

ΕΝΟΤΗΤΑ 6

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ-ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ

Α. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ (ή ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΔΙΑΦΟΡΙΣΗ)

6.1. Εισαγωγή

Θα ασχοληθούμε με τη μελέτη βασικών μεθόδων αριθμητικής παραγωγίσις, δηλαδή μεθόδων προσδιορισμού ποσοτήτων που υπόκεινται σε μεταβολές. Η επιλογή της κατάλληλης αριθμητικής μεθόδου υπολογισμού παραγώγων εξαρτάται από την ακρίβεια και το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου.

6.2. Μέθοδοι Αριθμητικής προσέγγισης παραγώγων.

6.2.1. Με χρήση αναπτύγματος Taylor

Είναι γνωστό ότι η παράγωγος 1ης τάξης μιας συνάρτησης f (που πληροί βασικές συνθήκες έτσι, ώστε να είναι παραγωγίσιμη) δίνεται από τη σχέση

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

η οποία για h πολύ μικρό μπορεί να γραφεί

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

και καλείται *προς τα εμπρός διαφορά 1ης τάξης*. Οι διαφορές αυτού του τύπου αν και αποτελούν τον απλούστερο τρόπο εύρεσης παραγώγων συναρτήσεων εντούτοις μειονεκτούν στην ακρίβεια (στο σφάλμα της μεθόδου). Για την εύρεση της τάξης σφαλμάτων που εμπεριέχονται σ' αυτό τον τρόπο αριθμητικής προσέγγισης παραγώγων σε μία προσπάθεια να συγκρίνουμε την ακρίβεια αυτής της μεθόδου με την ακρίβεια άλλων προσεγγιστικών μεθόδων παραγωγίσις κάνουμε χρήση του αναπτύγματος Taylor για τη συνάρτηση f .

Θεωρούμε μια συνάρτηση $f \in C[a, b]$ για την οποία οι τιμές της $f(x_i)$ σε $(n+1)$ σε πλήθος

διαφορετικά ισαπέχοντα σημεία του $[a, b]$ x_i , με $x_{i+1} - x_i = h \left(h = \frac{b-a}{n} \right)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$,

είναι γνωστές. Υποθέτουμε επίσης ότι όλες οι παράγωγοι ανώτερης τάξης της f σε κάθε σημείο του $[a, b]$ υπάρχουν και είναι συνεχείς. Τότε το ανάπτυγμα Taylor της f με κέντρο το σημείο x_i , μέχρι και τον 1ο όρο, δίνεται από τη σχέση

$$f(x) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}(x - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_i)^2, \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}),$$

όπου $R_2(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_i)^2$ το σφάλμα προσέγγισης, $i = 0, 1, 2, \dots, n$.

Με αποκοπή του όρου του σφάλματος το παραπάνω ανάπτυγμα μπορεί να γραφεί

$$f(x) \approx f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}(x - x_i).$$

Για $x \rightarrow x_{i+1}$ και $x_{i+1} - x_i = h$ έχουμε ότι

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i) \cdot h \quad \eta \quad f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$$

η προς τα εμπρός προσέγγιση της 1ης παραγώγου της f στο σημείο x_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$, με απόλυτο σφάλμα προσέγγισης

$$E_\pi = \left| f'(x_i) - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \right| \left(= \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} \cdot f''(\xi) \right) = \frac{h}{2} \cdot f''(\xi), \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}),$$

$i = 0, 1, 2, \dots, n$. Δεδομένου ότι η 2η παράγωγος στο διάστημα διαμερισμού είναι απόλυτα φραγμένη προκύπτει ότι και το απόλυτο σφάλμα της προσέγγισης είναι φραγμένο, ενώ η τάξη του σφάλματος είναι $O(h)$. (Είναι γνωστό ότι το απόλυτο σφάλμα προσέγγισης $E_\pi(h)$ έχει τάξη σφάλματος h^m , $m \in \mathbb{N}^*$ (συμβολικά $O(h^m)$) αν υπάρχει $\ell > 0$ έτσι, ώστε $E_\pi(h) \leq \ell \cdot h^m$).

Όμοια μπορούμε να σχηματίσουμε την προς τα πίσω προσέγγιση της 1ης παραγώγου της f στο σημείο x_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$,

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h}.$$

Αν εργαστούμε όμοια θεωρώντας αναπτύγματα Taylor με όρους περισσότερων του ενός σχηματίζουμε τους ακόλουθους πίνακες προς τα εμπρός και προς τα πίσω προσεγγίσεων (διαφορών) παραγώγων 1ης, 2^{ης}, 3ης τάξης κλπ της f .

ΠΙΝΑΚΑΣ 1 | Προς τα εμπρός διαφορές διαφόρων παραγώγων

1. $f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$)
2. $f''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$)
3. $f'''(x) = \frac{f(x+3h) - 3f(x+2h) + 3f(x+h) - f(x)}{h^3}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$) κλπ

ΠΙΝΑΚΑΣ 2 | Προς τα πίσω διαφορές διαφόρων παραγώγων

1. $f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$)
2. $f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$)
3. $f'''(x) = \frac{f(x) - 3f(x-h) + 3f(x-2h) - f(x-3h)}{h^3}$ (με ακρίβεια 1ης τάξης $O(h)$) κλπ

6.2.2. Μέθοδος των προσδιοριστέων συντελεστών

Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται όταν δεν είναι εύκολη η εύρεση της παραγώγου οποιασδήποτε τάξης μιας συνάρτησης f . Στην περίπτωση αυτή θεωρούμε μία πολυωνυμική προσέγγιση της παραγώγου της f και προσδιορίζουμε τους άγνωστους συντελεστές της προσέγγισης εργαζόμενοι ως εξής:

1. Για τον υπολογισμό της $f'(x_i)$ (παράγωγος 1ης τάξης της f στα ισαπέχοντα σημεία x_i) θεωρούμε την πολυωνυμική προσέγγιση

$$f'(x_i) = a \cdot f(x_i) + b \cdot f(x_{i+1}) + c \cdot f(x_{i+2}), \quad a, b, c \in \mathbb{R}$$

και $x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = h$.

2. Δεδομένου ότι η εύρεση του παραπάνω προσεγγιστικού τύπου αριθμητικής παραγωγίσης απαιτεί τον προσδιορισμό των τριών αγνώστων συντελεστών a, b, c θεωρούμε ότι ο παραπάνω τύπος είναι ακριβής για τις τρεις συναρτήσεις $f_1(x) = 1$, $f_2(x) = x - x_i$, $f_3(x) = (x - x_i)^2$.

Επομένως για

(i) $f_1(x) = 1$ προκύπτει $a + b + c = 0$ ($f'_1(x) = 0$)

(ii) $f_2(x) = x - x_i$ προκύπτει $b \cdot h + 2c \cdot h = 1$ ($f'_2(x) = 1$) ($x_{i+2} - x_i = 2h$)

(iii) $f_3(x) = (x - x_i)^2$ προκύπτει $0 = b \cdot h^2 + 4ch^2$

$$(f'_3(x) = 2(x - x_i), \quad (x_{i+1} - x_i) = h^2, \quad (x_{i+2} - x_i)^2 = (2h)^2 = 4h^2)$$

3. Οι παραπάνω τρεις σχέσεις σχηματίζουν το ακόλουθο γραμμικό σύστημα τριών εξισώσεων με τρεις αγνώστους a, b, c

$$a + b + c = 0$$

$$b \cdot h + 2c \cdot h = 1$$

$$b \cdot h^2 + 4ch^2 = 0$$

το οποίο έχει μοναδική λύση την $(a, b, c) = \left(\frac{-3}{2h}, \frac{2}{h}, \frac{-1}{2h}\right)$.

4. Επομένως ο προσεγγιστικός τύπος αριθμητικής παραγωγίσης με εφαρμογή της μεθόδου των προσδιοριστέων συντελεστών είναι

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h} [-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})].$$

Παρατήρηση

Η μέθοδος των προσδιοριστέων συντελεστών είναι ακριβής για την προσέγγιση παραγώγων πολυωνυμικών συναρτήσεων βαθμού το πολύ 2 με ακρίβεια 2ης τάξης $O(h^2)$.

