Αριθμητική Ολοκληρωση

Αν $F'(x) = f(x)$ τότε $\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a)$

Προβληματα που πιθανον να υπαρχουν

1) Δεν γνωριζουμε τη F
2) Μπορεί να τη γνωριζουμε ομως να ειναι δυσκολο να υπολογιστεί
3) Ο υπολογισμος των $F(a)$ και $F(b)$ να γινεται με κακή προσεγγιση

Σκοπος ειναι να υπολογισουμε την ποσοτητα

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$$

Θελουμε λοιπον να κατασκευασουμε μια προσεγγιση του $I(f)$

$$Q_{n+1}(f) \approx I(f)$$

Θεωρουμε ενα διαμερισμό του $[a,b]$: $x_0, x_1, \dots, x_n$ κόμβοι

Επισης θεωρουμε καποιους αριθμους : $w_0, \dots, w_n$ βάρη

$$Q_{n+1}(f) = w_0 f(x_0) + \dots + w_n f(x_n)$$

Υπάρχουν και τύποι ολοκληρώσεις που χρησιμοποιούν κόμβους $x_0, \dots, x_n \notin [a,b]$

καθώς και τιμές των παραγώγων της f. Δεν θα θεωρήσουμε τύπους ολοκλήρωσης αυτής της μορφής.

Τύποι Newton - Cotes

$f \in C[a,b]$ και $I(f) = \int_a^b f(x)dx$

Έστω $n \in \mathbb{N}_0$, $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$

Ο τύπος (κανόνας) ολοκλήρωσης Newton-Cotes, Q_{n+1} με $n+1$ κόμβους ορίζεται ως εξής

Για $f \in C[a,b]$, έστω $p_n \in \mathbb{P}_n$ το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange

στα σημεία $x_0, \ldots, x_n$

$$p_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \ldots, n$$

Ορίζουμε $Q_{n+1}(f) : C[a,b] \to \mathbb{R}$

$$Q_{n+1}(f) = I(p_n) = \int_a^b p_n(x)\,dx$$

Παρατήρηση: Αν η f είναι πολυώνυμο βαθμού n τότε προφανώς ταυτίζεται με το πολυώνυμο παρεμβολής p_n, οπότε ο Q_{n+1} ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα βαθμού μέχρι και n

Αν θεωρήσουμε την απεικόνιση $R_{n+1} : C[a,b] \to \mathbb{R}$

$$R_{n+1}(f) = I(f) - Q_{n+1}(f)$$

θα ισχύει ότι

$$\forall p \in \mathbb{P}_n , \quad R_{n+1}(p) = 0$$

Για τον προσδιορισμό του κανόνα Q_{n+1} δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε το πολυώνυμο παρεμβολής p_n

Έστω L_i τα πολυώνυμα Lagrange ως προς τους κόμβους $x_0, \dots, x_n$

Γνωρίζουμε ότι

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} , \qquad i = 0, \dots, n$$

Τότε $$P_n = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i$$

Συνεπώς ο τύπος ολοκλήρωσης
$$Q_{n+1}(f) = \int_a^b P_n(x)\,dx$$

γράφεται ως
$$Q_{n+1}(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b L_i(x)\,dx}_{\equiv\, w_i} = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, w_i$$

Πρέπει λοιπόν να προσδιορίσουμε τα βάρη w_i,

για τον υπολογισμό τους δεν συμμετέχει η συνάρτηση f, διότι

$$w_i = \int_a^b L_i(x)\,dx$$

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αλλαγή μεταβλητής

$x \in [a,b]$, $x = a + hs$, $s \in [0,n]$

Συνεπώς για $s = 0,1,2,\dots,n$ έχουμε τα σημεία $x_0 = a$, $x_1 = a+h$, $x_2 = a+2h$, …,

$x_n = a + nh = b$

Οπότε

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} = \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{(a+hs)-(a+hj)}{(a+hi)-(a+hj)} = \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{h(s-j)}{h(i-j)}$$

$$= \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{s-j}{i-j} = \varphi_i(s)$$

