Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Σταμάτης Σταματιάδης
stamatis@materials.uoc.gr

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών,
Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΕΝΑΤΗ ΔΙΑΛΕΞΗ

Μαθηματικό Πρόβλημα

Για μια συνεχή συνάρτηση μίας πραγματικής μεταβλητής, $f(x)$, θέλουμε να υπολογίσουμε το

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

όταν δεν υπάρχει ή είναι πολύ δύσχρηστος ο τύπος της αντιπαραγώγου της $f(x)$.

Λύση

Έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι που υπολογίζουν αριθμητικά το ολοκλήρωμα ως γραμμικό συνδυασμό τιμών της $f(x)$ σε διάφορα σημεία:

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

Αν τα σημεία x_i ισαπέχουν, προκύπτουν οι μέθοδοι Newton-Cotes. Αν έχουμε δυνατότητα επιλογής των x_i προκύπτουν πιο ακριβείς τύποι (Gauss και Clenshaw–Curtis).

- Τα όρια ολοκλήρωσης a,b είναι συνήθως πεπερασμένα. Με αυτή την περίπτωση θα ασχοληθούμε κυρίως.
- Αν ένα ή και τα δύο όρια είναι $\pm\infty$, θα πρέπει οπωσδήποτε να ισχύει $xf(x) \to 0$ όταν το x τείνει στο άπειρο όριο (ή στα άπειρα όρια). Αλλιώς, το ολοκλήρωμα απειρίζεται.
- Αν ένα ή και τα δύο όρια είναι $\pm\infty$, θα παρουσιάσουμε μεθόδους που μπορούν να υπολογίσουν το ολοκλήρωμα αρκεί η συνάρτηση να έχει ειδική μορφή. Αν η $f(x)$ δεν έχει κατάλληλη μορφή, ακολουθούμε τα επόμενα βήματα:

- Αν τα όρια a, b είναι ομόσημα και ένα από αυτά $\pm\infty$, θέτουμε $t = 1/x$. Τότε

  $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f(\frac{1}{t})\mathrm{d}t\ .$$

  Το νέο ολοκλήρωμα έχει πεπερασμένα όρια.

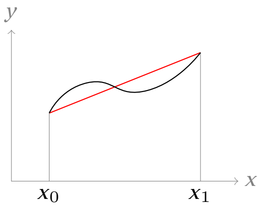
- Αν τα όρια a, b δεν είναι ομόσημα και ένα από αυτά πεπερασμένο, τότε επιλέγουμε πεπερασμένο c ομόσημο του άπειρου ορίου ώστε να καταλήξουμε σε πεπερασμένο ολοκλήρωμα και σε ολοκλήρωμα της πρώτης περίπτωσης:

  $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^c f(x)\mathrm{d}x + \int_c^b f(x)\mathrm{d}x\ .$$

- Αν και τα δύο όρια είναι άπειρα (με αντίθετο πρόσημο), τότε επιλέγουμε πεπερασμένα c, ομόσημο του a, και d, ομόσημο του b, και χωρίζουμε το αρχικό ολοκλήρωμα σε τρία:

  $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^c f(x)\mathrm{d}x + \int_c^d f(x)\mathrm{d}x + \int_d^b f(x)\mathrm{d}x\ .$$

  Καταλήγουμε σε δύο ολοκληρώματα της πρώτης περίπτωσης και ένα με πεπερασμένα όρια.



Προσεγγίζουμε την $f(x)$ με το πολυώνυμο ελάχιστου βαθμού που περνά από τα $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$:

$$p(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \; .$$

Η ολοκλήρωσή του με όρια x_0, x_1 δίνει προσεγγιστικά το ολοκλήρωμα της $f(x)$:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\mathrm{d}x \approx \int_{x_0}^{x_1} p(x)\mathrm{d}x = \frac{x_1 - x_0}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] \; .$$

Αυτός είναι ο απλός τύπος τραπεζίου.

