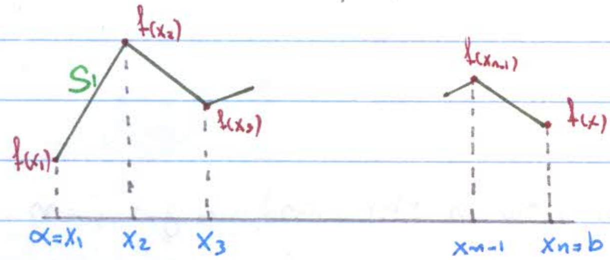
23ο Μάθημα — Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι — 14/01/2019

Θεωρούμε τη διαμέριση Δ του διαστήματος $[\alpha, b]$
$\Delta: \alpha = x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$ και χρησιμοποιούμε ένα πολυώνυμο χαμηλού βαθμού σε κάθε υποδιάστημα $[x_i, x_{i+1}]$, $i=1,2,\ldots,n-1$ για να προσεγγίσουμε τη δεδομένη συνάρτηση. Έτσι αν
$|\Delta| = \max\limits_{1\le i\le n-1} \Delta x_i$, $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$,
μπορούμε να αυξήσουμε την ακρίβεια μικραίνοντας το $|\Delta|$
Απαραίτητη στην ανάλυση μας είναι η κλάση των συναρτήσεων
$S_m^k(\Delta) = \{ S : s \in C^k[\alpha, b], S|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathbb{P}_m \; i=1,2,\ldots,n-1 \}$ όπου $m \ge 0$, $k \ge 0$
Στην περίπτωση που $k=m$, το $s \in S_m^m(\Delta)$ (αποτελείται από) ένα μόνο πολυώνυμο βαθμού m σε όλο το διάστημα $[\alpha, b]$, δηλαδή $S_m^m(\Delta) = \mathbb{P}_m$. Έτσι υποθέτουμε ότι $k < m$. Οι τμηματικά πολυωνυμικές συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται ευρύτατα στην πράξη είναι οι τμηματικά κυβικές συναρτήσεις.

3.7.1 Παρεμβολή με τμηματικά γραμμικές συναρτήσεις.

Εδώ θέλουμε να βρούμε $s \in S_1^0(\Delta)$ τέτοιο ώστε, για δεδομένη συνάρτηση f, ορισμένη στο $[\alpha, b]$, να ισχύει
$S(x_i) = f(x_i)$, $i=1,2,\ldots,n$
Η λύση είναι προφανής, όπως φαίνεται από το ακόλουθο σχήμα



Αν συμβολίσουμε την, προφανώς μοναδική, τμηματικά γραμμική συνάρτηση με $S(\cdot) = S_1(f;\cdot)$, ο τύπος της γραμμικής παρεμβολής δίνει

$$S_1(f;x) = f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i), \quad x_i \le x \le x_{i+1}, \; i=1,2,\ldots,n-1$$

Λίγο πιο ενδιαφέρουσα είναι η ανάλυση του σφάλματος. Η θεωρία της γραμμικής παρεμβολής δίνει

$$f(x) - S_1(f;x) = (x-x_i)(x-x_{i+1})\frac{f''(\xi(x))}{2}, \quad x_i \le x \le x_{i+1} \quad \text{όπου } f\in C^2[\alpha,b]$$

και $x_i < \xi(x) < x_{i+1}$, οπότε,

$$|f(x) - S_1(f;x)| = |(x-x_i)(x-x_{i+1})|\,\frac{|f''(\xi(x))|}{2} \le \max_{x_i\le x\le x_{i+1}} |(x-x_i)(x-x_{i+1})| \frac{\max\limits_{x_i\le t\le x_{i+1}} |f''(t)|}{2}$$

$$= \frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{4}\,\frac{\max\limits_{x_i\le t\le x_{i+1}}|f''(t)|}{2} = \frac{1}{8}(\Delta x_i)^2 \max_{x_i\le t\le x_{i+1}}|f''(t)| \le \frac{1}{8}|\Delta|^2 \max_{\alpha\le t\le b}|f''(t)|$$

$$\Longrightarrow \|f(\cdot) - S_1(f;x)\|_\infty \le \frac{1}{8}|\Delta|^2\|f''\|_\infty$$