Επομένως $$\int_a^b L_i(x)\,dx = h\underbrace{\int_0^n \varphi_i(s)\,ds}_{w_i^*} = h w_i^* = w_i$$

<u>Παρατήρηση</u>: Τα $w_i^* = \int_0^n \varphi_i(s)ds = \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{s-j}{i-j} ds$

είναι ανεξάρτητα του διαστήματος $[a,b]$. Μπορούν να υπολογιστούν μια φορά και στη συνέχεια τα βάρη w_i που χρησιμοποιούμε για την ολοκλήρωση στο διάστημα $[a,b]$ θα είναι

$$w_i = h w_i^* \quad , \quad i=0,\dots,n$$

Ένας άλλος τρόπος υπολογισμού των w_i, $i=0,\dots,n$ είναι ο ακόλουθος

Γνωρίζουμε ότι το Q_{n+1} υπολογίζει ακριβώς το ολοκλήρωμα στο $[a,b]$ των πολυωνύμων μέχρι βαθμού n. Οπότε αν

$$q_i(x) = x^i \quad , \quad i = 0, \dots, n \quad , \quad q_i \in \mathbb{P}_n$$

Άρα $\quad q_0(x) = x^0 = 1 \quad , \quad Q_{n+1}(q_0) = \int_a^b q_0(x)\,dx$

Οπότε

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

Όμοια $\quad q_1(x) = x^1 = x \quad , \quad Q_{n+1}(q_1) = \int_a^b q_1(x)\,dx$

$$\sum_{i=0}^{n} w_i (x_i)^1 = \int_a^b x\,dx = \frac{1}{2}(b^2 - a^2)$$

και $q_j(x) = x^j$, $j = 0, 1, \dots, n$, $Q_{n+1}(q_j) = \int_a^b x^j dx$

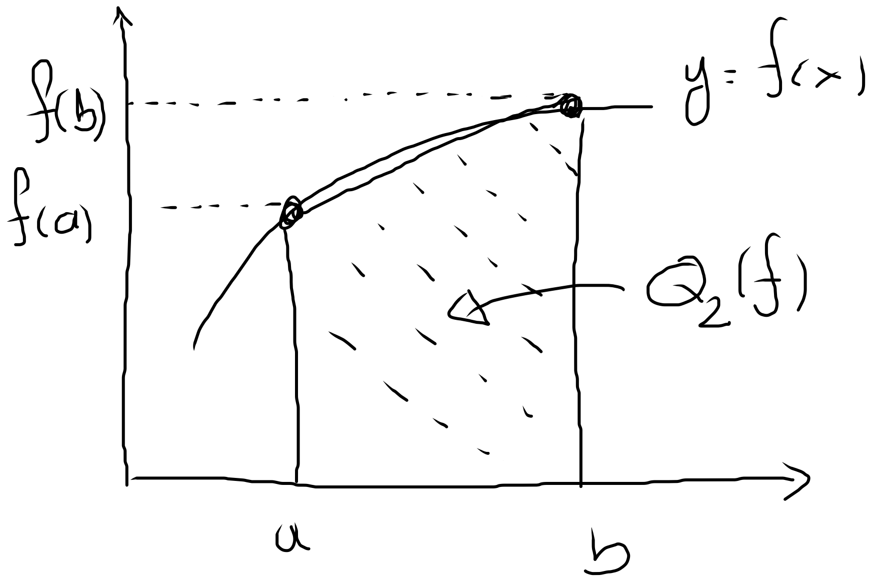
$$\sum_{i=0}^{n} w_i (x_i)^j = \int_a^b x^j dx = \frac{1}{j+1}\left(b^{j+1} - a^{j+1}\right)$$

Έχουμε λοιπόν ένα γραμμικό σύστημα με αγνώστους τα $w_0, w_1, \dots, w_n$

Το γραμμικό σύστημα έχει πίνακα A και δεξιό μέλος b

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & & x_n^n \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} \int_a^b 1 dx \\ \int_a^b x\, dx \\ \vdots \\ \int_a^b x^n dx \end{pmatrix}$$

