25ο Μάθημα   Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι   21/01/2019

Έστω w μια συνάρτηση βάρους και το ολοκλήρωμα $\int_\alpha^b f(t)w(t)\,dt$ υπάρχει, τότε εφαρμόζοντας πολυωνυμική παρεμβολή παίρνουμε τον τύπο αριθμητικής ολοκλήρωσης

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

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

$$R_n(f) = \int_\alpha^b r_n(f,t)\,w(t)\,dt = \int_\alpha^b (t-\tau_1)(t-\tau_2)\dots(t-\tau_n)\frac{f^{(n)}(\xi(t))}{n!}\,w(t)\,dt, \quad \alpha<\xi(t)<b$$

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

Ο τύπος (3) ονομάζεται τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης εκ παρεμβολής και έχει βαθμό ακριβείας τουλάχιστον $n-1$, δηλαδή $R_n(f)=0, \forall f\in \mathbb{P}_{n-1}$

Παραδείγματα: 1 Τύπος του τραπεζίου

Έστω $w(t)=1$ στο διάστημα $[\alpha,b]$, $n=2$, $\tau_1=\alpha$, $\tau_2=b$. Τότε ο τύπος (3) παίρνει τη μορφή

$$\int_\alpha^b f(t)\,dt = \frac{b-\alpha}{2}\left[f(\alpha)+f(b)\right] - \frac{(b-\alpha)^3}{12}f''(\xi), \quad \alpha<\xi<b$$

υπό την προϋπόθεση ότι $f\in C^2[\alpha,b]$.

2 Τύπος του Simpson

Στην περίπτωση αυτή $w(t)=1$ στο διάστημα $[\alpha,b]$, $n=3$, $\tau_1=\alpha$, $\tau_2=\frac{\alpha+b}{2}$, $\tau_3=b$, οπότε ο τύπος (3) παίρνει τη μορφή

$$\int_\alpha^b f(t)\,dt = \frac{b-\alpha}{6}\left[f(\alpha)+4\cdot f\left(\tfrac{\alpha+b}{2}\right)+f(b)\right] - \frac{(b-\alpha)^5}{2880}f^{(4)}(\xi), \quad \alpha<\xi<b$$

υπό την προϋπόθεση ότι $f\in C^4[\alpha,b]$

3 Τύποι των Newton-Cotes

Έστω $W(t)=1$ στο διάστημα $[-1,1]$ και $\tau_1,\tau_2,\dots,\tau_n$ ισαπέχοντα σημεία στο $[-1,1]$. Τότε ο τύπος (3) ονομάζεται τύπος των Newton-Cotes. Λέγεται ανοικτός αν τα τ_k βρίσκονται στο $(-1,1)$ και κλειστός αν $\tau_1=-1$ και $\tau_n=1$. Κατ' επέκτασιν ο τύπος (3) ονομάζεται γενικευμένος τύπος των Newton-Cotes, με συνάρτηση βάρους.

4 Σύνθετοι τύποι του τραπεζίου και του Simpson

Οι (απλοί) τύποι του τραπεζίου και του Simpson είναι αρκούντως ακριβείς αν το ως προς ολοκλήρωση διάστημα $[\alpha, b]$ είναι μικρού μήκους. Στην αντίθετη περίπτωση, παίρνουμε μια διαμέριση του διαστήματος $[\alpha, b]$, $\alpha = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b$,
$x_k = \alpha + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$, $h = (b-\alpha)/n$
και εφαρμόζουμε τον (απλό) τύπο του τραπεζίου ή του Simpson σε κάθε ένα ή σε κάθε δύο διαδοχικά υποδιαστήματα αντίστοιχα.
Έτσι οδηγούμεθα στο σύνθετο τύπο του τραπεζίου

$$\int_\alpha^b f(t)\,dt = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] - \frac{b-\alpha}{12} h^2 f''(\xi), \quad \alpha < \xi < b$$

υπό την προϋπόθεση ότι $f \in C^2[\alpha, b]$.