6.2.3. Αριθμητική παραγωγή μέσω πολυωνύμων παρεμβολής Lagrange

Έχουμε ήδη αναφέρει ότι τα πολυώνυμα παρεμβολής Lagrange αποτελούν κατάλληλες πολυωνυμικές προσεγγίσεις συνεχών συναρτήσεων. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι και οι παράγωγοί τους (άμεσα προσδιορισμένες) αποτελούν κατάλληλες προσεγγίσεις των παραγώγων των συναρτήσεων.

Παράδειγμα

Να βρεθεί κατάλληλος προσεγγιστικός τύπος αριθμητικής παραγωγής της $f'(x)$ (f συνεχής συνάρτηση σε κλειστό διάστημα του \mathbb{R}) χρησιμοποιώντας πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange 2ου βαθμού, που παρεμβάλλει την f σε τρία σημεία x_0 , $x_1 = x_0 + h$ και $x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h$.

Λύση

Είναι γνωστό ότι το ζητούμενο πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange δίνεται από τη σχέση

$$f(x) \approx p_2(x) = L_0(x) \cdot f(x_0) + L_1(x) \cdot f(x_1) + L_2(x) \cdot f(x_2),$$

όπου

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{(x-x_1) \cdot (x-x_2)}{(x_0-x_1) \cdot (x_0-x_2)} = \frac{[x-(x_0+h)] \cdot [x-(x_0+2h)]}{[x_0-(x_0+h)] \cdot [x_0-(x_0+2h)]} = \\ &= \frac{x^2 - (2x_0+3h) \cdot x + (x_0+h) \cdot (x_0+2h)}{2h^2}, \end{aligned}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_2)}{(x_1-x_0) \cdot (x_1-x_2)} = -\frac{x^2 - (2x_0+2h) \cdot x + x_0(x_0+h)}{h^2},$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_1)}{(x_2-x_0) \cdot (x_2-x_1)} = \frac{x^2 - (2x_0+h) \cdot x + x_0(x_0+h)}{2h^2}.$$

Επομένως

$$f'(x) \approx p_2'(x) = L_0'(x) \cdot f(x_0) + L_1'(x) \cdot f(x_1) + L_2'(x) \cdot f(x_2)$$

με

$$L_0'(x) = \frac{2x - (2x_0 + 3h)}{2h^2},$$

$$L_1'(x) = -\frac{2x - (2x_0 + 2h)}{h^2},$$

$$L_2'(x) = \frac{2x - (2x_0 + h)}{2h^2}.$$

Οπότε θα ισχύει

$$\begin{aligned} f'(x) \approx p_2'(x) &= \frac{2x - (2x_0 + 3h)}{2h^2} \cdot f(x_0) - \frac{2x - (2x_0 + 2h)}{h^2} \cdot f(x_0 + h) + \\ &+ \frac{2x - (2x_0 + h)}{2h^2} \cdot f(x_0 + 2h). \end{aligned}$$

Ειδικότερα η προσεγγιστική τιμή $f'(x_0)$ θα είναι

$$f'(x_0) \approx p'_2(x_0) \stackrel{x=x_0}{=} \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)}{2h}$$

όμοια με εκείνη που προέκυψε με εφαρμογή της μεθόδου των προσδιοριστέων συντελεστών.

Παρατηρήσεις

1. Η τάξη προσέγγισης της $f'(x_0)$ από το $p'_2(x_0)$ είναι τετραγωνική ($O(h^2)$) ως προς το σφάλμα αποκοπής h . (Πράγματι αρκεί να εφαρμόσουμε το ανάπτυγμα Taylor για την προσέγγιση των σημείων $f(x_0+h)$, $f(x_0+2h)$). Αυτό σημαίνει ότι η προσέγγιση είναι ακριβής στην περίπτωση αυτή για πολυωνυμικές συναρτήσεις f βαθμού το πολύ 2.

2. Ανάλογοι προσεγγιστικοί τύποι αριθμητικής παραγωγίσης μέσω πολυωνύμων παρεμβολής Lagrange προκύπτουν στην περίπτωση που τα σημεία παρεμβολής δεν είναι ισαπέχοντα.

Από τα παραπάνω προκύπτει γενικά για $n=2$ ότι

$$f'(x) \approx p'_2(x) = L'_0(x) \cdot f(x_0) + L'_1(x) \cdot f(x_1) + L'_2(x) \cdot f(x_2)$$

με

$$L'_0(x) = \frac{2x - (x_1 + x_2)}{(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2)},$$

$$L'_1(x) = \frac{2x - (x_0 + x_2)}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2)},$$

$$L'_2(x) = \frac{2x - (x_0 + x_1)}{(x_2 - x_0) \cdot (x_2 - x_1)}$$

και $f''(x) \approx p''_2(x) = L''_0(x) \cdot f(x_0) + L''_1(x) \cdot f(x_1) + L''_2(x) \cdot f(x_2)$

με

$$L''_0(x) = \frac{2}{(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2)},$$

$$L''_1(x) = \frac{2}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2)},$$

$$L''_2(x) = \frac{2}{(x_2 - x_0) \cdot (x_2 - x_1)}.$$

Ειδικότερα για την προσέγγιση της παραγώγου 2ης τάξης μιας συνεχούς συνάρτησης f μέσω πολυωνύμων παρεμβολής Lagrange βαθμού $n=2$ καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η προσέγγιση αυτή είναι η ίδια για κάθε $x \in [x_0, x_2]$ (το οποίο δεν μπορεί να συμβαίνει) γεγονός που μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο βαθμός των πολυωνύμων Lagrange που χρησιμοποιούμε για την προσέγγιση μιας παραγώγου της f πρέπει να είναι μεγαλύτερος από την τάξη της παραγώγου.

Γενικά για κάθε $n \geq 2$ επιλέγοντας $(n+1)$ σε πλήθος σημεία παρεμβολής x_0, x_1, \dots, x_n (ισαπέχοντα ή όχι) η προσέγγιση της $f'(x_i)$ μέσω πολυωνύμου παρεμβολής Lagrange n -οστού βαθμού δίνεται από τη σχέση

$$f'(x_i) = \sum_{j=0}^n L'_j(x_i) \cdot f(x_j) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^n (x_i - x_j), \quad \xi_x \in (a, b)$$

(όπου $[a, b]$ το διάστημα ορισμού της f). Η παραπάνω σχέση αποτελεί έναν γραμμικό συνδυασμό των τιμών $f(x_j)$, $j = 0, 1, 2, \dots, n$ και είναι προτιμότερο να χρησιμοποιείται για $n = 2$.

B. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ

6.3. Εισαγωγή

Θα ασχοληθούμε με τη μελέτη βασικών μεθόδων αριθμητικής προσέγγισης ολοκληρωμάτων της μορφής $I = \int_a^b f(x) dx$, $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$, $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ μία φραγμένη, ολοκληρώσιμη συνάρτηση, τα οποία δεν μπορούν να υπολογιστούν με χρήση κλασικών τεχνικών ολοκλήρωσης. Τέτοιου είδους προσεγγιστικούς υπολογισμούς ολοκληρωμάτων συναντά κανείς σε εφαρμογές ως μέρος πιο σύνθετων προβλημάτων.

Στην *αριθμητική ολοκλήρωση* συνήθως προσεγγίζουμε το ολοκλήρωμα I με τύπους ολοκλήρωσης της μορφής

$$A_{n+1}(f) = w_0 \cdot f(x_0) + w_1 \cdot f(x_1) + \dots + w_n \cdot f(x_n),$$

όπου x_i σημεία του διαστήματος ολοκλήρωσης $[a, b]$ και $w_i \in \mathbb{R}$ βάρη, $i = 0, 1, 2, \dots, n$. Ειδικότερα οι πιο συνήθεις τύποι αριθμητικής ολοκλήρωσης προκύπτουν μέσω παρεμβολής της f στα σημεία x_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$, με κατάλληλα πολυώνυμα ή τμηματικά πολυώνυμα παρεμβολής n -οστού βαθμού $p_n(x)$ και ολοκλήρωσης της παρεμβάλλουσας συνάρτησης έτσι, ώστε

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_n(x) dx$$

$$\text{ή } \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i \cdot f(x_i), \quad w_i \in \mathbb{R}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

6.4. Σφάλμα αποκοπής στην Αριθμητική Ολοκλήρωση

Είναι γνωστό ότι αν $p_n(x)$ είναι ένα πολυώνυμο παρεμβολής n -οστού βαθμού που παρεμβάλλει μία συνάρτηση $f \in C^{n+1}[a, b]$ σε $(n+1)$ – σε πλήθος σημεία, x_0, x_1, \dots, x_n , τότε το σφάλμα παρεμβολής δίνεται από τη σχέση

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n) f^{(n+1)}(\xi_1(x)),$$

όπου $\xi_1(x) \in [x_0, x_n]$ με $x_0 = a$, $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_n = b$.