Τύπος τραπεζίου



$$Q_2(f) = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right]$$

τύπος (ή κανόνας) τραπεζίου

Ο κανόνας (ή τύπος) Newton-Cotes με 2 κόμβους θα ορίζεται ως

$x_0 = a$, $x_2 = a + h = a + (b-a) = b$

$$\sum_{i=0}^{1} w_i f(x_i) = w_0 f(a) + w_1 f(b)$$

Τα βάρη w_0, w_1 θα ορίζονται ως

$$w_0 = h w_0^* = h \int_0^1 \varphi_0(s)\,ds = h \int_0^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq 0}}^{1} \frac{s-j}{0-j}\,ds$$

$$= h \cdot \int_0^1 \frac{s-1}{(-1)}\,ds = h \cdot \frac{1}{2}, \quad h = b-a$$

$$w_1 = h w_1^* = h \int_0^1 \varphi_1(s)\,ds = h \int_0^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq 1}}^{1} \frac{s-j}{1-j}\,ds = h \int_0^1 \frac{s-0}{1-0}\,ds = h \cdot \frac{1}{2}$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι ο κανόνας τραπεζίου ταυτίζεται με το τύπο Newton - Cotes με 2 κόμβους.

Το σφάλμα $R_2(f) = I(f) - Q_2(f)$ έχουμε

τότε $R_2(f) = \int_a^b \big(f(x) - p_1(x)\big)\,dx$

όπου p_1 είναι το πολυώνυμο παρεμβολής της f ως προς τα σημεία $x_0 = a$, $x_1 = b$

Το σφάλμα της παρεμβολής είχαμε δείξει ότι ικανοποιεί

Αν $f \in C^2[a,b]$

$$f(x) - p_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b) \quad \text{για κάποιο } \underline{\underline{\xi(x)}}$$

Συνεπώς

$$R_2(f) = -\frac{1}{2}\int_a^b \underbrace{(x-a)(b-x)}_{>0} f''(\xi(x))\,dx$$

Αν υποθέσουμε ότι η f είναι $C^2[a,b]$, τότε

$$m = \min_{a \le x \le b} f''(x) \quad \text{και} \quad M = \max_{a \le x \le b} f''(x)$$

και επειδή $\quad (x-a)(b-x) \geq 0 \quad \forall x \in [a,b]$

έχουμε ότι

$$m \int_a^b (x-a)(b-x)\,dx \le -2R_2(f) \le M \int_a^b (x-a)(b-x)\,dx$$

ή

$$m \le -\frac{2R_2(f)}{\int_a^b (x-a)(b-x)\,dx} \le M$$

Συνεπώς υπάρχει $\xi_1 \in (a,b)$ τ.ω.

$$f''(\xi_1) = \frac{-2R_2(f)}{\int_a^b (x-a)(b-x)\,dx}$$

Οπότε

$$R_2(f) = -\frac{1}{2} f''(\xi_1) \int_a^b (x-a)(b-x)\,dx$$

$$= -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi_1)$$

Μπορούμε τώρα να θεωρήσουμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του $[a,b]$ με βήμα h, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$

Σε κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n-1$, εφαρμόζουμε τον τύπο του τραπεζίου και αθροίζουμε τα αποτελέσματα

Προκύπτει τώρα ο κανόνας ολοκλήρωσης που καλείται σύνθετος κανόνας του τραπεζίου

$$Q^T_{n+1}(f) = h\left[\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_1)\right] + h\left[\frac{1}{2} f(x_1) + \frac{1}{2} f(x_2)\right] + \dots + h\left[\frac{1}{2} f(x_{n-1}) + \frac{1}{2} f(x_n)\right]$$

$$= h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n)\right]$$

Το σφάλμα τώρα $R^T_{n+1}(f) = \int_a^b f(x)dx - Q^T_{n+1}(f)$

θα είναι το άθροισμα των επιμέρους σφαλμάτων σε κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$
$i = 0, \dots, n-1$