Και στο σύνθετο τύπο του Simpson

$$\int_\alpha^b f(t)\,dt = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] - \frac{b-\alpha}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \alpha < \xi < b$$

υπό την προϋπόθεση ότι n άρτιος και $f \in C^4[\alpha, b]$

4.2 Τύποι του Gauss

Ο τύπος (3) έχει βαθμό ακριβείας τουλάχιστον $n-1$ για οποιαδήποτε, τυχαία, επιλογή των κόμβων c_i, $i = 1, 2, \dots, n$

Ερώτημα:

Μπορούμε, με κατάλληλη επιλογή των c_i, να κατασκευάσουμε έναν τύπο της μορφής (3) με βαθμό ακριβείας $d > n-1$;

Η απάντηση δίνεται στο επόμενο θεώρημα για το οποίο απαιτείται να ορίσουμε το πολυώνυμο

$$\omega_n(t) = \prod_{k=1}^{n} (t - c_k)$$

Θεώρημα (Jacobi): Έστω k ένας ακέραιος με $0 \le k \le n$. Ο τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης (3) έχει βαθμό ακριβείας $d = n - 1 + k$ αν και μόνο αν ικανοποιούνται οι ακόλουθες συνθήκες:

(α) Ο τύπος (3) έχει βαθμό ακριβείας $n-1$

Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι — 21/01/2019

(β) Το πολυώνυμο ω_n ικανοποιεί $\int_\alpha^b \omega_n(t) p(t) w(t)\, dt = 0$ για όλα τα $p \in \mathbb{P}_{k-1}$

Απόδειξη:

($\Rightarrow$) Έστω ότι ο τύπος (3) έχει βαθμό ακριβείας $d = n-1+k$. Το (α) ισχύει εφόσον $k \geq 0$, συνεπώς $d \geq n-1$. Όσον αφορά το (β), το πολυώνυμο $\omega_n p \in \mathbb{P}_{n+k-1} = \mathbb{P}_{n-1+k}$, επομένως ο τύπος (3) το ολοκληρώνει ακριβώς, δηλαδή:

$$\int_\alpha^b \omega_n(t) p(t) w(t)\, dt = \sum_{j=1}^{n} w_j \underbrace{\omega_n(\tau_j)}_{=0} p(\tau_j) = 0 \quad \forall p \in \mathbb{P}_{k-1}$$

($\Leftarrow$) Υποθέτουμε ότι ισχύουν οι (α), (β). Πρέπει να δείξουμε ότι ο τύπος (3) ολοκληρώνει ακριβώς (με σφάλμα μηδέν), ένα οποιοδήποτε πολυώνυμο βαθμού $\leq n-1+k$

Έστω p ένα τέτοιο πολυώνυμο. Αν $k=0$, τότε το ζητούμενο ισχύει λόγω του (α). Αν $k \geq 1$, διαιρούμε το p με το ω_n και παίρνουμε

$p = \omega_n q + r$, $q \in \mathbb{P}_{k-1}$, $r \in \mathbb{P}_{n-1}$

Έχουμε τώρα

$$\int_\alpha^b p(t) w(t)\, dt = \int_\alpha^b [\omega_n(t) q(t) + r_n(t)] w(t)\, dt = \int_\alpha^b \omega_n(t) q(t) w(t) dt + \int_\alpha^b r(t) w(t) dt$$

$$\overset{(\beta)}{=} \int_\alpha^b \underbrace{r(t)}_{\in \mathbb{P}_{n-1}} w(t)\, dt \overset{(\alpha)}{=} \sum_{j=1}^{n} w_j r(\tau_j) = \sum_{j=1}^{n} w_j [p(\tau_j) - \underbrace{\omega_n(\tau_j) q(\tau_j)}_{=0}] = \sum_{j=1}^{n} w_j p(\tau_j)$$

Η συνθήκη (β) λέει ότι για να έχουμε βαθμό ακριβείας $n-1+k$ πρέπει το ω_n να είναι ορθογώνιο σε όλα τα πολυώνυμα βαθμού $\leq k-1$. (Το k πρέπει να είναι $\leq n$, διότι διαφορετικά το ω_n θα ήταν ορθογώνιο στον εαυτό του). Έτσι η βέλτιστη περίπτωση είναι $k=n$, η οποία δίνει βαθμό ακριβείας $d = n-1+n = 2n-1$. Στη περίπτωση αυτή το ω_n είναι ορθογώνιο σε όλα τα πολυώνυμα βαθμού $\leq n-1$, δηλαδή είναι το ορθογώνιο πολυώνυμο βαθμού n ως προς τη συνάρτηση βάρους στο διάστημα $[\alpha, b]$