Επομένως, το σφάλμα μπορεί να γίνει όσο μικρό θέλουμε, ομοιόμορφα στο $[\alpha,b]$, αν το $|\Delta|$ γίνει αρκούντως μικρό, το οποίο βέβαι αυξάνει τον αριθμό των δεδομένων

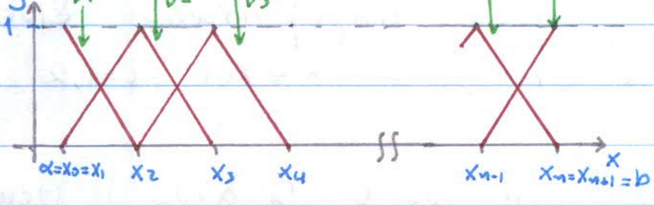
Η διάσταση του $S_1^0(\Delta)$ υπολογίζεται ως εξής: Έχουμε $n-1$ πολυωνυμικά τμήματα και στο καθένα υπάρχουν 2 βαθμοί ελευθερίας, άρα συνολικά πρέπει να προσδιοριστούν $2\cdot(n-1) = 2n-2$ παράμετροι.
Επιπλέον, η συνέχεια επιβάλλει μια συνθήκη σε κάθε εσωτερικό σημείο x_i, $i=2,3,\dots,n-1$, άρα συνολικά $n-2$ συνθήκες. Έτσι

$$\dim S_1^0(\Delta) = 2n-2-(n-2) = n$$

Αποδεικνύεται ότι οι συναρτήσεις

$$B_i(x) = \begin{cases} \dfrac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}, & x_{i-1}\le x\le x_i, \\[2ex] \dfrac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}, & x_i\le x\le x_{i+1} \\[2ex] 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

όπου $x_0 = x_1$ και $x_n = x_{n+1}$ (για $i=1$ λείπει η πρώτη εξίσωση, και για $i=n$ λείπει η δεύτερη · παίρνουν την μορφή $0/0$), αποτελούν βάση του $S_1^0(\Delta)$



Κατ' αρχήν, $B_i(x_j) = \delta_{ij}$, $i,j = 1,2,\dots,n$

Και ισχύει ότι $S_1(x) = \sum_{i=1}^{m} S_1(x_i) B_i(x)$

Τα B_i παίζουν τον ρόλο των στοιχειωδών πολυωνύμων του Lagrange

3.7.2 Παρεμβολή με τμηματικά κυβικές συναρτήσεις

Έστω $\Delta: \alpha = x_1 < x_2 < \dots < x_m = b$ μια διαμέριση του διαστήματος $[\alpha, b]$

Θέλουμε να κατασκευάσουμε ένα τμηματικά κυβικό πολυώνυμο $S_3(f;\cdot) \in S_3^2(\Delta)$:

(1) Το $S_3(f,\cdot)$ να είναι το πολύ κυβικό πολυώνυμο σε κάθε υποδιάστημα $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, 2, \dots, m-1$

(2) $S_3(f;\cdot) \in C^2[\alpha, b]$

(3) $S_3(f; x_i) = f(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$

Το πρώτο ερώτημα είναι κατά πόσο κάτι τέτοιο είναι δυνατό

Αν $S_3(f;x)\big|_{x \in [x_i, x_{i+1}]} = p_i(x)$ $i = 1, \dots, m-1$, τότε $p_i(x) = \alpha_i + \beta_i x + \gamma_i x^2 + \delta_i x^3$