Επομένως το ζητούμενο σφάλμα αποκοπής στην Αριθμητική Ολοκλήρωση ορίζεται να είναι

$$E_n(f) = \int_a^b [f(x) - p_n(x)] dx = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b (x-x_0) \cdot (x-x_1) \cdots (x-x_n) f^{(n+1)}(\xi_1(x)) dx$$

$$\xi_1(x) \in [x_0, x_n] \quad \text{με} \quad x_0 = a, \quad x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad x_n = b.$$

6.5. Κλειστοί τύποι αριθμητικής ολοκλήρωσης Newton-Cotes

Έστω $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$ και $f \in C[a, b]$. Για την εύρεση του κατάλληλου κλειστού τύπου (κανόνα) αριθμητικής ολοκλήρωσης Newton-Cotes A_{n+1} με $(n+1)$ σε πλήθος σημεία (κόμβους) για την προσέγγιση του ολοκληρώματος $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ εργαζόμαστε ως εξής:

Θεωρούμε έναν διαμερισμό

$$D = \left\{ x_i / x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n} \right\}$$

του διαστήματος ολοκλήρωσης $[a, b]$ σε ισαπέχοντα διαστήματα $[x_i, x_{i+1}]$, με $x_{i+1} - x_i = h$,

$i = 0, 1, 2, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$. (Οι τύποι ολοκλήρωσης που θα μελετήσουμε καλούνται *κλειστοί*,

διότι χρησιμοποιούν τα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης ως σημεία του διαμερισμού σε αντίθεση με τους *ανοικτούς τύπους Newton-Cotes*). Στη συνέχεια βρίσκουμε κατάλληλο μοναδικό πολυώνυμο παρεμβολής $p_n(x)$ n -οστού βαθμού που παρεμβάλει την f σε $(n+1)$ σε πλήθος σημεία x_0, x_1, \dots, x_n . Τότε

$$A_{n+1}(f) = I(p_n(x)) = \int_a^b p_n(x) dx \quad \text{και} \quad I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_n(x) dx$$

έτσι, ώστε το αντίστοιχο σφάλμα αποκοπής $E_n(f) = I(f) - A_{n+1}(f)$ να είναι μηδέν.

Δεδομένου ότι ισχύει: αν A_n είναι ο τύπος ολοκλήρωσης Newton-Cotes στο $[a, b]$ με n σημεία και f μία συνεχής συνάρτηση στο $[a, b]$, τότε γενικά η ακολουθία $(A_n(f))_{n \in \mathbb{N}}$ δεν συγκλίνει στο ολοκλήρωμα $I(f)$ όταν $n \rightarrow +\infty$. Αυτό σημαίνει ότι από τους κλειστούς τύπους Newton-Cotes πρακτικά επιλέγονται εκείνοι που αφορούν σε μικρό πλήθος σημείων έτσι, ώστε να εφαρμοστούν στα υποδιαστήματα (θα ασχοληθούμε με ισαπέχοντα και κατά κανόνα ομοιόμορφα υποδιαστήματα) στα οποία διαμερίζεται το αρχικό διάστημα ολοκλήρωσης $[a, b]$. Με τον τρόπο αυτό δημιουργούνται οι λεγόμενοι *σύνθετοι κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης Newton-Cotes*, οι οποίοι αφορούν σε ολοκλήρωση πολυωνύμων παρεμβολής σε κάθε υποδιάστημα.

6.5.1. Κανόνας Τραπεζίου

6.5.1.1. Απλός Κανόνας Τραπεζίου

Χρησιμοποιώντας τη γραμμική προσέγγιση για τη συνάρτηση f θεωρούμε πολυώνυμο παρεμβολής Newton 1ου βαθμού που παρεμβάλει την f σε δύο σημεία $x_0=a$, $x_1=b$ της μορφής

$$p_1(x) = f(\alpha) + f'[\alpha, b] \cdot (x - \alpha) = f(\alpha) + \frac{f(b) - f(\alpha)}{b - \alpha} (x - \alpha) \text{ έτσι, ώστε } f(x) \approx p_1(x), \text{ για}$$

κάθε $x \in [\alpha, b]$.

Τότε θα ισχύει

$$I(f) = \int_{\alpha}^b f(x) dx \approx \int_{\alpha}^b p_1(x) dx = \frac{f(\alpha) + f(b)}{2} \cdot (b - \alpha) = A_2^T(f)$$

$$\left(\text{ή } \frac{h}{2} [f(\alpha) + f(b)], \text{ } h = b - \alpha \right)$$

ο απλός κανόνας τραπεζίου (δηλαδή το εμβαδόν τραπεζίου με μεγάλη βάση $f(b)$, μικρή βάση $f(\alpha)$ και ύψος $(b - \alpha)$).

Από τον τύπο του σφάλματος αποκοπής αριθμητικής ολοκλήρωσης για $n=1$ προκύπτει ότι το τοπικό σφάλμα αποκοπής (του απλού κανόνα τραπεζίου) δίνεται από τη σχέση

$$E_1(f) = \frac{1}{2} \int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (x - b) \cdot f''(\xi_1(x)) dx, \quad \xi_1(x) \in (\alpha, b), \text{ για κάθε } x \in [\alpha, b] \text{ και για κάθε}$$

$f \in C^2([\alpha, b])$ ή

$$E_1(f) = -\frac{1}{2} \int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (b - x) \cdot f''(\xi_1(x)) dx.$$

Έστω $m = \min_{x \in [\alpha, b]} f''(x)$, $M = \max_{x \in [\alpha, b]} f''(x)$. Επομένως προκύπτει ότι

$$m \cdot \int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (b - x) dx \leq -2E_1(f) \leq M \cdot \int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (b - x) dx$$

(ισχύει ότι $(x - \alpha) \cdot (b - x) \geq 0$, για κάθε $x \in [\alpha, b]$)

$$\text{ή} \quad m \leq \frac{-2E_1(f)}{\int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (b - x) dx} \leq M.$$

Λόγω του γεγονότος ότι η $f''(x)$ είναι συνεχής στο $[\alpha, b]$ και εφαρμόζοντας το Θεώρημα Μέσης Τιμής του Ολοκληρωτικού Λογισμού προκύπτει ότι υπάρχει $\xi \in (\alpha, b)$ έτσι, ώστε

$$E_1(f) = -\frac{1}{2} f''(\xi) \int_{\alpha}^b (x - \alpha) \cdot (b - x) dx \text{ ή υπάρχει } \xi \in (\alpha, b) \text{ έτσι, ώστε}$$

$$E_1(f) = -\frac{(b - \alpha)^3}{12} f''(\xi), \text{ για κάθε } f \in C^2([\alpha, b]).$$

6.5.1.2. Σύνθετος Κανόνας Τραπεζίου

Θεωρώντας τον διαμερισμό του $[\alpha, b]$ (βλ. § 6.5) προκύπτει ότι

$$I(f) = \int_{\alpha}^b f(x) dx = \int_{x_0=\alpha}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x) dx.$$

Επομένως εφαρμόζοντας τον απλό κανόνα τραπεζίου για την προσέγγιση των παραπάνω ορισμένων ολοκληρωμάτων προκύπτει ότι

$$\begin{aligned}
I(f) &\approx \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \dots + \frac{h}{2} [f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\
&= \frac{h}{2} [f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1})) + f(x_n)] \\
&= \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right] = A_{n+1}^T(f).
\end{aligned}$$

Η παραπάνω σχέση καλείται *σύνθετος κανόνας τραπεζίου*.