Οπότε αν $f \in C^2[a,b]$ τότε

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

$$= -\frac{1}{12}\left\{ (x_1-x_0)^3 f''(\xi_1) + (x_2-x_1)^3 f''(\xi_2) + \dots + (x_n-x_{n-1})^3 f''(\xi_n) \right\}$$

για $\xi_{i+1} \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, n-1$

Επιπλέον λόγω της συνέχειας της f'' έχουμε ότι

$$R_{n+1}^{T}(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n-1} f''(\xi_i) = -\frac{h^3}{12}\cdot n \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n-1} f''(\xi_i)$$

$$= -\frac{h^2}{12}\cdot(h\cdot n)\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n-1} f''(\xi_i) = -\frac{h^2}{12}(b-a)\cdot f''(\xi), \quad \xi \in (a,b)$$

Η τελευταία ισότητα ισχύει επειδή

$$m = \min_{a\le x\le b} f''(x) \le \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \le M = \max_{a\le x\le b} f''(x)$$

Άρα για το σφάλμα στον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου ισχύει

$$R_{n+1}^{T}(f) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi), \quad \text{για κάποιο } \xi \in (a,b)$$

ή

$$|R_{n+1}^{T}(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_{\infty}$$

Εύκολα βγαίνουμε λοιπόν ότι αν $f \in C^2[a,b]$ τότε

$$Q_{n+1}^{T}(f) \longrightarrow \int_a^b f(x)dx, \quad h \to 0 \ (\text{ή } n \to \infty)$$

Τύπος Simpson

Ο τύπος ολοκλήρωσης Newton-Cotes με 3 κόμβους θα καλείται τύπος του Simpson

$$Q_3(f) = \frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{3}f(a) + \frac{4}{3}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{3}f(b)\right]$$

Ο Q_3 προκύπτει ως εξής

Θεωρούμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του $[a,b]$ σε 3 τρία σημεία $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$, οπότε το βήμα $h = \frac{b-a}{2}$

Ο τύπος Newton-Cotes με 3 κόμβους θα είναι

$$Q_3(f) = \sum_{i=0}^{2} w_i f(x_i), \quad w_i = h w_i^* = h\int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{2} \frac{s-j}{i-j}\, ds$$

Οπότε

$$w_0 = \int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ 0\neq j}}^{2} \frac{s-j}{0-j}\,ds = \int_0^2 \frac{s-1}{(-1)} \cdot \frac{s-2}{(-2)}\,ds = \frac{1}{2}\int_0^2 (s-1)(s-2)\,ds$$

$$= \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3} = \frac{1}{3}$$

$$w_1 = \int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ 1\neq j}}^{2} \frac{s-j}{1-j}\,ds = \int_0^2 s \cdot \frac{s-2}{1-2}\,ds = -\int_0^2 s(s-2)\,ds = \frac{4}{3}$$

$$w_2 = \int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq 2}}^{2} \frac{s-j}{2-j}\,ds = \frac{1}{3}$$

Για να μελετήσουμε τώρα το σφάλμα του τύπου του Simpson, γνωρίζουμε ότι ο $Q_3(f)$ ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα βαθμού έως 2, δηλαδή

$$R_3(q_i) = I(q_i) - Q(q_i) = \int_a^b q_i(x)dx - Q(q_i) = 0$$

όπου $q_i(x) = x^i$, $i = 0, 1, 2$

Επιπλέον μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι για το $q_3(x) = x^3$, έχουμε

$$Q_3(q_3) = \frac{b-a}{2}\left\{\frac{1}{3}q_3(a) + \frac{4}{3}q_3\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{3}q_3(b)\right\}$$

$$= \frac{b-a}{2}\left\{\frac{1}{3}a^3 + \frac{4}{3}\left(\frac{a+b}{2}\right)^3 + \frac{1}{3}(b)^3\right\}$$

$$= \frac{b-a}{6}\left\{a^3 + 4(a+b)^3 + b^3\right\} = \ldots = \frac{1}{4}(b^4 - a^4)$$

Επίσης $\int_a^b q_3(x)\,dx = \frac{1}{4}(b^4 - a^4)$

Συνεπώς $R_3(q_3) = 0$ (!!)