Έτσι υπάρχουν $4(m-1) = 4m-4$ σταθερές που πρέπει να προσδιοριστούν

Τώρα, $p_i(x_i) = f(x_i)$ $\quad i = 1, 2, \dots, m-1 \quad$ $2m-2$ συνθήκες

$p_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$

$p'_{i-1}(x_i) = p'_i(x_i)$ $\quad i = 2, 3, \dots, m-1 \quad$ $m-2$ συνθήκες

$p''_{i-1}(x_i) = p''_i(x_i)$ $\quad i = 2, 3, \dots, m-1 \quad$ $m-2$ συνθήκες

Συνολικά $\quad$ $4m-6$ συνθήκες

Άρα, χρειαζόμαστε 2 επιπλέον συνθήκες, που μπορεί να είναι

$$S'_3(f,\alpha) = f'(\alpha) \quad , \quad S'_3(f, b) = f'(b)$$

ή

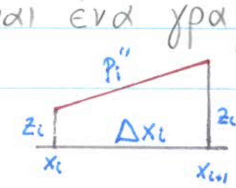
$$S''_3(f,\alpha) = f''(\alpha) \quad , \quad S''_3(f, b) = f'(b)$$

ή

$$S''_3(f,\alpha) = 0 \quad , \quad S''_3(f, b) = 0$$

Κατ' αρχήν ισχυρίζομαι ότι αν είναι γνωστά τα $z_i = S''_3(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$, τότε μπορώ να υπολογίσω την $S_3(f,\cdot)$

Πράγματι, η $p''_i(x)$, $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, 2, \dots, m-1$ είναι ένα γραμμικό πολυώνυμο που ικανοποιεί $p''_i(x_i) = z_i$, $p''_i(x_{i+1}) = z_{i+1}$



Έτσι, αν $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, έχουμε

$$p_i''(x) = \frac{z_{i+1}}{\Delta x_i}(x-x_i) + \frac{z_i}{\Delta x_i}(x_{i+1}-x), \quad x_i \le x \le x_{i+1},$$

και ολοκληρώνοντας δύο φορές παίρνουμε

$$p_i(x) = \frac{z_{i+1}}{6\Delta x_i}(x-x_i)^3 + \frac{z_i}{6\Delta x_i}(x_{i+1}-x)^3 + A_i x + B_i, \quad x_i \le x \le x_{i+1}$$

Ορίζουμε νέες σταθερές C_i, D_i, τέτοιες ώστε

$$A_i x + B_i = C_i(x-x_i) + D_i(x_{i+1}-x) \implies C_i = \frac{A_i x_{i+1} + B_i}{\Delta x_i}, \quad D_i = \frac{A_i x_i + B_i}{\Delta x_i},$$

οπότε

$$p_i(x) = \frac{z_{i+1}}{6\Delta x_i}(x-x_i)^3 + \frac{z_i}{6\Delta x_i}(x_{i+1}-x)^3 + C_i(x-x_i) + D_i(x_{i+1}-x), \quad x_i \le x \le x_{i+1}, \ i=1,2,\dots,n-1$$

Τα C_i, D_i υπολογίζονται από τις συνθήκες της παρεμβολής

$$p_i(x_i) = f(x_i), \quad p_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \quad i=1,2,\dots,n-1,$$

$$\iff \begin{aligned} &\frac{z_i}{6}(\Delta x_i)^2 + D_i \Delta x_i = f(x_i) \\ &\frac{z_{i+1}}{6}(\Delta x_i)^2 + C_i \Delta x_i = f(x_{i+1}) \end{aligned} \iff \begin{aligned} D_i &= \frac{f(x_i)}{\Delta x_i} - \frac{z_i \Delta x_i}{6} \\ C_i &= \frac{f(x_{i+1})}{\Delta x_i} - \frac{z_{i+1}\Delta x_i}{6} \end{aligned}$$

Έτσι,

$$p_i(x) = \frac{z_{i+1}}{6\Delta x_i}(x-x_i)^3 + \frac{z_i}{6\Delta x_i}(x_{i+1}-x)^3 + \left(\frac{f(x_{i+1})}{\Delta x_i} - \frac{z_{i+1}\Delta x_i}{6}\right)(x-x_i) + \left(\frac{f(x_i)}{\Delta x_i} - \frac{z_i \Delta x_i}{6}\right)(x_{i+1}-x)$$

