależność od n i pozwala lepiej zrozumieć jak nieregularność f wpływa na błąd.

Oszacowanie używa funkcji analitycznych. W pewnym sensie funkcji analityczne to najbardziej regularne funkcje pojawiające się w analizie. Podamy tu kilka własności funkcji analitycznych

Lemat 4.1 *Niech funkcja f będzie różniczkowalna w sensie zespolonym na zbiorze $S = \{z : |\Im(z)| < r\}$ i spełnia ograniczenie $|f(z)| \leq M$ dla $z \in S$. Wtedy dla $t \in \mathbb{R}$ zachodzi*

$$|f^{(n)}(t)| \leq \frac{Mn!}{r^n}$$

gdzie $f^{(n)}$ oznacza pochodną rzędu n . Odwrotnie, jeśli funkcja zespolona f zmiennej rzeczywistej spełnia oszacowanie wyżej, to przedłuża się jednoznacznie do funkcji różniczkowalnej w sposób zespolony na zbiorze S spełniającej oszacowanie

$$|f(z)| \leq \frac{M}{1 - \frac{|\Im(z)|}{r}}$$

Lemat 4.2 Jeśli $r < 1$ zaś f jest analityczna dla $r \leq |z| \leq 1/r$ i dla tych z spełnia $|f(z)| \leq M$ to można zapisać

$$f(z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j z^j$$

gdzie współczynniki c_j spełniają

$$|c_j| \leq M r^{|j|}$$

Dowód: Istnienie takiego rozwinięcia to standardowy wynik analizy zespolonej. Pokażemy oszacowanie. Współczynnik c_j można wyliczyć wzorem

$$c_j = \frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=s} f(z) z^{-j} dz$$

gdzie wynik nie zależy od s o ile $r < s \leq 1/r$. Wchodząc z wartością bezwzględną pod znak całki mamy

$$|c_j| \leq \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |f(s \exp(it))| s^{-j} dt \leq \frac{1}{2\pi} s^{-j} \int_0^{2\pi} M dt = M s^{-j}.$$

Ponieważ nierówność zachodzi dla dowolnego $s \in (r, 1/r)$ mamy

$$|c_j| \leq \inf_{s \in (r, 1/r)} M s^{-j} = M r^{|j|}$$

co daje wynik. □

Lemat 4.3 Jeśli f spełnia założenia Lematu 4.2, c_j są jak w tym lemacie zaś N jest nieujemną liczbą całkowitą to dla z takich $|z| = 1$ mamy

$$|f(z) - \sum_{j=-N}^N c_j z^j| \leq \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}.$$

Dowód:

$$|f(z) - \sum_{j=-N}^N c_j z^j| = \left| \sum_{|j|>N} c_j z^j \right| \leq \sum_{|j|>N} M r^{|j|} = 2 \sum_{j=N+1}^{\infty} M r^j = \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}.$$

□

Lemat 4.4 Dla $r < 1$, odwzorowanie $z \mapsto \frac{1}{2}(z + \frac{1}{z})$ odwzorowuje pierścień $r < |z| < 1/r$ na wnętrze elipsy o środku w 0 zadanej równaniem

$$4(r - 2 + r^{-1})x^2 + 4(r + 2 + r^{-1})y^2 = (r^{-1} - r)^2$$

gdzie x to część rzeczywista zaś y to część urojona. Ta elipsa ma rzeczywistą półoś długości

$$l_x = \frac{(r^{-1} - r)}{2(r^{-1/2} - r^{1/2})}$$

zaś urojoną półoś długości

$$l_y = \frac{(r^{-1} - r)}{2(r^{-1/2} + r^{1/2})}.$$

Dowód pominiemy, są to proste lecz długie rachunki. Główną część rachunków daje się wykonać przy pomocy komputera, lecz wyjaśnienie szczegółów wychodzi poza ramy tego wykładu.