Αναπτύσσουμε τη συνάρτηση $f(x)$ κατά Taylor γύρω από το σημείο x_0:

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

Ολοκληρώνουμε στο διάστημα $[x_0, x_1]$ τα δύο μέλη:

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_1} f(x)\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_1} f(x_0)\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_1} f'(x_0)(x - x_0)\mathrm{d}x \\
&\quad + \int_{x_0}^{x_1} f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2}\mathrm{d}x + \dots \\
&= f(x_0)(x_1 - x_0) + f'(x_0)\frac{(x_1 - x_0)^2}{2} \\
&\quad + f''(x_0)\frac{(x_1 - x_0)^3}{6} + \dots\ .
\end{aligned}$$

Στον απλό τύπο τραπεζίου, αντικαθιστούμε την $f(x_1)$ από το ανάπτυγμα Taylor για αυτή:

$$\begin{aligned}\frac{x_1-x_0}{2}\left[f(x_0)+f(x_1)\right] &= \frac{x_1-x_0}{2}\Bigg[f(x_0)\\ &\quad + f(x_0)+f'(x_0)(x_1-x_0)+f''(x_0)\frac{(x_1-x_0)^2}{2}+\ldots\Bigg]\ .\end{aligned}$$

Η διαφορά των δύο σχέσεων είναι

$$\varepsilon = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\mathrm{d}x - \frac{x_1-x_0}{2}\left[f(x_0)+f(x_1)\right] = -\frac{1}{12}(x_1-x_0)^3 f''(x_0)+\ldots\ .$$

Με ακριβή μαθηματική αντιμετώπιση καταλήγουμε ότι το σφάλμα ε του απλού τύπου τραπεζίου είναι

$$\varepsilon = -\frac{1}{12}(x_1-x_0)^3 f''(\xi)\ , \qquad \text{για κάποιο } \xi\in(x_0,x_1)\ .$$

Ο απλός τύπος τραπεζίου σε ένα διάστημα $[a, b]$ έχει σφάλμα $\mathcal{O}((b-a)^3)$. Αν το διάστημα είναι μεγάλο, δεν πρέπει να τον εφαρμόσουμε.

Επιλέγουμε $n+1$ ισαπέχοντα σημεία $x_i = a + ih$ με $i = 0, 1, \ldots, n$ και $h = (b-a)/n$, και γράφουμε

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)\mathrm{d}x + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\mathrm{d}x \\
&\approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + \cdots + \frac{h}{2}(f_{n-1} + f_n) \\
&= \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n\right) \ ,
\end{aligned}$$

όπου $f_i \equiv f(x_i)$.

Αυτός είναι ο σύνθετος τύπος τραπεζίου.

Το σφάλμα ολοκλήρωσης, E, του σύνθετου τύπου τραπεζίου μπορεί να εκτιμηθεί ως εξής:

$$\begin{aligned} E &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{h}{2}\left(f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n\right) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1}\left[\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x - \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})\right] = \sum_{i=0}^{n-1}\varepsilon_i \ . \end{aligned}$$

Σε κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$ έχουμε:

$$\varepsilon_i = -\frac{1}{12}(x_{i+1} - x_i)^3 f''(\xi_i) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \ , \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1}) \ .$$

Έστω ότι υπάρχει αριθμός M ώστε $|f''(\xi_i)| \leq M$ για κάθε i. Επομένως,

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{h^3}{12} M \ , \quad \forall i \ ,$$

και

$$|E| = \left|\sum_{i=0}^{n-1}\varepsilon_i\right| \leq \sum_{i=0}^{n-1}|\varepsilon_i| \leq \frac{nM}{12} h^3 = \frac{(b-a)M}{12} h^2 \ .$$

Απλός τύπος

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{x_1 - x_0}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] \ .$$

Σφάλμα απλού τύπου

$$\varepsilon \propto (x_1 - x_0)^3 \ .$$

Σύνθετος τύπος

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n\right) \ ,$$

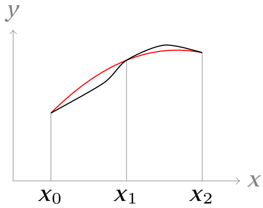
όπου $x_i = a + ih$ και $h = (b - a)/n$.

Σφάλμα σύνθετου τύπου

$$|E| \propto h^2 \ .$$

Μέθοδος Simpson

Απλός τύπος (1/2)



Αν x_0, x_2 είναι τα όρια ολοκλήρωσης, ορίζω το x_1 στο μέσο του διαστήματος. Τα x_i ισαπέχουν. Έστω $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$. Προσεγγίζουμε την $f(x)$ με το πολυώνυμο ελάχιστου βαθμού που περνά από τα $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$:

$$\begin{aligned} p(x) \quad = \quad & \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \; . \end{aligned}$$

Η ολοκλήρωση του $p(x)$ με όρια x_0, x_2 δίνει

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x \approx \int_{x_0}^{x_2} p(x)\mathrm{d}x = f(x_0)\frac{h}{3} + f(x_1)\frac{4h}{3} + f(x_2)\frac{h}{3} \ .$$

Αυτός είναι ο απλός τύπος Simpson.