$$x_i \le x \le x_{i+1}, \quad i=1,2,\dots,n-1$$

Επομένως, το ερώτημα που τίθεται είναι πως υπολογίζουμε τα z_i;
Μέχρι στιγμής, έχουμε χρησιμοποιήσει τις συνθήκες της παρεμβολής και τη συνέχεια των $S_3(f,\cdot)$ και S_3'', οπότε απομένει η συνέχεια της $S_3'(f,\cdot)$,

$$p_{i-1}'(x_i) = p_i'(x_i), \quad i=2,3,\dots,n-1,$$

Έχουμε,

$$p_i'(x) = \frac{z_{i+1}}{2\Delta x_i}(x-x_i)^2 - \frac{z_i}{2\Delta x_i}(x_{i+1}-x)^2 + \left(\frac{f(x_{i+1})}{\Delta x_i} - \frac{z_{i+1}\Delta x_i}{6}\right) - \left(\frac{f(x_i)}{\Delta x_i} - \frac{z_i \Delta x_i}{6}\right), \quad x_i \le x \le x_{i+1}$$

οπότε,

$$\frac{z_i}{2}\Delta x_{i-1} + \frac{f(x_i)}{\Delta x_{i-1}} - \frac{z_i \Delta x_{i-1}}{6} - \frac{f(x_{i-1})}{\Delta x_{i-1}} + \frac{z_{i-1}\Delta x_{i-1}}{6} = -\frac{z_i}{2}\Delta x_i + \frac{f(x_{i+1})}{\Delta x_i} - \frac{z_{i+1}\Delta x_i}{6} - \frac{f(x_i)}{\Delta x_i} + \frac{z_i \Delta x_i}{6}$$

$$\iff (\Delta x_{i-1}) z_{i-1} + 2(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) z_i + (\Delta x_i) z_{i+1} = \frac{6(f(x_{i+1}) - f(x_i))}{\Delta x_i} - \frac{6(f(x_i) - f(x_{i-1}))}{\Delta x_{i-1}} \equiv b_i, \quad i=2,3,\dots,n-1$$

24ο Μάθημα Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι 16/01/2019

Ισχύει ότι αν είναι γνωστά τα $z_i = S_3''(x_i)$, $i=1,2,\dots,n$, τότε μπορούμε να υπολογίσουμε την $S_3(f,\cdot)$. Τα z_i, $i=1,2,\dots,n$ ικανοποιούν το σύστημα

$$(\Delta x_{i-1}) z_{i-1} + 2(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) z_i + (\Delta x_i) z_{i+1} = \frac{6(f(x_{i+1}) - f(x_i))}{\Delta x_i} - \frac{6(f(x_i) - f(x_{i-1}))}{\Delta x_{i-1}} = b_i, \quad i=2,\dots,n-1$$

Αυτές είναι $n-2$ εξισώσεις ως προς τους n αγνώστους z_i, $i=1,2,\dots,n$. Με τις επιπλέον συνθήκες

$S_3'(f,x_1) = p_1'(x_1) = f'(x_1)$, $S_3'(f,x_n) = p_{n-1}'(x_n) = f'(x_n)$, έχουμε

$$(\Delta x_1) z_1 = -\frac{1}{2}(\Delta x_1) z_2 + 3\left(\frac{f(x_2) - f(x_1)}{\Delta x_1} - f'(x_1)\right),$$

$$(\Delta x_{n-1}) z_n = \frac{1}{2}(\Delta x_{n-1}) z_{n-1} + 3\left(f'(x_n) - \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{\Delta x_{n-1}}\right),$$ οπότε η πρώτη

και η τελευταία εξίσωση του προηγούμενου συστήματος γίνονται

$$\left(\frac{3}{2}\Delta x_1 + 2\Delta x_2\right) z_2 + (\Delta x_2) z_3 = b_2 - 3\left(\frac{f(x_2) - f(x_1)}{\Delta x_1} - f'(x_1)\right)$$

$$(\Delta x_{n-2}) z_{n-2} + \left(2\Delta x_{n-2} + \frac{3}{2}\Delta x_{n-1}\right) z_{n-1} = b_{n-1} - 3\left(f'(x_n) - \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{\Delta x_{n-1}}\right)$$