Istotne dla nas jest że dla $r < 1$ lecz bliskich 1 w przybliżeniu $l_y \approx (1-r)/2$ zaś $l_x \approx 1 + (1-r)^2/2$.

Lemat 4.5 Dla $z = x + iy$ gdzie x to część rzeczywista zaś y to część urojona, przy $|z| = 1$ mamy $x = \frac{1}{2}(z + z^{-1})$. Ponadto

$$(z^j + z^{-j})$$

jest wielomianem stopnia j od x (jest to wielokrotność wielomianu Czebyszewa).

Dowód. Jeśli $|z| = 1$ to $z^{-1} = x - iy$ co daje pierwszą równość. To że $(z^j + z^{-j})$ jest wielomianem od x stopnia j udowodnimy indukcyjnie. Dla $j = 0$ dostajemy stałą 2, czyli wielomian stopnia 0, dla $j = 1$ dostaniemy z pokazanej równości $2x$, czyli wielomian stopnia 1. Dla $j > 1$ mamy

$$(2x)^j = (z + z^{-1})^j = z^j + z^{-j} + \sum_{k=0}^{j-1} c_k (z^k + z^{-k}).$$

Z założenia indukcyjnego $(z^k + z^{-k})$ jest wielomianem od x stopnia k , czyli

$$z^j + z^{-j} = (2x)^j - \sum_{k=0}^{j-1} c_k (z^k + z^{-k})$$

też jest wielomianem od x . □

Uwaga: Wielomiany Czebyszewa często definiuje się jako $T_n = \cos(n \arccos(x))$. Odpowiada to zapisaniu $z = \exp(i \arccos(x))$. Wtedy

$$\frac{1}{2}(z^j + z^{-j}) = \frac{\exp(ij \arccos(x)) + \exp(-ij \arccos(x))}{2} = \cos(j \arccos(x))$$

co z dokładnością do współczynnika przy x^n zgadza się z naszym określeniem.

Lemat 4.6 Jeśli $r < 1$, f jest analityczna we wnętrzu elipsy z Lematu 4.4, i we wnętrzu tej elipsy $|f(z)| \leq M$, $N \geq 0$ jest liczbą całkowitą, to istnieje wielomian u zmiennej x stopnia N taki że dla $x \in [-1, 1]$ mamy

$$|f(x) - u(x)| \leq \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}$$

Dowód: Niech $h(z) = f(\frac{1}{2}(z + z^{-1}))$. Na mocy Lematu 4.4 funkcja $h(z)$ jest analityczna dla $r < |z| < 1/r$. Stosując do h Lemat 4.3 widzimy że istnieją c_j takie że dla $|z| = 1$ mamy

$$|h(z) - \sum_{j=-N}^N c_j z^j| \leq \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}.$$

Ze względu na to że $h(z^{-1}) = h(z)$ mamy $c_{-1} = c_j$. A więc na mocy Lematu 4.5 dla $|z| = 1$ sumę

$$\sum_{j=-N}^N c_j z^j = \sum_{j=0}^N c_j (z^j + z^{-j})$$

można zapisać jako wielomian od x . Daje to szukane u . □

Lemat 4.7 *Jeśli $r < 1$, f jest analityczna we wnętrzu elipsy z Lematu 4.4, i we wnętrzu tej elipsy $|f(z)| \leq M$ to błąd kwadratury Gaussa na N punktach można oszacować jako*

$$|\int_{-1}^1 f(x)dx - \sum_{j=1}^N w_j f(a_j)| \leq \frac{8Mr^{2N}}{1-r}$$

Dowód. Suma wag kwadratury Gaussa to 2 (tyle musi być by całka stałej się zgadzała). Z Lematu 2.8 wagi są dodatnie, a więc jest to też suma wartości bezwzględnych. Kwadratura Gaussa jest dokładna dla wielomianów stopnia nie przekraczającego $2N - 1$. Stosując Lemat 4.6 dla $2N - 1$ dostaniemy wielomian u stopnia nie przekraczającego $2N - 1$ taki że biorąc $h(x) = f(x) - u(x)$ mamy