Σφάλμα απλού τύπου

$$\begin{aligned} \varepsilon &\equiv \int_{x_0}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x - \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) \\ &= -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi) = -\frac{1}{2880}(x_2 - x_0)^5 f^{(4)}(\xi) \ , \quad \text{για κάποιο } \xi \in (x_0, x_2) \ . \end{aligned}$$

Ο απλός τύπος Simpson σε ένα διάστημα $[a, b]$ έχει σφάλμα $\mathcal{O}((b-a)^5)$. Αν το διάστημα είναι μεγάλο, δεν πρέπει να τον εφαρμόσουμε.

Επιλέγουμε $n+1$ ισαπέχοντα σημεία $x_i = a + ih$ με $i = 0, 1, \ldots, n$ και $h = (b-a)/n$. Απαιτούμε το πλήθος διαστημάτων, n, να είναι άρτιο. Γράφουμε

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\mathrm{d}x + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\mathrm{d}x \\ &\approx \frac{h}{3}\left(f_0 + 4\sum_{j=1}^{n/2} f_{2j-1} + 2\sum_{j=1}^{n/2-1} f_{2j} + f_n\right) . \end{aligned}$$

όπου $f_i \equiv f(x_i)$.

Αυτός είναι ο σύνθετος τύπος Simpson.

Αν η τέταρτη παράγωγος της $f(x)$ είναι φραγμένη στο $[a, b]$,

$$\max_{x \in [a,b]} \left| f^{(4)}(x) \right| \leq M \ ,$$

το σφάλμα E του σύνθετου τύπου Simpson είναι

$$|E| \leq \frac{b-a}{180} M h^4 \ .$$

Απλός τύπος

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

όπου $h = (x_2 - x_0)/2$, $x_1 = x_0 + h$.

Σφάλμα απλού τύπου

$$\varepsilon \propto (x_2 - x_0)^5 \propto h^5 .$$

Σύνθετος τύπος

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}\left(f_0 + 4\sum_{j=1}^{n/2} f_{2j-1} + 2\sum_{j=1}^{n/2-1} f_{2j} + f_n\right) ,$$

όπου $x_i = a + ih$, $h = (b-a)/n$ και n άρτιο.

Σφάλμα σύνθετου τύπου

$$|E| \propto h^4 .$$

Απλός τύπος

Ο κανόνας Simpson 3/8 προκύπτει από την ολοκλήρωση ενός πολυωνύμου 3ης τάξης, το οποίο προσεγγίζει την ολοκληρωτέα συνάρτηση.
Για 4 δεδομένα ισαπέχοντα σημεία x_0, x_1, x_2, x_3 το ολοκλήρωμα της $f(x)$ στο $[x_0, x_3]$ δίνεται προσεγγιστικά από τον τύπο:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right] \ ,$$

όπου $h = (x_3 - x_0)/3$.

Σφάλμα απλού τύπου

Ο απλός τύπος του Simpson 3/8 έχει σφάλμα:

$$\varepsilon = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi) = -\frac{1}{6480}(x_3 - x_0)^5 f^{(4)}(\xi) \ , \qquad \text{για κάποιο } \xi \in (x_0, x_3) \ .$$

Ο απλός τύπος Simpson $3/8$

- είναι παρόμοιας ακρίβειας με τον τύπο του Simpson $1/3$, παρά το γεγονός ότι χρησιμοποιεί ένα παραπάνω σημείο.
- χρειάζεται περιττό (3) αριθμό διαστημάτων, συνεπώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν θέλουμε υψηλή ακρίβεια σε περιττό πλήθος διαστημάτων συνδυάζοντάς τον με τον τύπο Simpson $1/3$: στα πρώτα τρία διαστήματα μπορούμε να εφαρμόσουμε τον τύπο $3/8$ και στα υπόλοιπα (που είναι άρτια στο πλήθος) τον τύπο $1/3$.