Τα τ_k, $k = 1, 2, \dots, n$ είναι οι ρίζες αυτού του πολυωνύμου, ενώ τα w_k, $k = 1, 2, \dots, n$ υπολογίζονται από την (4). Ο δε τύπος (3) ονομάζεται τύπος του Gauss ως προς τη συνάρτηση βάρους w στο $[\alpha, b]$

26º Μάθημα   Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι   23/01/2019

Όταν στον τύπο αριθμητικής ολοκλήρωσης
$\int_\alpha^b f(t)w(t)\,dt = \sum_{k=1}^{n} w_k f(\tau_k) + R_n(f)$,
όπου w μια συνάρτηση βάρους στο διάστημα $[\alpha,b]$, τα τ_k επιλέγουν ως οι ρίζες του ορθογωνίου πολυωνύμου, βαθμού n, ως προς την w, τότε ο προκύπτων τύπος είναι ο τύπος του Gauss ως προς w, με κύριο χαρακτηριστικό ότι ο βαθμός ακριβείας του είναι $2n-1$, αντί του $n-1$ που είναι συνήθως, είναι δε βέλτιστος για ένα τύπο n σημείων

Δοθείσης μιας συνάρτησης βάρους w στο διάστημα $[\alpha,b]$, ορθογωνοποιώντας τις δυνάμεις $1, t, t^2, \dots, t^n$ (κάθε πεπερασμένος αριθμός των οποίων είναι γραμμικά ανεξάρτητες στο $[\alpha,b]$) κατά Gram-Schmidt παίρνουμε ένα σύνολο πολυωνύμων $\Pi_k(\cdot) = \Pi_k(\cdot, w)$ $k=0,1,2,\dots$ τα οποία ορίζονται μοναδικά από τις ακόλουθες συνθήκες.
(α) Το $\Pi_k(\cdot)$ είναι ένα πολυώνυμο βαθμού (ακριβώς) k με συντελεστή του μεγιστοβάθμιου όρου μονάδα (monic)
(β) $\int_\alpha^b \Pi_k(t)\Pi_\ell(t)w(t)\,dt = \begin{cases} 0, & \text{αν } k\neq \ell \\ c_k>0, & \text{αν } k=\ell \end{cases}$ $\quad k,\ell = 0,1,\dots$

Το $\Pi_k(\cdot)$ μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τις συνθήκες
$\int_\alpha^b \Pi_k(t)\cdot t^\ell w(t)\,dt = 0$, $\ell = 0,1,\dots,k-1$
Οι τελευταίες χρησιμοποιούνται, πολλές φορές, και για τον ορισμό του Π_k.

Ένας άλλος τρόπος για τον υπολογισμό των βαρών w_k, $k=1,2,\dots,n$ στον τύπο (3), επομένως και στον αντίστοιχο τύπο του Gauss, είναι ο ακόλουθος. Δεδομένου ότι ο τύπος (3) έχει βαθμό ακριβείας τουλάχιστον $n-1$, ολοκληρώνει ακριβώς (με σφάλμα μηδέν) τα μονώνυμα t^m, $m=0,1,\dots,n-1$ επομένως
$\int_\alpha^b t^m w(t)\,dt = \sum_{k=1}^{n} w_k \tau_k^m$, $m=0,1,\dots,n-1 \iff$
$\sum_{k=1}^{n} (\tau_k)^m w_k = \int_\alpha^b t^m w(t)\,dt$, $m=0,1,\dots,n-1$

Αυτό είναι ένα γραμμικό σύστημα n εξισώσεων ως προς n αγνώστους w_k, $k=1,2,\dots,n$.
Ο πίνακας αυτού του συστήματος είναι ένας πίνακας Vandermonde με ορίζουσα

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \tau_1 & \tau_2 & \dots & \tau_n \\ \tau_1^2 & \tau_2^2 & \dots & \tau_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tau_1^{n-1} & \tau_2^{n-1} & \dots & \tau_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{0\le i<j\le n} (\tau_j-\tau_i) \neq 0,$$

Εφόσον τα τ_k είναι διακριτά, συνεπώς το σύστημα έχει μοναδική λύση.
Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή ως μέθοδος των απροσδιορίστων συντελεστών (undetermined coefficients)

Οι τύποι του Gauss, εκτός από το βέλτιστο βαθμό ακριβείας $(2n-1)$ για έναν τύπο εκ παρεμβολής n σημείων, ικανοποιούν και μια σειρά από χρήσιμες ιδιότητες.