$$|h(x)| \leq \frac{2Mr^{2N}}{1-r}.$$

Teraz

$$\begin{aligned} |\int_{-1}^1 f(x)dx - \sum_{j=1}^N w_j f(a_j)| &= |\int_{-1}^1 h(x)dx - \sum_{j=1}^N w_j h(a_j)| \leq \\ &|\int_{-1}^1 h(x)dx| + |\sum_{j=1}^N w_j h(a_j)| \leq 2 \cdot 2 \frac{2Mr^{2N}}{1-r} = \frac{8Mr^{2N}}{1-r} \end{aligned}$$

gdzie zastąpiliśmy h przez oszacowanie jej wartości bezwzględnej. □

Oszacowanie z Lematu 4.7 jest bardzo dobre dla r niezbyt bliskich 1, innymi słowy jeśli f jest funkcją analityczną we wnętrzu dostatecznie dużej elipsy. Gdy taka elipsa jest mała, to oszacowanie daje słaby wynik. W najgorszym przypadku, jeśli f ma osobliwość na osi rzeczywistej to elipsa redukuje się do odcinka i nasze oszacowanie nic nie daje.

5 Kwadratury adaptacyjne

Na końcu poprzedniej części powiedzieliśmy że jeśli f jest mało regularna (analityczna w małej elipsie lub mająca osobliwość) to nasze oszacowanie jest słabe. Można wtedy podać lepsze oszacowania, ale problem jest rzeczywisty: dla nieregularnych f błąd może być duży. Prostym rozwiązaniem jest podział odcinka na części, zastosowanie kwadratury Gaussa na każdej części z osobna i dodanie wyników (podobnie jak w metodzie prostokątów czy Simpsona). Jednakże podział na dużą ilość części znacznie podnosi koszt obliczeń. Nasze oszacowanie pokazuje że jeśli odcinek jest w miarę daleko od osobliwości to błąd jest bardzo mały i nie ma potrzeby dalszego podziału takiego odcinka. Podejście adaptacyjne polega na wielokrotnych podziałach. W każdym kroku szacujemy błąd. Najprostsze oszacowanie błędu polega na dwukrotnym wykonaniu obliczenia, np. na danym odcinku i przez podział na dwie połowy. Drugie obliczenie powinno być dokładniejsze, a różnica daje dobre oszacowanie błędu mniej dokładnego obliczenia. Jeśli oszacowany błąd jest zbyt duży to odcinek dzielimy na części np. dwie połowy i na każdej części z osobna powtarzamy procedurę. Jeśli funkcja jest wszędzie nieregularna to taka procedura nic nie daje w porównaniu z równomiernym podziałem. Ale jeśli ma tylko kilka punktowych osobliwości, to wtedy w pobliżu osobliwości będziemy używać krótkie przedziały, a dalej długie, co prowadzi do sporej oszczędności. Np. jeśli jest osobliwość dla $x = 1$, to można użyć przedziały $[-1, 0]$, $[0, 1/2]$, $[1/2, 3/4]$, $[3/4, 7/8]$ itd. Na każdym z tych przedziałów relatywna odległość do osobliwości jest taka sama i miarę duża, a więc oczekujemy dużej dokładności. Jak użyjemy $n + 1$ przedziałów to dwa ostatnie będą postaci $[1 - 2^{-n+1}, 1 - 2^{-n}]$ i $[1 - 2^{-n}, 1]$. czyli długości 2^{-n} . Możemy oczekiwać że błąd na tych przedziałach będzie rzędu 2^{-n} , a na pozostałych mniejszy lub porównywalny. Innymi słowy używając n przedziałów możemy osiągnąć łączną dokładność rzędu 2^{-n} . Jest to znacznie lepszy wynik od podziału jednostajnego który dla porównywalnej dokładności wymagałby 2^{n+1} przedziałów.