Το ολικό σφάλμα αποκοπής (του σύνθετου κανόνα τραπεζίου) ισούται με το άθροισμα των τοπικών σφαλμάτων του απλού κανόνα τραπεζίου σε κάθε ένα από τα υποδιαστήματα $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, του διαστήματος $[a, b]$. Οπότε θα ισχύει ότι:

$$\begin{aligned}
E_n^T(f) &= \int_a^b f(x) dx - A_{n+1}^T(f) \\
&= -\frac{1}{12} [(x_1 - x_0)^3 f''(\xi_1) + (x_2 - x_1)^3 f''(\xi_2) + \dots + (x_n - x_{n-1})^3 f''(\xi_n)] \\
&= -\frac{h^3}{12} \cdot \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \\
&= -\frac{h^2}{12} \cdot \frac{(b-a)}{n} \cdot \sum_{i=1}^n f''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_i), i = 0, 1, 2, \dots, n.
\end{aligned}$$

Αλλά $f''(x)$ συνεχής στο $[a, b]$ και

$$m = \min_{x \in [a, b]} f''(x) \leq \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \leq M = \max_{x \in [a, b]} f''(x).$$

Επομένως υπάρχει $\xi \in (a, b)$ έτσι, ώστε

$$E_n^T(f) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 \cdot f''(\xi), \quad \text{για κάθε } f \in C^2([a, b]).$$

Παρατηρήσεις

1. Η παραπάνω σχέση ολικού σφάλματος αποκοπής εκφράζει ότι το σφάλμα είναι τάξης 2. Γενικά η τάξη του σφάλματος του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου είναι τουλάχιστον 2 στην περίπτωση που η συνάρτηση προς ολοκλήρωση είναι ομαλή.
2. Αν $\max |f''(\xi)| = M$, $a < \xi < b$, τότε ισχύει ότι

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{(b-a)}{12} h^2 \cdot M \text{ (άνω φράγμα ολικού σφάλματος αποκοπής αριθμητικής}$$

ολοκλήρωσης)

σχέση η οποία δηλώνει ότι ο σύνθετος κανόνας του τραπεζίου έχει ταχύτητα σύγκλισης $O(h^2)$ για $f \in C^2([a, b])$.

3. Αν θεωρήσουμε έναν τυχαίο διαμερισμό του διαστήματος ολοκλήρωσης

$$D = \{x_i, i = 0, 1, 2, \dots, n / a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\},$$

τότε ο σύνθετος κανόνας του τραπεζίου δίνεται από τη σχέση

$$A_{n+1}^T(f) = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_{i-1})}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)].$$

6.5.2. Κανόνας 1/3 Simpson

6.5.2.1. Απλός Κανόνας 1/3 Simpson

Χρησιμοποιώντας την τετραγωνική προσέγγιση για τη συνάρτηση f θεωρούμε μοναδικό πολυώνυμο παρεμβολής Newton 2ου βαθμού που παρεμβάλει την f σε τρία σημεία $x_0 = a$,

$$x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b \quad \text{της μορφής}$$

$$p_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1] \cdot (x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2] (x - x_0)(x - x_1).$$

Τότε θα ισχύει

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_2(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)], \quad h = \frac{b-a}{2}.$$

Η παραπάνω σχέση καλείται *απλός κανόνας Simpson*.

Αποδεικνύεται ότι το τοπικό σφάλμα αποκοπής (του απλού κανόνα Simpson) δίνεται από τη σχέση

$$E_2(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b), \quad \text{για κάθε } f \in C^4([a, b]).$$

Παρατήρηση

Με δεδομένο ότι το τοπικό σφάλμα αποκοπής του απλού κανόνα 1/3 του Simpson είναι ανάλογο της παραγώγου της f 4ης τάξης προκύπτει ότι ο κανόνας εμφανίζει ακρίβεια 3ης τάξης γεγονός που τον καθιστά πιο ακριβή σε σχέση με τον κανόνα τραπεζίου.

6.5.2.2. Σύνθετος Κανόνας 1/3 Simpson

Έστω $n \in \mathbb{N}$ άρτιος αριθμός, $x_0 = a$, $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_n = b$.

Εφαρμόζοντας τον απλό κανόνα 1/3 του Simpson στα διαστήματα $[x_0, x_2]$, $[x_2, x_4]$, ..., $[x_{n-2}, x_n]$ προκύπτει ότι

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \int_{x_0=a}^{x_2} f(x) dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n=b} f(x) dx \quad \eta$$

$$I(f) \approx \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \dots + \frac{h}{3} [f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] \quad \eta$$

$$A_{n+1}^S(f) = \frac{(b-a)}{3n} \left[f(x_0) + 4 \cdot \sum_{i=1,3,5,\dots}^{n-1} f(x_i) + 2 \cdot \sum_{j=2,4,6,\dots}^{n-2} f(x_j) + f(x_n) \right].$$

Η παραπάνω σχέση καλείται *σύνθετος κανόνας 1/3 Simpson*.

Παρατηρήσεις

1. Ο σύνθετος κανόνας 1/3 Simpson απαιτεί άρτιο πλήθος διαστημάτων n .
2. Αποδεικνύεται ότι το ολικό σφάλμα αποκοπής του σύνθετου κανόνα 1/3 Simpson ισούται με το άθροισμα των τοπικών σφαλμάτων του απλού κανόνα 1/3 Simpson σε κάθε ένα από τα $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{n-2}, x_n]$ του διαστήματος $[a, b]$. Οπότε θα ισχύει ότι:

$$E_n^S(f) = -\frac{b-a}{180} \cdot h^4 \cdot f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b), \text{ για κάθε } f \in C^4([a, b]).$$

3. Από το ολικό σφάλμα αποκοπής προκύπτει ότι αν $f \in C^4([a, b])$, τότε ο σύνθετος κανόνας Simpson έχει ταχύτητα σύγκλισης $O(h^4)$.

6.5.3. Κανόνας 3/8 Simpson

6.5.3.1. Απλός κανόνας 3/8 Simpson

Χρησιμοποιώντας την κυβική προσέγγιση για τη συνάρτηση f θεωρούμε μοναδικό πολυώνυμο παρεμβολής Newton 3ου βαθμού $p_3(x)$ που παρεμβάλει την f σε τέσσερα σημεία

$$x_0 = a, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h, x_3 = b, h = \frac{b-a}{3}, \text{ της μορφής}$$

$$p_3(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0) \cdot (x - x_1) \\ + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2).$$

Τότε θα ισχύει

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_3(x) dx = \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)].$$

Η παραπάνω σχέση καλείται *απλός κανόνας 3/8 Simpson*.

Εργαζόμενοι όμοια όπως στους προηγούμενους απλούς κανόνες ολοκλήρωσης προκύπτει ότι το τοπικό σφάλμα αποκοπής του απλού κανόνα 3/8 Simpson δίνεται από τη σχέση

$$E_3^S(f) = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b), \text{ για κάθε } f \in C^4([a, b]).$$

Παρατηρήσεις

1. Στον απλό κανόνα 3/8 Simpson τα ακραία σημεία του διαστήματος ολοκλήρωσης έχουν βάρος 1 και τα ενδιάμεσα σημεία βάρος 3.
2. Συγκρίνοντας το τοπικό σφάλμα αποκοπής του απλού κανόνα 3/8 Simpson με το αντίστοιχο του απλού κανόνα 1/3 Simpson, παρατηρούμε ότι εξαιτίας του μεγαλύτερου παρονομαστή ο κανόνας 3/8 Simpson οδηγεί σε ελαφρώς μεγαλύτερη ακρίβεια από τον κανόνα 1/3 Simpson. Εντούτοις ο κανόνας 1/3 Simpson είναι αυτός που χρησιμοποιείται συνήθως γιατί μέσω αυτού επιτυγχάνεται ακρίβεια 3ης τάξης με τρία σημεία και όχι με τέσσερα σημεία, όπως απαιτεί ο κανόνας 3/8 Simpson.