Οι (απλοί) τύποι τραπεζίου, Simpson, κλπ., έχουν τη γενική ονομασία (κλειστοί) τύποι Newton–Cotes. Όπως είδαμε, μπορούν να προκύψουν από την ολοκλήρωση του πολυωνύμου παρεμβολής σε $n+1$ ισαπέχοντα σημεία. Σύμφωνα με τον τύπο Lagrange

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \, \ell_i(x) \ ,$$

με

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \ , \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n \ .$$

Άρα, για τους απλούς τύπους Newton–Cotes,

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\mathrm{d}x \approx \int_{x_0}^{x_n} p(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f_i \int_{x_0}^{x_n} \ell_i(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} w_i f_i \ ,$$

με

$$w_i = \int_{x_0}^{x_n} \ell_i(x)\mathrm{d}x \ .$$

Οι συντελεστές w_i στον τύπο

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f_i \ ,$$

μπορούν να προκύψουν εναλλακτικά ως εξής:
Απαιτούμε ο τύπος να είναι *ακριβής* όταν η $f(x)$ είναι διαδοχικά 1, x, x^2, ..., x^n, όπου $n+1$ το πλήθος των σημείων. Προκύπτει έτσι ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων με άγνωστους τους συντελεστές w_i, το οποίο έχει μοναδική λύση.

Παράδειγμα

Εναλλακτικός υπολογισμός απλού τύπου Simpson. Ζητούμε να ισχύει

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{2} w_i f(x_i) \ ,$$

όπου x_i (με $i = 0, 1, 2$) τρία ισαπέχοντα σημεία: $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_1 + h$. Έχουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned}
f(x) = 1 \quad &\Rightarrow \quad x_2 - x_0 = w_0 + w_1 + w_2 \ , \\
f(x) = x \quad &\Rightarrow \quad \frac{x_2^2 - x_0^2}{2} = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 \ , \\
f(x) = x^2 \quad &\Rightarrow \quad \frac{x_2^3 - x_0^3}{3} = w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 \ .
\end{aligned}$$

Η λύση του γραμμικού συστήματος δίνει $w_0 = h/3$, $w_1 = 4h/3$, $w_2 = h/3$, οι γνωστοί συντελεστές του απλού τύπου Simpson.

- Εξαιτίας του φαινομένου Runge, η προσέγγιση με τύπο Newton–Cotes υψηλής τάξης δεν παράγει τύπο ολοκλήρωσης με καλή ακρίβεια.
  Στην πράξη δεν χρησιμοποιούνται τύποι πιο πολύπλοκοι από τον Simpson, αλλά εφαρμόζονται σε ίσα τμήματα στο διάστημα ολοκλήρωσης ώστε να προκύψουν οι σύνθετοι τύποι.
- Το σφάλμα κάθε κλειστού σύνθετου τύπου Newton–Cotes έχει τη μορφή $\varepsilon \propto h^{2k}$ με $k = 1$ (για τραπέζιο), $k = 2$ (για Simpson), κλπ.
- Χρησιμοποιώντας την ακρίβεια που θέλουμε να έχουμε στον υπολογισμό του ολοκληρώματος, μπορούμε να έχουμε από το σφάλμα της επιλεγμένης μεθόδου, μια εκτίμηση για την τάξη μεγέθους της απόστασης h των διαδοχικών σημείων (και συνεπώς, και για το πλήθος των διαστημάτων, n):

$$\varepsilon \propto h^{2k} \quad \Rightarrow \quad h \propto \sqrt[2k]{\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad n \propto \frac{1}{\sqrt[2k]{\varepsilon}} \, .$$

- Ακριβέστερο έλεγχο του σφάλματος έχουμε αν υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα για διάφορα h (π.χ. h, $2h$) και επιλέξουμε το κατάλληλο βήμα.

Ο σύνθετος τύπος τραπεζίου για το ολοκλήρωμα,

$$I_0 = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\mathrm{d}x \ ,$$

δίνει για την ακριβή τιμή τη σχέση

$$I_0 = I_h + \alpha_2 h^2 + \alpha_4 h^4 + \cdots \ ,$$

όπου

$$I_h = \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n\right) \ ,$$

$h = (x_n - x_0)/n$ και α_i οι συντελεστές των όρων h^i του σφάλματος.

Γράφουμε την προηγούμενη εξίσωση για τρία διαφορετικά βήματα, π.χ. $h, h/2, h/4$:

$$
\begin{aligned}
I_0 &= I_h + \alpha_2 h^2 + \alpha_4 h^4 + \mathcal{O}(h^6)\ , \\
I_0 &= I_{h/2} + \alpha_2 (h/2)^2 + \alpha_4 (h/2)^4 + \mathcal{O}(h^6)\ , \\
I_0 &= I_{h/4} + \alpha_2 (h/4)^2 + \alpha_4 (h/4)^4 + \mathcal{O}(h^6)\ .
\end{aligned}
$$

Σχηματίζεται γραμμικό σύστημα τριών εξισώσεων με αγνώστους τα I_0, α_2, α_4.