Skuteczność kwadratury adaptacyjnej polega na możliwości wykrycia osobliwości z zachowania funkcji stosunkowo daleko od osobliwości. Jest tak np. dla osobliwości typu algebraicznego, jak $f(x) = (1 - x)^\alpha$ czy gdy funkcja jest sklejana z części i każda część zajmuje dostatecznie dużą część odcinka, jak dla $f(x) = |x|$ na $[-1, 1]$. W praktyce kwadratury adaptacyjne działają dobrze dla dużych klas funkcji. Jednakże, jeśli f ma osobliwość na małej części odcinka a na reszcie pokrywa się z bardzo regularną funkcją g to kwadratura adaptacyjna widzi tylko te punkty gdzie f jest regularna i daje taki sam wynik jak dla g . Jednakże mała część może ciągle oznaczać błąd który jest znacznie większy niż błąd dla regularnych funkcji. Dokładniej, jeśli kwadratura adaptacyjna używa n punktów to może nie zauważyć nieregularności na odcinku długości rzędu $1/n$. Jeśli f jest klasy C^1 to nieregularność na takim odcinku może dać błąd rzędu $1/n^2$. Prosty przykład tego typu pojawił się w zadaniach, na $[0, 1]$ przy małym $a > 0$ biorąc $f(x) = \sin(|x - a|)$ dostajemy funkcję która ma osobliwość (nieciągłą pochodną) w pobliżu końca odcinka. Dla dostatecznie małych a kwadratura Gaussa nie odróżni f od $\sin(x)$. Aby to lepiej zobaczyć dobrze sobie narysować punkty w których kwadratura Gaussa oblicza wartości f , zmiana f w innych punktach może dość znacznie zmienić funkcję ale kwadratura Gaussa da ten sam wynik.

Jeśli funkcja f ma znane osobliwości to można stosować specjalizowane kwadratury, np. z góry podzielić przedział w punktach sklejenia f . Dla osobliwości typu x^α można potraktować x^α jako wagę (czy część wagi) i użyć wagowej wersji kwadratury Gaussa. Dla klasycznych przypadków prowadzi to do bardziej wydajnych obliczeń niż kwadratura adaptacyjna.

Jeśli funkcja f ma osobliwości w małych częściach odcinka i nie wiemy gdzie te osobliwości są położone, to nie ma rady, jedyne wyjście to obliczanie f w dostatecznie wielu punktach.

Prostą wersję kwadratury adaptacyjnej łatwo zaimplementować rekurencyjnie, dzieląc odcinek

i zatrzymując podział gdy błąd nie przekracza zadanej wielokrotności długości odcinka. W takiej wersji dobrze jest wprowadzić ograniczenie na głębokość rekursji, bo na bardzo krótkich odcinkach błąd zaokrąglenia nie pozwoli na osiągnięcie zadanej dokładności. Sprytniejsza wersja używałaby kolejkę, dzieląc najpierw te odcinki które dają największy wkład do szacowanego błędu i zatrzymując podziały gdy suma oszacowanych błędów jest dostatecznie mała. Wersja rekursywna nie wie jaki jest błąd na innych przedziałach i dlatego musi używać bardziej pesymistyczną regułę wymagającą by błąd na każdym odcinku był zadaną wielokrotnością jego długości. Wersja z kolejką może pozwolić na duży błąd względny na niewielkiej liczbie krótkich odcinków.

5.1 Wariant Kronroda

Kwadratura Gaussa wyższego rzędu używa zupełnie inne punkty niż kwadratura Gaussa niższego rzędu. Czyli by obliczyć kwadraturę Gaussa na m punktach i kwadraturę Gaussa na n punktach potrzebujemy $n + m$ wartości całkowanej funkcji. Czyli dla $m < n$, szacując błąd przez porównanie kwadratur dwu różnych rzędów lepsza wartość jest dokładna na wielomianach stopnia $2n - 1$, zaś koszt jest $m + n$ obliczeń funkcji. Metoda sugerowana wyżej, choć bardzo prosta jest nieco gorsza: przedział i dwa podprzedziały wymagają $3n$ punktów. Jeśli przedział trzeba podzielić to każdy następny podział ma do dyspozycji wcześniej obliczoną wartość dla przedziału, zaś musi wykonać obliczenia dla dwu podprzedziałów, czyli przedziały otrzymane przez podział wymagają $2n$ punktów by uzyskać dokładną wartość na wielomianach stopnia $2n - 1$.