(i) Όλοι οι κόμβοι τ_k, $k=1,2,\dots,n$ είναι πραγματικοί αριθμοί, είναι διακριτοί και περιέχονται στο διάστημα (α,b). Αυτή είναι γνωστή ιδιότητα που ικανοποιούν οι ρίζες ενός ορθογωνίου πολυωνύμου ως προς μια συνάρτηση βάρους.

(ii) Όλα τα βάρη w_k, $k=1,2,\dots,n$, είναι θετικά. Αυτό στηρίζεται στην έξυπνη παρατήρηση Stieltjes

$$0<\int_\alpha^b \underbrace{\ell_j^2(t)}_{\mathbb{P}_{2n-2}\text{ (ολοκληρώνεται ακριβώς)}} w(t)\,dt = \sum_{k=1}^{n} w_k \ell_j^2(\tau_k) = w_j \ell_j^2(\tau_j) = w_j 1^2 = w_j, \quad j=1,2,\dots,n$$

(iii) Ο τύπος του Gauss συγκλίνει για συνεχείς συναρτήσεις στο διάστημα $[\alpha,b]$, δηλαδή, αν $f\in C[\alpha,b]$, τότε το $R_n(f)\to 0$ καθώς $n\to\infty$. Η απόδειξη στηρίζεται στο θεώρημα του Weierstrass. Έστω p^*_{2n-1} η βέλτιστη ομοιόμορφη προσέγγιση της f από το $\mathbb{P}_{2n-1}$. Τότε $\lim_{n\to\infty}\|f-p^*_{2n-1}\|_\infty=0$

Έχουμε

$$|R_n(f)| \overset{\text{βαθμός ακριβείας } 2n-1}{=\!=\!=} |R_n(f)-\underbrace{R_n(p^*_{2n-1})}_{=0}| = |R_n(f-p^*_{2n-1})| = \left|\int_\alpha^b [f(t)-p^*_{2n-1}(t)]w(t)\,dt-\sum_{k=1}^{n}[f(\tau_k)-p^*_{2n-1}(\tau_k)]\right| =$$

Ε3. Υπολογιστικά Μαθηματικά Ι   23/01/2019

** $R_n(\alpha f+\beta g)=\alpha R_n(f)+\beta R_n(g)$, $f,g\in C[a,b]$, $\alpha,\beta\in\mathbb{R}$ (Άσκηση)

συνέχεια από άλλη σελίδα

$$\overset{w_k>0}{\le} \int_a^b |f(t)-p^*_{2n-1}(t)|\,w(t)\,dt+\sum_{k=1}^{n} w_k\,|f(\tau_k)-p^*_{2n-1}(\tau_k)|$$

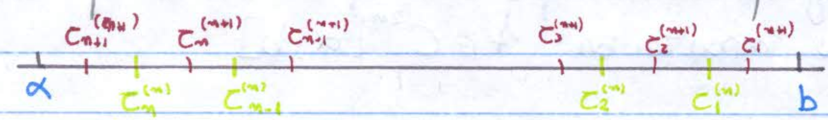
$$\le \|f-p^*_{2n-1}\|\left[\int_a^b w(t)\,dt+\sum_{k=1}^{n} w_k\right]$$

$$\sum_{k=1}^{n} w_k=\int_a^b w(t)\,dt \quad \text{(Άσκηση)}$$

$=\left(2\int_a^b w(t)\,dt\right)\|f-p^*_{2n-1}\|_\infty$, οπότε

$|R_n(f)|\to 0$ καθώς $n\to\infty$

(iv) Οι κόμβοι του τύπου του Gauss με n σημεία εναλλάσσονται με τους κόμβους του τύπου του Gauss με $n+1$ σημεία



Αυτή είναι επίσης γνωστή ιδιότητα των ορθογωνίων πολυωνύμων

(v) Τα ορθογώνια πολυώνυμα $\Pi_k(\cdot)=\Pi_k(\cdot,w)$ με συντελεστή μεγιστοβάθμιου όρου μονάδα ικανοποιούν τον ακόλουθο αναδρομικό τύπο