Η λύση ως προς I_0 είναι γραμμικός συνδυασμός των $I_h, I_{h/2}, I_{h/4}$ που έχουν σφάλματα $O(h^2)$. Δίνει την ακριβή τιμή του ολοκληρώματος με σφάλμα $O(h^6)$.

[Λύση συστήματος: $I_0 = (I_h - 20 I_{h/2} + 64 I_{h/4})/45$.]

Μέθοδος Gauss–Legendre (1/6)

Μετασχηματισμός ολοκληρώματος

- Ένα ολοκλήρωμα με πεπερασμένα όρια, $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$, μπορεί πάντα να μετασχηματιστεί σε ολοκλήρωμα στο διάστημα $[-1,1]$.
- Θέτουμε $x = \lambda t + \mu$ και ζητούμε να ισχύει $x = a$ όταν $t = -1$ και $x = b$ όταν $t = 1$. Τότε

$$\begin{aligned} x &= \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\ , \\ \mathrm{d}x &= \frac{b-a}{2}\mathrm{d}t\ . \end{aligned}$$

- Επομένως, μπορούμε να μετασχηματίσουμε ένα ολοκλήρωμα στο διάστημα $[a,b]$ σε άλλο στο διάστημα $[-1,1]$ με τον τύπο

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)\mathrm{d}t\ .$$

- Ένα ολοκλήρωμα στο $[-1,1]$ μπορούμε να το υπολογίσουμε προσεγγιστικά με τύπο της μορφής

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \ ,$$

  όπου x_i n σημεία στο $[-1,1]$ και w_i κάποιοι συντελεστές.
- Όταν τα σημεία x_i είναι ισαπέχοντα, προκύπτουν οι τύποι Newton–Cotes.
- Μπορώ να έχω ακριβέστερο υπολογισμό αν έχω δυνατότητα επιλογής των σημείων;
- Έχω $2n$ παραμέτρους να επιλέξω $(x_i,\ w_i)$. Απαιτώ ο τύπος να είναι *ακριβής* για $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^{2n-1}$.

Οι εξισώσεις που προκύπτουν από τη σχέση

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \ ,$$

για τον υπολογισμό των x_i, w_i είναι

$$\int_{-1}^{1} x^k \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^k \ , \qquad k = 0, 1, \ldots, 2n-1 \ .$$

Δηλαδή

$$\frac{1-(-1)^{k+1}}{k+1} = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^k \ , \qquad k = 0, 1, \ldots, 2n-1 \ .$$

Το σύστημα είναι μη γραμμικό.

Μέθοδος Gauss–Legendre (4/6)

Αν $n = 1$

$$\int_{-1}^{1} x^0 \mathrm{d}x = w_1 x_1^0 \Rightarrow 2 = w_1 \ , \qquad \int_{-1}^{1} x^1 \mathrm{d}x = w_1 x_1^1 \Rightarrow 0 = w_1 x_1 \ ,$$

δηλαδή, $x_1 = 0$, $w_1 = 2$ και

$$\int_{-1}^{1} f(x) \mathrm{d}x \approx 2f(0) \ .$$

Αν $n = 2$

$$w_1 + w_2 = 2 \ , \quad w_1 x_1 + w_2 x_2 = 0 \ , \quad w_1 {x_1}^2 + w_2 {x_2}^2 = \frac{2}{3} \ , \quad w_1 {x_1}^3 + w_2 {x_2}^3 = 0 \ .$$

Η λύση του είναι $w_1 = w_2 = 1$, $x_1 = {}^1\!/\!\sqrt{3}$, $x_2 = -{}^1\!/\!\sqrt{3}$. Τότε

$$\int_{-1}^{1} f(x) \mathrm{d}x \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \ .$$

Για οποιοδήποτε n

Τα σημεία x_i, $i = 1, \ldots, n$, είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre n τάξης, $P_n(x)$. Οι συντελεστές w_i δίνονται από τη σχέση

$$w_i = \frac{2}{(1 - {x_i}^2)[P'_n(x_i)]^2} \ .$$

Πολυώνυμα Legendre

Τα δύο πρώτα πολυώνυμα Legendre είναι τα

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \ , \\ P_1(x) &= x \ , \end{aligned}$$