και το τριδιαγώνιο σύστημα που προκύπτει έχει μοναδική λύση. Επιπλέον, αν $M = \dfrac{|\Delta|}{\min\limits_{1\le i\le n-1} \Delta x_i}$ και $f \in C^4[a,b]$, τότε υπάρχουν σταθερές C_r, $r=0,1,2,3$ τέτοιες ώστε

$$\| f^{(r)}(\cdot) - S_3^{(r)}(f;\cdot) \|_\infty \le C_r |\Delta|^{4-r} \| f^{(4)} \|_\infty, \quad r=0,1,2,3$$ όπου

$C_0 = \frac{5}{384}$, $C_1 = \frac{1}{24}$, $C_2 = \frac{3}{8}$ και $C_3 = \max\{2, \frac{1}{2}(M + \frac{1}{M})\}$ (οι σταθερές C_0 και C_1 είναι βέλτιστες) (C. Hall 1973)

Αντίστοιχα, το πρόβλημα της κυβικής spline λύνεται μονοσήμαντα αν έχουμε συνοριακές συνθήκες δευτέρων παραγώγων.

4. Αριθμητική Ολοκλήρωση

Σκοπός μας είναι η προσέγγιση ολοκληρωμάτων της μορφής $\int_\alpha^b f(t)\,dt$, $[\alpha,b]$ πεπερασμένο ή άπειρο και $f:[\alpha,b]\to\mathbb{R}$ φραγμένη και κατ' αρχήν ολοκληρώσιμη.

Είναι γνωστό ότι αν F είναι μια παράγουσα της f, δηλαδή $F'=f$, τότε $\int_\alpha^b f(t)\,dt = F(\alpha)-F(b)$

Εντούτοις, οι αιτίες που μας οδηγούν στην αριθμητική ολοκλήρωση είναι:

- Μια παράγουσα F σπάνια μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά.
- Υπάρχουν περιπτώσεις που η παράγουσα F μπορεί να υπολογιστεί αλλά είναι πολύπλοκη. Για παράδειγμα, μια παράγουσα της $f(t)=\frac{1}{1+t^4}$ είναι η

$$F(t)=\frac{1}{4\sqrt2}\ln\frac{t^2+\sqrt2 t+1}{t^2-\sqrt2 t+1}+\frac{1}{2\sqrt2}\left\{\arctan\frac{t}{\sqrt2-t}+\arctan\frac{t}{\sqrt2+t}\right\}$$

Όλοι οι τύποι αριθμητικής ολοκλήρωσης προσεγγίζουν το ολοκλήρωμα $\int_\alpha^b f(t)\,dt$ με ένα άθροισμα της μορφής $\sum_{k=1}^{n} w_k f(\tau_k)$. Τέτοιου είδους προσεγγίσεις προκύπτουν από τη χρήση πολυωνυμικής παρεμβολής.

4.1 Τύποι εκ Παρεμβολής - Τύποι των Newton-Cotes

Έστω w μια "συνάρτηση βάρους", η οποία είναι θετική στο διάστημα $[\alpha,b]$ εκτός από μεμονωμένα σημεία στα οποία μηδενίζεται και για την οποία ισχύει $0<\int_\alpha^b w(t)\,dt<\infty$

Αν το (α,b) το άπειρο, τότε απαιτείται τα ολοκληρώματα $\int_\alpha^b t^s w(t)\,dt$, $s=0,1,\dots$ να υπάρχουν και να είναι πεπερασμένα.

Θεωρούμε τη συνάρτηση f, για την οποία γνωρίζουμε ότι είναι ολοκληρώσιμη ως προς τη συνάρτηση w στο διάστημα $[\alpha,b]$, δηλαδή το ολοκλήρωμα $\int_\alpha^b f(t)w(t)\,dt$ υπάρχει. Αυτό που θέλουμε είναι να προσεγγίσουμε την τιμή αυτού του ολοκληρώματος.