$\Pi_{k+1}(t)=(t-\alpha_k)\Pi_k(t)-\beta_k\Pi_{k-1}(t)$, $k=0,1,2,\ldots$

$\Pi_0(t)=1$, $\Pi_{-1}(t)=0$

όπου $\alpha_k=\alpha_k(w)\in\mathbb{R}$, $\beta_k=\beta_k(w)>0$ και $\beta_0=\int_a^b w(t)\,dt$

Ο πίνακας Jacobi τάξεως n για τη συνάρτηση βάρους w είναι ο συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας

$$J_n=J_n(w)=\begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & \\ & \sqrt{\beta_2} & \ddots & \sqrt{\beta_{n-1}} \\ & & \sqrt{\beta_{n-1}} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix}$$

Οι κόμβοι τ_k είναι οι ιδιοτιμές του J_n, $J_n u_k=\tau_k u_k$, $u_k^T u_k=1$, $k=1,\ldots,n$ και τα βάρη w_k μπορούν να εκφραστούν ως προς την πρώτη συντεταγμένη $u_{k,1}$ του αντίστοιχου κανονικοποιημένου ιδιοδιανύσματος

$w_k=\beta_0 u_{k,1}^2$, $k=1,2,\ldots,n$.

Ο υπολογισμός των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα J_n

είναι ένα τυπικό πρόβλημα αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας που λύνεται με μια από τις γνωστές μεθόδους.

vi Το 1885 ο Markov παρατήρησε ότι ο τύπος του Gauss μπορεί να κατασκευαστεί χρησιμοποιώντας παρεμβολή κατά Hermite. Συνέπεια αυτού και του θεωρήματος Μέσης τιμής για ολοκληρώματα είναι ένας ενδιαφέρον τύπος για το σφάλμα.

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_\alpha^b [\Pi_n(t,w)]^2 w(t)\,dt \quad , \alpha<\xi<b$$

όπου $\Pi_n(\cdot,w)$ είναι το monic ορθογώνιο πολυώνυμο ως προς τη συνάρτηση βάρους w στο $[\alpha,b]$. Βεβαίως απαιτείται $f \in C^{2n}[\alpha,b]$.

Παραδείγματα: 1 Έστω $w(t)=1$, $t\in[-1,1]$. Τότε

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = \sum_{k=1}^{n} w_k^L f(\tau_k^L) + \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi) \quad , -1<\xi<1$$

όπου τ_k^L είναι οι ρίζες του ορθογωνίου πολυωνύμου του Legandre βαθμού n και $f\in C^{2n}[-1,1]$

2 Έστω $w(t)=(1-t^2)^{-1/2}$, $t\in(-1,1)$ τότε

$$\int_{-1}^{1} f(t)(1-t^2)^{1/2}\,dt = \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\tau_k^c) + \frac{\pi}{2^{2n-1}(2n!)} f^{(2n)}(\xi) \quad , -1<\xi<1$$

όπου τ_k^c είναι οι ρίζες του ορθογώνιου πολυωνύμου του Chebysev πρώτου είδους, βαθμού n, δηλαδή, $\tau_k = \cos\frac{(2k-1)\pi}{2n}$, $k=1,2,\dots,n$ και $f\in C^{2n}[-1,1]$

3 Έστω $w(t)=e^{-t^2}$, $t\in(-\infty,\infty)$ τότε $\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-t^2}dt = \sum_{k=1}^{n} w_k^H f(\tau_k^H) + \frac{\sqrt{\pi}\,n!}{2^n(2n)!} f^{(2n)}(\xi)$, $-\infty<\xi<\infty$

όπου τα τ_k^H είναι οι ρίζες του ορθογωνίου πολυωνύμου του Hermite βαθμού n και $f\in C^{2n}(\mathbb{R})$

4 Έστω $w(t)=1$, $t\in[\alpha,b]$, τότε $\int_\alpha^b f(t)\,dt = \frac{b-\alpha}{2}\sum_{k=1}^{n} w_k^L f\left(\frac{b-\alpha}{2}\tau_k^L + \frac{b-\alpha}{2}\right) + R_n^{GL}(f)$, ο οποίος είναι ακριβής για όλες τις $f\in\mathbb{P}_{2n-1}$