ενώ τα υπόλοιπα μπορούν να παραχθούν από την αναδρομική σχέση

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1}((2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)) \ , \qquad n > 0 \ .$$

Σφάλμα

Για το σφάλμα ε_n στον υπολογισμό του ολοκληρώματος με τη μέθοδο Gauss–Legendre n σημείων ισχύει

$$|\varepsilon_n| \leq \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi) \ , \quad \text{για κάποιο } \xi \in (-1, 1) \ .$$

Στην πράξη, μπορούμε να υπολογίσουμε την προσεγγιστική τιμή για $n = 1, 2, 3, \ldots$ και να επιλέξουμε το μικρότερο n που θα μας δώσει ικανοποιητική προσέγγιση.

Μέθοδος Gauss–Hermite

Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \ ,$$

όπου x_i είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Hermite τάξης n, $H_n(x)$, και

$$w_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H_n'(x_i)]^2} \ .$$

Πολυώνυμα Hermite

Τα δύο πρώτα πολυώνυμα Hermite είναι τα

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \ , \\ H_1(x) &= 2x \ , \end{aligned}$$

ενώ τα υπόλοιπα μπορούν να παραχθούν από την αναδρομική σχέση

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \ , \qquad n > 0 \ .$$

Μέθοδος Gauss–Laguerre

Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) ,$$

όπου x_i είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Laguerre τάξης n, $L_n(x)$, και

$$w_i = \frac{x_i}{[(n+1)L_{n+1}(x_i)]^2} .$$

Πολυώνυμα Laguerre

Τα δύο πρώτα πολυώνυμα Laguerre είναι τα

$$\begin{aligned} L_0(x) &= 1 , \\ L_1(x) &= -x + 1 , \end{aligned}$$

ενώ τα υπόλοιπα μπορούν να παραχθούν από την αναδρομική σχέση

$$L_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1}((2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x)) , \qquad n > 0 .$$

Μέθοδος Gauss–Chebyshev

Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\mathrm{d}x &\approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \,, \\ \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2} f(x)\mathrm{d}x &\approx \sum_{i=1}^{n} c_i f(\rho_i) \,,\end{aligned}$$

όπου

x_i οι ρίζες του πολυωνύμου Chebyshev *πρώτου* είδους, τάξης n, $T_n(x)$,

ρ_i οι ρίζες του πολυωνύμου Chebyshev *δεύτερου* είδους, τάξης n, $U_n(x)$.

Οι ρίζες των δύο πολυωνύμων είναι:

$$x_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right) \,, \qquad \rho_i = \cos\left(\frac{i\pi}{n+1}\right) \,.$$

Τα αντίστοιχα βάρη w_i, c_i είναι:

$$w_i = \frac{\pi}{n} \,, \qquad c_i = \frac{\pi}{n+1}(1-\rho_i^2) \,.$$

Κατασκευή μεθόδων Gauss

- Επιθυμούμε να υπολογίσουμε προσεγγιστικά ένα ολοκλήρωμα

$$\int_a^b f(x)W(x)\mathrm{d}x$$

  όπου $W(x)$ μια μη αρνητική συνάρτηση στο διάστημα $[a,b]$.
- Το ολοκλήρωμα μπορεί να προσεγγιστεί από άθροισμα των τιμών της $f(x)$ σε συγκεκριμένα σημεία $x_i \in (a,b)$ με κατάλληλα βάρη w_i:

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

- Μπορούμε να βρούμε (ή να κατασκευάσουμε) οικογένεια ορθογώνιων πολυωνύμων $P_i(x)$, βαθμού $i = 0, 1, \ldots$, που ορίζονται στο διάστημα $[a,b]$ και έχουν συνάρτηση βάρους $W(x)$.
- Οι ρίζες του πολυωνύμου $P_n(x)$ είναι τα ζητούμενα σημεία x_i στον τύπο. Αυτές και τα βάρη w_i μπορούν να υπολογιστούν από τις ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα ενός συγκεκριμένου πίνακα.