6.5.3.2. Σύνθετος κανόνας 3/8 Simpson

Εργαζόμενοι όμοια όπως στον σύνθετο κανόνα 1/3 Simpson θεωρώντας αριθμό διαστημάτων πολλαπλάσιο του 3 προκύπτει ο σύνθετος κανόνας 3/8 Simpson

$$A_{n+1}^{S^*}(f) = \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3 \cdot \sum_{i=0}^{(n/3)-1} f(x_{3i+1}) + 3 \sum_{i=0}^{(n/3)-1} f(x_{3i+2}) + 2 \cdot \sum_{i=0}^{(n/3)-2} f(x_{3i+3}) + f(x_n) \right],$$

όπου $x_i = \alpha + i \cdot h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, $h = \frac{b - \alpha}{n}$.

Παρατήρηση

Το ολικό σφάλμα αποκοπής του σύνθετου κανόνα 3/8 του Simpson δίνεται από τη σχέση

$$E_n^{S^*}(f) = -\frac{h^4}{80} (b - \alpha) \cdot f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (\alpha, b), \text{ για κάθε } f \in C^4([\alpha, b]), \quad h = \frac{b - \alpha}{n}.$$

6.6. Μέθοδος Romberg

Θεωρούμε ένα σύνθετο τύπο αριθμητικής ολοκλήρωσης στο $[\alpha, b]$ βήματος h $A_{n+1}^h(f)$ και ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα σφάλματος

$$I(f) - A_{n+1}^h(f) = \int_{\alpha}^b f(x) dx - A_{n+1}^h(f) = c_2 \cdot h^2 + c_4 \cdot h^4 + \dots + O(h^{2k}),$$

όπου $c_i \in \mathbb{R}$ ($i = 2, 4, \dots$) σταθερές ανεξάρτητες του βήματος h και εξαρτώμενες από την f , για κάθε $f \in C^{2k}([\alpha, b])$ έτσι, ώστε το σφάλμα να είναι της τάξης του h^2 για $c_2 \neq 0$. (Είναι γνωστό ότι το σύμβολο του Landau O εκφράζει ότι: θα λέμε ότι η g είναι της τάξης του h^{2m} για $h \rightarrow 0$, δηλαδή $g(h) = O(h^{2k})$ αν υπάρχει $c \in \mathbb{R}$ έτσι, ώστε για κάθε $0 < h < b - \alpha$ να ισχύει ότι $|g(h)| \leq c \cdot h^{2k}$).

Αν χρησιμοποιήσουμε έναν διαφορετικό σύνθετο τύπο αριθμητικής ολοκλήρωσης στο $[\alpha, b]$ βήματος π.χ. $h/2$ $A_{n+1}^{h/2}(f)$, τότε το αντίστοιχο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα σφάλματος είναι της μορφής

$$I(f) - A_{n+1}^{h/2}(f) = \int_{\alpha}^b f(x) dx - A_{n+1}^{h/2}(f) = \frac{c_2}{4} \cdot h^2 + \frac{c_4}{16} \cdot h^4 + \dots + O(h^{2k}).$$

Από τις παραπάνω δύο σχέσεις προκύπτει ότι

$$I(f) - \frac{4A_{n+1}^{h/2}(f) - A_{n+1}^h(f)}{3} = c'_4 \cdot h^4 + \dots + O(h^{2k})$$

γεγονός που εκφράζει ότι το σφάλμα του σύνθετου τύπου αριθμητικής ολοκλήρωσης $\frac{1}{3}(4A_{n+1}^{h/2}(f) - A_{n+1}^h(f))$ είναι της τάξης του h^4 , αν και το αντίστοιχο σφάλμα του $A_{n+1}^h(f)$ είναι της τάξης του h^2 . Αυτό σημαίνει ότι ο προσδιορισμός του c_2 δεν παίζει ρόλο στην εύρεση της τάξης του σφάλματος. Αν όμως ήταν γνωστή η ακριβής τιμή του c_2 , τότε το

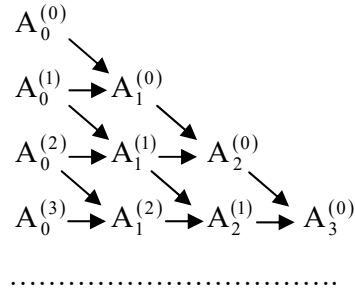
$$I(f) = \int_a^b f(x) dx$$

$$A_{n+1}^h(f) + c_2 \cdot h^2$$

4.

Τα παραπάνω συμπεράσματα οδηγούν στη μέθοδο ολοκλήρωσης του Romberg στην οποία εργαζόμαστε ως εξής:

- για $h = b - a$ κατασκευάζουμε τον πίνακα



όπου $A_0^{(k)}$ ο σύνθετος κανόνας τραπεζίου με βήμα $h/2^k$ και

$$A_\ell^{(k)} = \frac{2^{2\ell} A_{\ell-1}^{(k+1)} - A_{\ell-1}^{(k)}}{2^{2\ell} - 1}, \quad k \in \mathbb{N}, \ell \in \mathbb{N}^*.$$

Παρατηρήσεις

1. Αν η προς ολοκλήρωση συνάρτηση f είναι αρκετά ομαλή, τότε το σφάλμα ολοκλήρωσης της 1ης στήλης του πίνακα είναι της τάξης h^2 , της 2ης στήλης της τάξης h^4 , της 3ης στήλης της τάξης h^6 κλπ.
2. Αν και η μέθοδος ολοκλήρωσης Romberg ισχύει για αρκετά ομαλές συναρτήσεις εντούτοις μπορεί να εφαρμοστεί και για κάθε συνεχή συνάρτηση προς ολοκλήρωση f . Επιπλέον αν η συνάρτηση προς ολοκλήρωση f είναι $2k$ φορές συνεχώς παραγωγίσιμη αλλά όχι $2k+2$, τότε δεν είναι απαραίτητο να υπολογίσουμε όλα τα στοιχεία κάθε γραμμής του πίνακα, αλλά μόνο μέχρι την k -στήλη γιατί μέχρι αυτή τη στήλη έχουμε προσέγγιση της τάξης h^{2k} , ενώ οι επόμενες στήλες δεν δίνουν προσεγγίσεις καλύτερης τάξης.
3. Ο τύπος $A_1^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$, του παραπάνω πίνακα είναι στην πραγματικότητα ο σύνθετος κανόνας $1/3$ του Simpson με βήμα $h/2^{k+1}$. Γενικότερα για κάθε $l \geq 3$ οι τύποι $A_\ell^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$, $\ell \in \mathbb{N}^*$, δεν συμπίπτουν με τους σύνθετους κανόνες ολοκλήρωσης Newton-Cotes.

6.7. Κανόνες ολοκλήρωσης Gauss

Όμως έχουμε ήδη αναφέρει οι κανόνες ολοκλήρωσης Newton-Cotes αφορούν σε ισαπέχοντα σημεία τα οποία είναι πλήρως προσδιορισμένα και ομοιόμορφα κατανεμημένα στο $[a, b]$. Ειδικότερα αν $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$ και $w: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ μία συνάρτηση βάρους, τότε η προσέγγιση του $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ γίνεται με κανόνες ολοκλήρωσης της μορφής

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx w_1 \cdot f(x_1) + \dots + w_n \cdot f(x_n),$$

όπου w_i (βάρη), x_i (σημεία παρεμβολής) $\in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Στην αντίθετη περίπτωση (μη καθορισμένα σημεία) και χρησιμοποιώντας ανάλογο κανόνα ολοκλήρωσης (όχι Newton-Cotes) ζητείται ο προσδιορισμός των σημείων x_i και των βαρών w_i , $i = 1, 2, \dots, n$, έτσι, ώστε να υπάρχει μοναδικός τύπος ολοκλήρωσης Gauss ο οποίος να ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα με τον μέγιστο δυνατό βαθμό (για n σε πλήθος σημεία ο μέγιστος δυνατός βαθμός των πολυωνύμων είναι το πολύ $2n-1$) σύμφωνα με το ακόλουθο

ΘΕΩΡΗΜΑ. Έστω $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$, $w: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ συνάρτηση βάρους και p_n , $n \in \mathbb{N}$, ορθογώνιο πολυώνυμο ως προς w με μέγιστοβάθμιο συντελεστή το 1. Τότε ισχύει ότι:

(α) θεωρώντας ως σημεία x_1, x_2, \dots, x_n τις ρίζες του πολυωνύμου p_n υπάρχουν μονοσήμαντα ορισμένα θετικά βάρη w_1, w_2, \dots, w_n έτσι, ώστε ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss $A(f) = w_1 \cdot f(x_1) + \dots + w_n \cdot f(x_n)$ να ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα βαθμού το πολύ $(2n-1)$,

(β) αν ο παραπάνω κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμα βαθμού το πολύ $(2n-1)$, τότε τα σημεία x_1, x_2, \dots, x_n είναι ρίζες του ορθογωνίου πολυωνύμου p_n ,

(γ) για κάθε $f \in C^{2n}[a, b]$ υπάρχει $\xi \in (a, b)$ έτσι, ώστε το σφάλμα του κανόνα ολοκλήρωσης του Gauss να είναι της μορφής

$$E(f) = \frac{1}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \int_a^b w(x) [p_n(x)]^2 dx.$$

6.7.1. Μέθοδος Gauss τριών σημείων

Θεωρώντας τρία σημεία θα πρέπει να προσδιορίσουμε τρεις συντελεστές $\alpha_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, 3$. Οπότε θα χρειαστούμε πολυώνυμο βαθμού $2n-1 = 2 \cdot 3 - 1 = 5$ $p_5(x)$ της μορφής

$$p_5(x) = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot x + \alpha_2 \cdot x^2 + \alpha_3 \cdot x^3 + \alpha_4 \cdot x^4 + \alpha_5 \cdot x^5$$

έτσι, ώστε

$$\int_a^b f(x) dx \approx w_1 \cdot f(x_1) + w_2 \cdot f(x_2) + w_3 \cdot f(x_3) \approx w_1 \cdot p_5(x_1) + w_2 \cdot p_5(x_2) + w_3 \cdot p_5(x_3).$$

Για $[a, b] = [-1, 1]$ έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x) dx &\approx w_1 \cdot f(x_1) + w_2 \cdot f(x_2) + w_3 \cdot f(x_3) \\ &= w_1 \cdot p_5(x_1) + w_2 \cdot p_5(x_2) + w_3 \cdot p_5(x_3) \\ &= w_1 \cdot (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_1 + \alpha_2 \cdot x_1^2 + \alpha_3 \cdot x_1^3 + \alpha_4 \cdot x_1^4 + \alpha_5 \cdot x_1^5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + w_2 \cdot (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_2 + \alpha_2 \cdot x_2^2 + \alpha_3 \cdot x_2^3 + \alpha_4 \cdot x_2^4 + \alpha_5 \cdot x_2^5) + w_3 \cdot (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_3 + \alpha_2 \cdot x_3^2 + \\
& \quad + \alpha_3 \cdot x_3^3 + \alpha_4 \cdot x_3^4 + \alpha_5 \cdot x_3^5) \\
& = (w_1 + w_2 + w_3) \cdot \alpha_0 + (w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + w_3 \cdot x_3) \cdot \alpha_1 + (w_1 \cdot x_1^2 + w_2 \cdot x_2^2 + w_3 \cdot x_3^2) \cdot \alpha_2 + .. \\
& \quad + (w_1 \cdot x_1^5 + w_2 \cdot x_2^5 + w_3 \cdot x_3^5) \cdot \alpha_5 \text{ και} \\
& \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \int_{-1}^1 p_5(x) dx = \int_{-1}^1 (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot x + \alpha_2 \cdot x^2 + \alpha_3 \cdot x^3 + \alpha_4 \cdot x^4 + \alpha_5 \cdot x^5) dx = \\
& \quad = \alpha_0 \cdot [x]_{-1}^1 + \alpha_1 \cdot \left[\frac{x^2}{2} \right]_{-1}^1 + \alpha_2 \cdot \left[\frac{x^3}{3} \right]_{-1}^1 + \alpha_3 \cdot \left[\frac{x^4}{4} \right]_{-1}^1 + \alpha_4 \cdot \left[\frac{x^5}{5} \right]_{-1}^1 + \alpha_5 \cdot \left[\frac{x^6}{6} \right]_{-1}^1 \\
& \quad = 2\alpha_0 + \frac{2}{3}\alpha_2 + \frac{2}{5}\alpha_4.
\end{aligned}$$

Εξισώνοντας τους συντελεστές των $\alpha_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$ στις δύο παραπάνω σχέσεις προκύπτει σύστημα έξι εξισώσεων με έξι αγνώστους της μορφής

$$\begin{aligned}
w_1 + w_2 + w_3 &= 2 \\
w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + w_3 \cdot x_3 &= 0 \\
w_1 \cdot x_1^2 + w_2 \cdot x_2^2 + w_3 \cdot x_3^2 &= \frac{2}{3} \\
w_1 \cdot x_1^3 + w_2 \cdot x_2^3 + w_3 \cdot x_3^3 &= 0 \\
w_1 \cdot x_1^4 + w_2 \cdot x_2^4 + w_3 \cdot x_3^4 &= \frac{2}{5} \\
w_1 \cdot x_1^5 + w_2 \cdot x_2^5 + w_3 \cdot x_3^5 &= 0
\end{aligned}$$

η επίλυση του οποίου δίνει $x_1 = -\sqrt{3/5}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \sqrt{3/5}$, $w_1 = 5/9$, $w_2 = 8/9$, $w_3 = 5/9$.

Επομένως θα ισχύει ότι

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx 5/9 \cdot f(-\sqrt{3/5}) + 8/9 \cdot f(0) + 5/9 \cdot f(\sqrt{3/5}).$$

Παρατήρηση

Η περίπτωση της μεθόδου ολοκλήρωσης Gauss τριών σημείων που έχει παρουσιαστεί πιο πάνω δεν αποτελεί μοναδική περίπτωση κανόνα ολοκλήρωσης Gauss. Γενικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν προσεγγίσεις περισσότερων σημείων (τεσσάρων, πέντε σημείων κλπ.), οι οποίες οδηγούν σε μεγαλύτερη ακρίβεια προσέγγισης του $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ θεωρώντας μη ισαπέχοντα και όχι πλήρως καθορισμένα σημεία παρεμβολής.

Ασκήσεις

1. Για την αριθμητική προσέγγιση του ολοκληρώματος $I = \int_0^1 \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx$ εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου με σφάλμα μικρότερο του 10^{-6} πόσα σημεία παρεμβολής πρέπει να χρησιμοποιήσουμε;

Λύση

Είναι γνωστό ότι το ολικό σφάλμα αποκοπής του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου είναι

$$E_n^T(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \cdot f''(\xi), \quad \xi \in (a, b), \text{ για κάθε } f \in C^2([a, b]).$$

Επομένως θα έχουμε

$$\left|E_n^T(f)\right| = \left|-\frac{(1-0)^3}{12n^2} \cdot f''(\xi)\right| = \frac{1}{12n^2} \cdot |f''(\xi)|, \quad \xi \in (0, 1),$$

με $f(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$, $f'(x) = \frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)$, $f''(x) = -\frac{\pi^2}{4} \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$, για κάθε $x \in [0, 1]$.

Επιπλέον $M = \max_{\xi \in [0, 1]} |f''(\xi)| = \frac{\pi^2}{4}$. Άρα θα ισχύει ότι

$$\begin{aligned} \left|E_n^T(f)\right| &\leq \frac{1}{12n^2} M = \frac{1}{12n^2} \cdot \frac{\pi^2}{4} \leq 10^{-6} \rightarrow n^2 \geq \frac{1}{12 \cdot 10^{-6}} \cdot \frac{\pi^2}{4} = \frac{10^6 \pi^2}{48} \\ &\rightarrow n \geq \frac{10^3 \pi}{\sqrt{48}} = 453.45. \end{aligned}$$

Επομένως θα χρησιμοποιηθούν τουλάχιστον $n + 1 \geq 454.45$ σημεία παρεμβολής.