Άρα ο Q_3 ολοκληρώνει ακριβώς και πολυώνυμα βαθμού έως 3.

Θα χρησιμοποιήσουμε αυτό το γεγονός για να δείξουμε ότι το σφάλμα

$$R_3(f) = -\frac{(b-a)^5}{2^4 \cdot 180} f^{(4)}(\xi), \text{ για κάποιο } \xi \in (a,b)$$

Σύμφωνα με την κατασκευή του Q_3, θα έχουμε ότι

$$Q_3(f) = \sum_{i=0}^{2} w_i f(x_i) \quad \text{και}$$

$$Q_3(p) = \int_a^b p(x)\,dx \ , \ \forall p \in \mathbb{P}_3$$

Αν τώρα $p_2 \in \mathbb{P}_2$ είναι το πολυώνυμο παρεμβολής της f στα σημεία

$x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$, θα έχουμε ότι το σφάλμα

$$R_3(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b p_2(x)\,dx$$

Όμως $\displaystyle\int_a^b p_2(x)\,dx = Q_3(p_2) = \sum_{i=0}^{2} w_i\, p_2(x_i)$

Έστω τώρα $p_3 \in \mathbb{P}_3$ το πολυώνυμο παρεμβολής Hermite τ.ω.

$p_3(x_i) = f(x_i)$ και επιπλέον $p_3'(x_1) = f'(x_1)$

Τότε λόγω της παρεμβολής του p_3 στα σημεία x_0, x_1, x_2 θα έχουμε

$$Q_3(p_2) = Q_3(p_3) = \int_a^b p_3(x)\,dx$$

Συνεπώς

$$R_3(f) = \int_a^b \left(f(x) - p_3(x)\right)dx$$

Είχαμε δει σε Άσκηση (αλλά και εύκολα μπορούμε να δείξουμε ακολουθώντας την απόδειξη του θεωρήματος για το σφάλμα στην παρεμβολή Hermite) ότι

$$f(x) - p_3(x) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi)\,(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b), \qquad \xi \in (a,b)$$

Συνεπώς

$$R_3(f) = -\frac{1}{4!} \int_a^b (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (b-x)\, f^{(4)}(\xi_{(x)})\,dx$$

Αν υποθέσουμε λοιπόν ότι $f \in C^4[a,b]$, $\exists\ \xi_1 \in (a,b)$ τ.ω.

$$R_3(f) = -\frac{1}{24} f^{(4)}(\xi_1) \int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2 (b-x)\,dx$$

$$= -\frac{(b-a)^5}{2^4 \cdot 180} f^{(4)}(\xi_1)$$

Αν τώρα θεωρήσουμε $n \in \mathbb{N}$ να είναι άρτιος αριθμός,

$h = \frac{(b-a)}{n}$ και $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$, θα έχουμε

διαστήματα $[x_0, x_2]$, $[x_2, x_4]$, …, $[x_{n-2}, x_n]$.

Σε κάθε διάστημα εφαρμόζουμε τον τύπο του Simpson και αθροίζουμε τα αποτελέσματα οπότε προκύπτει ο σύνθετος τύπος του Simpson

$$Q_{n+1}^{S}(f) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

Το φράγμα

$$R^S_{n+1}(f) = \int_a^b f(x)dx - Q^S_{n+1}(f)$$

$$= -\frac{1}{2^4 \cdot 180}\left\{(x_2-x_0)^5 f^{(4)}(\xi_1) + \dots + (x_n-x_{n-2})^5 f^{(4)}(\xi_{n/2})\right\}$$

$$= -\frac{(2h)^5}{2^4 \cdot 180} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) = -\frac{h^4}{180}\left[2h \cdot \frac{n}{2}\right] \frac{1}{(n/2)} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i)$$

$$= -\frac{(b-a)}{180} \cdot \underline{h^4} \cdot f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)$$