Μέθοδος Clenshaw–Curtis (1/4)

Σύμφωνα με τον κανόνα ολοκλήρωσης Clenshaw–Curtis μπορούμε να υπολογίσουμε ένα ολοκλήρωμα της μορφής

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x$$

ως εξής: επιλέγουμε τα $n+1$ (με $n>1$) μη ισαπέχοντα σημεία

$$x_i = \cos\left(\frac{i\pi}{n}\right) \;, \quad i = 0, \ldots, n$$

στο διάστημα της ολοκλήρωσης. Κατόπιν, βρίσκουμε το πολυώνυμο παρεμβολής που περνά από τα σημεία $(x_i, f(x_i))$, το οποίο ολοκληρώνουμε ακριβώς.

Μπορεί να δειχθεί ότι στον τύπο

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \ ,$$

οι συντελεστές w_i είναι τότε

$$w_i = \frac{c_i}{n} \sum_{j=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{b_j}{1-4j^2} \cos\left(\frac{2ij\pi}{n}\right) \ , \quad i = 0, \ldots, n \ ,$$

όπου $\lfloor x \rfloor$ το ακέραιο μέρος του x και

$$b_j = \begin{cases} 1\ , & j = 0 \\ 2\ , & 0 < j < n/2 \\ 1\ , & j = n/2 \end{cases} \ , \qquad c_i = \begin{cases} 1\ , & i = 0 \\ 2\ , & 0 < i < n \\ 1\ , & i = n \end{cases} \ .$$

Μέθοδος Clenshaw–Curtis (3/4)

Η μέθοδος Clenshaw–Curtis υπολογίζει το ζητούμενο ολοκλήρωμα με ακρίβεια συγκρίσιμη με τη μέθοδο Gauss–Legendre n σημείων. Έχει πλεονεκτήματα έναντι αυτής ότι

- οι κόμβοι x_i υπολογίζονται εύκολα,
- οι συντελεστές w_i μπορούν να προκύψουν από αλγόριθμους για γρήγορο υπολογισμό του διακριτού μετασχηματισμού Fourier,
- οι διαδοχικές εφαρμογές του τύπου για $n, 2n, 4n, \ldots$, που χρειάζονται για την εκτίμηση της ακρίβειάς της, χρησιμοποιούν κοινούς κόμβους.

Μέθοδος Clenshaw–Curtis (4/4)

Ορίζουμε το διάνυσμα v, n θέσεων, ως εξής:

$$
\begin{aligned}
v_k &= \frac{2}{1-4k^2} - \frac{1}{n^2-1+(n \bmod 2)}\ , \text{ για } k = 0,\ldots,\lfloor n/2 \rfloor - 1 \\
v_{\lfloor n/2 \rfloor} &= \frac{n-3}{2\lfloor n/2 \rfloor - 1} - 1 + \frac{1}{n^2-1+(n \bmod 2)}((2-(n \bmod 2))n-1) \\
v_{n-k} &= v_k\ , \text{ για } k = 1,\ldots,\lfloor (n-1)/2 \rfloor\ .
\end{aligned}
$$

Μπορεί να δειχθεί ότι οι συντελεστές w_i, με $i = 0,\ldots,n-1$, προκύπτουν από το διακριτό μετασχηματισμό Fourier (DFT) του διανύσματος v και συνεπώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό τους ο αλγόριθμος FFT. Εύκολα φαίνεται επίσης ότι $w_n = w_0$.

Εναλλακτικές τεχνικές ολοκλήρωσης

Αν τα σημεία στα οποία γνωρίζουμε τη συνάρτηση δεν ισαπέχουν ή δεν έχουν κατάλληλη κατανομή για εφαρμογή των μεθόδων Gauss ή Clenshaw–Curtis τότε μπορούμε να εφαρμόσουμε τα εξής:

- Χρήση του απλού τύπου του τραπεζίου σε κάθε διάστημα ή, ισοδύναμα, ολοκλήρωση της προσέγγισης με ευθύγραμμα τμήματα.
- Ολοκλήρωση του πολυωνύμου παρεμβολής, όπως προκύπτει από τα σημεία υπολογισμού της συνάρτησης. Προσοχή στο φαινόμενο Runge!
- Ολοκλήρωση της προσεγγιστικής συνάρτησης που προκύπτει από την προσαρμογή λόγου πολυωνύμων ή άλλης καμπύλης ή την εφαρμογή της μεθόδου κατασκευής spline.
- Υπολογισμός των συντελεστών w_i στο προσεγγιστικό άθροισμα $\sum_i w_i f_i$ με τη μέθοδο που είδαμε στον εναλλακτικό υπολογισμό των τύπων Newton–Cotes.