2. Να βρεθεί μία προσεγγιστική του ολοκληρώματος $\int_0^4 \frac{dx}{1+x^2}$ εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου και χρησιμοποιώντας 13 σημεία παρεμβολής.

Λύση

Θα χρησιμοποιηθούν 13 σημεία παρεμβολής, δηλαδή $n = 12$ υποδιαστήματα με κοινό πλάτος

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{4-0}{12} = \frac{1}{3}.$$

Κατασκευάζουμε τον πίνακα τιμών της συνάρτησης προς ολοκλήρωση $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, για

κάθε $x \in [0, 4]$ στα 13 σημεία παρεμβολής

x_i	$x_0 = 0$	$x_1 = 1/3$	$x_2 = 2/3$	$x_3 = 1$	$x_4 = 4/3$	$x_5 = 5/3$	$x_6 = 6/3$	$x_7 = 7/3$
$f(x_i)$	1	0.9	0.6923	0.5	0.36	0.2647	0.2	0.1552
x_i	$x_8 = 8/3$	$x_9 = 9/3$	$x_{10} = 10/3$	$x_{11} = 11/3$	$x_{12} = 12/3$			
$f(x_i)$	0.1233	0.1	0.0826	0.0692	0.0588			

Επομένως εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου έχουμε ότι

$$I(f) = \int_0^4 \frac{dx}{1+x^2} \approx \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{11} f(x_i) + f(x_{12}) \right]$$

$$= \frac{1/3}{2} [1 + 2(0.9 + 0.6923 + 0.5 + 0.36 + 0.2647 + 0.2 + 0.1552 + 0.1233 + 0.1 + 0.0826 + 0.0692) + 0.0588].$$

3. Να βρεθεί μία προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα 1/3 του Simpson και χρησιμοποιώντας 11 σημεία παρεμβολής.

Λύση

Θα χρησιμοποιηθούν 11 σημεία παρεμβολής, δηλαδή $n=10$ (άρτιο πλήθος $n=2 \times 5=10$)

υποδιαστήματα του διαστήματος ολοκλήρωσης $[0,1]$ με κοινό πλάτος $h = \frac{b-\alpha}{n} = \frac{1-0}{10} = \frac{1}{10}$.

Κατασκευάζουμε τον πίνακα τιμών της συνάρτησης προς ολοκλήρωση $f(x) = e^{-x^2}$, για κάθε $x \in [0,1]$.

x_i	$x_0 = 0$	$x_1 = 1/10$	$x_2 = 2/10$	$x_3 = 3/10$	$x_4 = 4/10$
$f(x_i)$	1	0.99004983	0.96078944	0.91393119	0.85214379

x_i	$x_5 = 5/10$	$x_6 = 6/10$	$x_7 = 7/10$	$x_8 = 8/10$	$x_9 = 9/10$	$x_{10} = 1$
$f(x_i)$	0.77880078	0.69767633	0.61262639	0.52729242	0.44485807	0.36787944

Επομένως εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα 1/3 του Simpson έχουμε ότι

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{(1-0)}{3 \times 10} [f(x_0) + 4(f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7) + f(x_9)) + \\ &\quad + 2(f(x_2) + f(x_4) + f(x_6) + f(x_8)) + f(x_{10})] \\ &= \frac{1}{30} [1 + 4(0.99004983 + 0.91393119 + 0.77880078 + 0.61262639 + \\ &\quad + 0.44485807) + 2(0.96078944 + 0.85214379 + 0.69767633 + \\ &\quad + 0.57729242) + 0.36787944]. \end{aligned}$$

Το απόλυτο σφάλμα ολοκλήρωσης είναι

$$|E| = |I(f) - I_0(f)|, \text{ όπου } I_0(f) = 0.74682413 \text{ η ακριβής τιμή του ολοκληρώματος.}$$

Παρατήρηση

Από την άσκηση 1 έχουμε ότι ένα άνω φράγμα του ολικού σφάλματος αποκοπής του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου είναι

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{(b-\alpha)^3}{12n^2} \cdot M, \text{ όπου } M = \max_{x \in [0,1]} |f''(x)|.$$

Επειδή $f''(x) = 2 \cdot (2x^2 - 1) \cdot e^{-x^2}$, για κάθε $x \in [0,1]$, έχουμε ότι $M = \max_{\xi \in [0,1]} |f''(\xi)| = 2$.

Επομένως θα ισχύει ότι

$$|E_n^T(f)| \leq \frac{(1-0)^3}{12n^2} \cdot 2 = \frac{2}{12n^2}.$$

Υποθέτοντας ότι το αποτέλεσμα θα έχει ακρίβεια τουλάχιστον 5 δ.ψ. θα πρέπει να ισχύει

$$\frac{2}{12n^2} \leq 5 \times 10^{-6} \rightarrow n^2 \geq \frac{2}{12 \times 5 \times 10^{-6}} = \frac{10^6}{30} \rightarrow n \geq \sqrt{\frac{10^6}{30}} = 183,$$

δηλαδή θα απαιτηθούν τουλάχιστον 184 ομοιόμορφα καταναμημένα σημεία έτσι, ώστε η προσεγγιστική τιμή του παραπάνω ολοκληρώματος μέσω του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου να έχει ακρίβεια τουλάχιστον 5 δ.ψ. Αυτό οφείλεται στη χαμηλή τάξη ακρίβειας της μεθόδου. Εντούτοις χρησιμοποιώντας μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης με υψηλότερη τάξη ακρίβειας, όπως ο σύνθετος κανόνας 1/3 του Simpson που χρησιμοποιήσαμε πιο πάνω, καταλήγουμε σε καλύτερες προσεγγίσεις με πολύ μικρότερο αριθμό σημείων παρεμβολής (11 σημεία).

4. Να βρεθεί η τάξη σύγκλισης του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου, που εφαρμόζεται για την προσέγγιση του ολοκληρώματος $\int_0^1 \sqrt{x} dx$, για $n = 2, 4, 8, 16, 32$. (βλ. Ακριβής Γ.Δ. – Δουγαλής Β.Α.).

Λύση

Συμβολίζουμε με $E_n^{T_h}(f)$ το σφάλμα του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου για βήμα $h = \frac{b-a}{n}$. Υποθέτουμε ότι υπάρχει σταθερά c (συνάρτηση της f) έτσι, ώστε να ισχύει

$$E_n^{T_h}(f) = c \cdot h^r. \text{ Χρησιμοποιώντας μικρότερο βήμα } h' = h/2 \text{ έχουμε ότι } E_{n'}^{T_{h'}}(f) = c \cdot (h/2)^r.$$

Επομένως θα ισχύει

$$\left| \frac{E_n^{T_h}(f)}{E_{n'}^{T_{h'}}(f)} \right| = 2^r \quad \text{ή} \quad r = \log \left| \frac{E_n^{T_h}(f)}{E_{n'}^{T_{h'}}(f)} \right| / \log 2.$$

Με αυτόν τον τρόπο διαπιστώνουμε ότι το r μεταβάλλεται με το βήμα h και δίνει όλο και καλύτερες προσεγγίσεις της πραγματικής τάξης σύγκλισης της μεθόδου καθώς το $h \rightarrow 0$.

Για το συγκεκριμένο ολοκλήρωμα $\int_0^1 \sqrt{x} dx$ χρησιμοποιούμε τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου θεωρώντας ομοιόμορφο διαμερισμό του διαστήματος ολοκλήρωσης $[0, 1]$. Παρατηρούμε ότι η συνάρτηση προς ολοκλήρωση $f(x) = \sqrt{x}$, για κάθε $x \in [0, 1]$, είναι ολοκληρώσιμη στο $[0, 1]$ αλλά δεν είναι ομαλή στο 0, επομένως η τάξη σύγκλισης της μεθόδου θα είναι μικρότερη του 2. Υπολογίζοντας το σφάλμα προσέγγισης του σύνθετου κανόνα του τραπεζίου και το r , για $n = 2, 4, 8, 16, 32$, προκύπτει ότι

n	$E_n^T(f)$	r
2	0.631133E-3	1.43245
4	0.233836E-3	1.45379
8	0.853646E-4	1.46817
16	0.308543E-4	1.47784
32	0.110775E-4	

Επομένως καθώς το βήμα h μειώνεται ($h \rightarrow 0$) το r προσεγγίζει το 1.5. Άρα μία προσεγγιστική τιμή της ζητούμενης τάξης σύγκλισης είναι 1.5.