Γνωρίζουμε ότι αν επιλέξουμε n διακριτά σημεία στο διάστημα $[\alpha,b]$, έστω $\alpha\le\tau_1<\tau_2<\dots\le\tau_n\le b$, τότε μπορούμε να υπολογίσουμε το πολυώνυμο $p_{n-1}(f;\tau_1,\tau_2,\dots,\tau_n,t)$ το οποίο παρεμβάλλεται στην f στα σημεία αυτά, δηλαδή ικανοποιεί τις συνθήκες

$$p_{n-1}(\tau_k)=f(\tau_k)\quad,\ k=1,2,\dots,n$$

Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι 16/01/2019

Το πολυώνυμο αυτό προσεγγίζει την f και μάλιστα ισχύει

$f(t) = p_{n-1}(f;t) + r_n(f;t)$, $t \in [\alpha, b]$, (1) όπου

$p_{n-1}(f;t) = \sum_{k=1}^{n} \ell_k(t) f(\tau_k)$,

$\ell_k(t) = \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq k}}^{n} \frac{t-\tau_\ell}{\tau_k-\tau_\ell}$, $k=1,2,\dots,n$ και $r_n(f,t) = (t-\tau_1)(t-\tau_2)\dots(t-\tau_n)\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$, $\alpha<\xi=\xi(t)<b$, (2)

υπό την προϋπόθεση ότι $f \in C^n[\alpha, b]$.

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη της (1) με $w(t)$ και ολοκληρώνοντας παίρνουμε

$$\begin{aligned}
\int_\alpha^b f(t)w(t)\,dt &= \int_\alpha^b p_{n-1}(f;t)w(t)\,dt + \int_\alpha^b r_n(f,t)w(t)\,dt \\
&= \int_\alpha^b \Big[\sum_{k=1}^{n} \ell_k(t) f(\tau_k)\Big] w(t)\,dt + \int_\alpha^b r_n(f;t)w(t)\,dt \\
&= \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\Big(\int_\alpha^b \ell_k(t)w(t)\,dt\Big)}_{w_k} f(\tau_k) + \underbrace{\int_\alpha^b r_n(f,t)w(t)\,dt}_{R_n(f)}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \int_\alpha^b f(t)w(t)\,dt = \sum_{k=1}^{n} w_k f(\tau_k) + R_n(f)$, (3) όπου

$w_k = \int_\alpha^b \ell_k(t)w(t)\,dt = \int_\alpha^b \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq k}}^{n} \frac{t-\tau_\ell}{\tau_k-\tau_\ell} w(t)\,dt$, $k=1,2,\dots,n$ (4)

$R_n(f) = \int_\alpha^b r_n(f,t)w(t)\,dt$

Ο τύπος (3) ονομάζεται τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης εκ παρεμβολής. Τα σημεία τ_k ονομάζονται κόμβοι και τα w_k βάρη του τύπου αυτού. Από τις συνθήκες της παρεμβολής, αλλά και από τον τύπο του σφάλματος (2) συνάγεται ότι αν $f \in \mathbb{P}_{n-1}$, τότε $p_{n-1}(f,t) = f(t)$, $t \in [\alpha, b]$ ή $r_n(f,t) = 0$, $t \in [\alpha, b]$ οπότε

$R_n(f,t) = 0 \quad \forall f \in \mathbb{P}_{n-1}$,

δηλαδή ο τύπος (3) ολοκληρώνει (με σφάλμα 0) όλα τα πολυώνυμα βαθμού $\leq n-1$. Λέμε ότι ο τύπος (3) έχει βαθμό ακριβείας (τουλάχιστον) $n-1$. Γενικά λέμε ότι ένας τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης έχει βαθμό ακριβείας d αν ολοκληρώνει ακριβώς (με σφάλμα μηδέν) όλα τα πολυώνυμα βαθμού $\leq d$. Αν επιπλέον, υπάρχει πολυώνυμο, βαθμού $d+1$, για το οποίο το σφάλμα είναι διάφορο του μηδενός, λέμε ότι ο βαθμός ακριβείας είναι επακριβώς d. Είναι φανερό ότι κάθε επιλογή n κόμβων $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ οδηγεί σ' ένα διαφορετικό τύπο (3) (τα βάρη υπολογίζονται συναρτήσει των κόμβων μέσω της (4))