Kronrod zauważył, że przy podobnym nakładzie pracy można podnieść dokładność lepszego przybliżenia. Mianowicie, mając n punktów z kwadratury Gaussa można dodać $n + 1$ punktów tak by otrzymana z tych $2n + 1$ punktów kwadratura była dokładna na wielomianach stopnia $3n + 1$.

6 Funkcje okresowe i metoda prostokątów

Dla funkcji okresowych naturalne jest zastąpienie wielomianów przez wielomiany trygonometryczne, tzn. chcemy by wzór całkowania numerycznego na przedziale $[-\pi, \pi]$ był dokładny dla $\exp(ikx)$ gdzie i jest jednostką urojoną zaś k przebiega liczby całkowite od $-N$ do N . Łatwo sprawdzić że używając $N + 1$ równoodległych punktów i równe wagi dostaniemy wzór dokładny dla k z powyższego zakresu.

Załóżmy teraz że wzór całkowania na $N + 1$ punktach a_l jest dokładny dla $\exp(ikx)$ z $k = -N, \dots, N$. Niech

$$W(x) = \prod_{l=0}^N (\exp(ix) - \exp(ia_l)) = \sum_{k=0}^{N+1} c_k \exp(ikx).$$

$W(x)$ zeruje się w punktach a_l , czyli dla $\exp(ijx)W(x)$ wzór całkowania numerycznego da nam zero. Dla $j = -N, \dots, -1$ w wyrażeniu na $\exp(ijx)W(x)$ pojawiają się tylko eksponenty z indeksami z przedziału $-N, N$, czyli wzór ma być dokładny, czyli

$$\int_{-\pi}^{\pi} \exp(ijx)W(x)dx = 0$$

Eksponenty z urojonym argumentem są ortogonalne, czyli w wyrażeniu na $W(x)$ współczynniki c_k są równe 0 dla $k = 1, \dots, N$. Czyli

$$W(x) = \exp(i(N + 1)x) + c_0$$

co oznacza że punkty są równo rozłożone. Jedyną swobodą to cykliczne przesunięcie całego układu punktów. Warunek na dokładność wyznacza też wagi, muszą one być równe.

Lemat 4.3 można użyć do oszacowania błędu. Dokładniej, dla funkcji okresowych mamy następujący wariant:

Lemat 6.1 *Jeśli funkcja f jest okresowa z okresem 2π , analityczna w pasie $-C \leq \Im(x) \leq C$ i w tym pasie $|f(z)| \leq M$ to dla rzeczywistych z zachodzi*

$$|f(z) - \sum_{j=-N}^N c_j \exp(ijz)| \leq \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}$$

gdzie $r = \exp(-C)$ zaś

$$c_j = \int_{-\pi}^{\pi} \exp(-ijx) f(x) dx$$

Dowód: Niech $h(z) = f(i \log(z))$. Logarytm z jest zdefiniowany dla $z \neq 0$ z dokładnością do całkowitej wielokrotności $2\pi i$. Jako że f jest okresowa to wybór logarytmu nie wpływa na wartość h . h jest funkcją analityczną dla $r \leq |z| \leq 1/r$ gdzie r jest jak wyżej i dla tych z mamy $|h(z)| \leq M$. A więc do h stosuje się Lemat 4.3. Oczywiście mamy $f(z) = h(\exp(iz))$. Łatwo też sprawdzić że c_j z Lematu 4.3 są zadane wzorem z obecnego lematu, a więc obecna nierówność wynika natychmiast z Lematu 4.3. \square

Z lematu wynika oszacowanie dla błędu metody prostokątów:

Lemat 6.2 *Jeśli f spełnia założenia lematu wyżej, to*

$$|\int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx - \frac{2\pi}{N+1} \sum_{j=0}^N f(\frac{j2\pi}{N+1})| \leq 2\pi \frac{2Mr^{N+1}}{1-r}$$

Dowód: Dla

$$S = \sum_{j=-N}^N c_j \exp(ijz)$$

mamy błąd zero. Przy tym człon z c_0 daje całkę z f . A więc błąd szacujemy jako

$$\begin{aligned} |\frac{2\pi}{N+1} \sum_{j=0}^N (f - S)(\frac{j2\pi}{N+1})| &\leq \frac{2\pi}{N+1} \sum_{j=0}^N |(f - S)(\frac{j2\pi}{N+1})| \\ &\leq 2\pi \frac{2Mr^{N+1}}{1-r} \end{aligned}$$

\square

A więc pokazaliśmy że dla funkcji okresowych metoda prostokątów jest nieskończonego rzędu (i pewnym sensie jest najlepszą metodą).

7 Kwadratura Romberga

Inną metodą otrzymania kwadratury wysokiego rzędu jest metoda Romberga. Mianowicie, niech $T_n(f)$ oznacza wynik metody trapezów na $n + 1$ punktach (tzn. używając podział odcinka na n części). Kwadratura $T_{2^{k+1}}$ używa $2^{k+1} + 1$, z czego $2^k + 1$ to punkty używane przez kwadraturę T_{2^k} , zaś 2^k to dodane punkty (środki przedziałów używanych przez T_{2^k}). A więc kwadratury $T_1, T_2, T_4, \dots, T_{2^k}$ można obliczyć praktycznie takim samym kosztem jak samą kwadraturę T_{2^k} . Metoda Romberga tworzy kombinację liniową $T_1, T_2, T_4, \dots, T_{2^k}$ tak by uzyskać dokładny wynik dla wielomianów stopnia $2k + 1$. Kwadratura Romberga zachowuje się dość dobrze, lecz wymaga więcej punktów niż kwadratura Gaussa.

8 Metoda podwójnie wykładnicza

Uzasadnialiśmy że metoda prostokątów jest metodą nieskończonego rzędu dla funkcji nieokresowych. Z teoretycznego punktu widzenia można też rozważać metodę prostokątów dla funkcji nieokresowych na całej prostej. Wymaga to nieskończonej sumy (dlatego jest to metoda czysto teoretyczna):

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \approx h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh)$$

Można pokazać że przy odpowiednich założeniach na f jest to najdokładniejsza metoda całkowania numerycznego. Praktyczny wariant dostaniemy zakładając że f bardzo szybko zbiega do 0 gdy argument dąży do $\pm\infty$. Wtedy sumę nieskończoną można z dużą dokładnością przybliżyć skończoną sumą. Założenie o tym że f bardzo szybko zbiega do 0 wydaje się bardzo ograniczające. Lecz dla h na odcinku $[-1, 1]$ można użyć zamianę zmiennych

$$f(t) = h(\phi(t))$$

gdzie $\phi(t) = \tanh(\frac{\pi}{2} \sinh(t))$. ϕ odwzorowuje prostą rzeczywistą w odcinek $(-1, 1)$. Ze wzoru na zamianę zmiennych

$$\int_{-1}^1 h(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \phi'(t) dt.$$

Wyżej $\phi'(t)$ bardzo szybko zbiega do zera dla $t \rightarrow \pm\infty$, czyli całkę po prawej stronie można z dużą dokładnością przybliżyć przez skończoną sumę z metody prostokątów. Ze względu na to że $\phi'(t) \approx \exp(-c \exp(|t|))$ metodę tą nazywa się metodą podwójnie wykładniczą. Metoda to zachowuje się dość dobrze jeśli h ma potęgowe osobliwości na końcach przedziału, co pozwala niekiedy stosować ją zamiast kwadratur z wagami.