5. Να βρεθεί μία προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ εφαρμόζοντας τη μέθοδο Ramberg.

Λύση

Έχουμε ότι

$A_0^{(0)}$ → η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος με τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου με

$$h = \frac{b-a}{2^0} = \frac{1-0}{2^0} = 1 \rightarrow A_0^{(0)} = 0.68393970.$$

$A_0^{(1)}$ → η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος με τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου με

$$h = \frac{b-a}{2^1} = \frac{1-0}{2} = 1/2 \rightarrow A_0^{(1)} = 0.73137027.$$

$A_0^{(2)}$ → η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος με τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου με

$$h = \frac{b-a}{2^2} = \frac{1-0}{4} = 1/4 \rightarrow A_0^{(2)} = 0.74298412.$$

$A_0^{(3)}$ → η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος με τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου με

$$h = \frac{b-a}{2^3} = \frac{1-0}{8} = 1/8 \rightarrow A_0^{(3)} = 0.74586564.$$

Επιπλέον

$$A_1^{(0)} = \frac{2^2 \cdot A_0^{(1)} - A_0^{(0)}}{2^2 - 1} = 0.74718046,$$

$$A_1^{(1)} = \frac{2^2 \cdot A_0^{(2)} - A_0^{(1)}}{2^2 - 1} = 0.74685544,$$

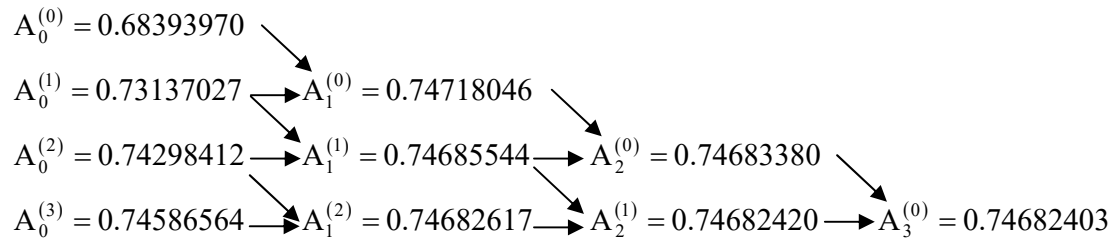
$$A_1^{(2)} = \frac{2^2 \cdot A_0^{(3)} - A_0^{(2)}}{2^2 - 1} = 0.74682617,$$

$$A_2^{(0)} = \frac{2^4 \cdot A_1^{(1)} - A_1^{(0)}}{2^4 - 1} = 0.74683380 ,$$

$$A_2^{(1)} = \frac{2^4 \cdot A_1^{(2)} - A_1^{(1)}}{2^4 - 1} = 0.74682420 ,$$

$$A_3^{(0)} = \frac{2^6 \cdot A_2^{(1)} - A_2^{(0)}}{2^6 - 1} = 0.74682403 .$$

Οι παραπάνω σχέσεις απεικονίζονται στον ακόλουθο πίνακα.



Παρατηρούμε ότι η μέθοδος ολοκλήρωσης του Romberg οδηγεί σε πολύ καλές προσεγγιστικές τιμές του ολοκληρώματος $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ με ακριβής τιμή $I(f) = 0.74682413279$ χρησιμοποιώντας μικρό αριθμό κόμβων. Συγκεκριμένα για την προσέγγιση $A_3^{(0)} = 0.74682403$ απαιτήθηκαν 9 προηγούμενοι υπολογισμοί.

6. Ο ακόλουθος πίνακας περιγράφει την ταχύτητα ενός οχήματος που κινείται σε ευθεία γραμμή σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.

t(s)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
u(m/s)	3.5	6	12.5	18	29.5	40	54.5	70	85.5	10.6

Είναι γνωστό ότι μπορούμε να υπολογίσουμε το διάστημα που έχει διανύσει το όχημα από τη χρονική στιγμή t_1 έως τη χρονική στιγμή t_2 μέσω της ολοκλήρωσης της ταχύτητας, δηλαδή $s = \int_{t_1}^{t_2} u(t)dt$. Να βρεθεί μία προσεγγιστική τιμή του διαστήματος που έχει διανύσει το όχημα από τη χρονική στιγμή $t = 1s$ έως τη χρονική στιγμή $t^* = 10s$ χρησιμοποιώντας κατάλληλη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης.

Λύση

A. Χρησιμοποιώντας τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου παρατηρούμε ότι έχουμε 10 ισαπέχοντες χρονικές στιγμές με βήμα $h = 1$, οι οποίες διαμερίζουν ομοιόμορφα το διάστημα ολοκλήρωσης $[1, 10]$ σε $n = 9$ υποδιαστήματα με κοινό πλάτος $h = 1$.

Επομένως η ζητούμενη προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος $\int_1^{10} u(t)dt$ εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα του τραπεζίου είναι

$$I(u) = \int_1^{10} u(t) dt \approx \frac{h}{2} [u(t_0) + 2(u(t_1) + u(t_2) + u(t_3) + \dots + u(t_8)) + u(t_9)]$$

$$= \frac{1}{2} [3.5 + 2(6 + 12.5 + 18 + 29.5 + 40 + 54.5 + 70 + 85.5) + 10.6] = 323.05 \text{ m}.$$

Άρα το ζητούμενο διάστημα θα είναι 323.05 m.

B. Παρατηρούμε ότι δεν μπορεί να βρεθεί μία προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος $\int_1^{10} u(t) dt$ χρησιμοποιώντας τον σύνθετο κανόνα 1/3 του Simpson, διότι απαιτεί άρτιο αριθμό υποδιαστημάτων.

Προσθέτοντας ένα ακόμη σημείο $t = 11 \text{ s}$ προκύπτει ο ακόλουθος πίνακας τιμών

t(s)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
u(m/s)	3.5	6	12.5	18	29.5	40	54.5	70	85.5	106	120

Στην περίπτωση αυτή παρατηρούμε ότι το αρχικό διάστημα ολοκλήρωσης $[1, 11]$ διαμερίζεται ομοιόμορφα σε $2n = 10$ ($\rightarrow n=5$) υποδιαστήματα (ουσιαστικά εφαρμόζουμε τον απλό κανόνα 1/3 του Simpson στα υποδιαστήματα $[t_0, t_2] = [1, 3]$, $[t_2, t_4] = [3, 5]$, $[t_4, t_6] = [5, 7]$, $[t_6, t_8] = [7, 9]$, $[t_8, t_{10}] = [9, 11]$ με αντίστοιχα μέσα σημεία $t_1 = 2$, $t_3 = 4$, $t_5 = 6$, $t_7 = 8$, $t_9 = 10$ κοινού πλάτους $h=1$). Δεν μπορούμε να δημιουργήσουμε άλλα σημεία δεδομένου ότι δεν είναι γνωστός ο τύπος της συνάρτησης αλλά μόνο ο πίνακας τιμών της. Επομένως η ζητούμενη προσεγγιστική τιμή του διαστήματος που θα διανύσει το όχημα από τη χρονική στιγμή $t = 1 \text{ s}$ έως τη χρονική στιγμή $t^* = 11 \text{ s}$, δηλαδή η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος $\int_1^{11} u(t) dt$, εφαρμόζοντας τον σύνθετο κανόνα 1/3 του Simpson είναι

$$I(u) = \int_1^{11} u(t) dt \approx \frac{(b-a)}{3n} [u(t_0) + 4(u(t_1) + u(t_3) + u(t_5) + u(t_7) + u(t_9)) +$$

$$+ 2(u(t_2) + u(t_4) + u(t_6) + u(t_8)) + u(t_{10})]$$

$$= \frac{(11-1)}{3 \times 10} [3.5 + 4(6 + 18 + 40 + 70 + 106) + 2(12.5 + 29.5 + 54.5 + 85.5) + 120].$$