Αριθμητική Ολοκλήρωση

22 Απριλίου 2010

Σχέσεις Newton - Cotes για αριθμητική ολοκλήρωση

Η τεχνική για την αριθμητική ολοκλήρωση Newton - Cotes είναι παρόμοια με τη τεχνική που αναπτύξαμε, στην προηγούμενη ενότητα, για τον αριθμητικό υπολογισμό παραγώγων Δηλαδή, δημιουργούμε το συμπτωτικό πολυώνυμο $P_n(x)$ για μια δοθείσα συνάρτηση $y(x)$. Στη συνέχεια ολοκληρώνουμε το πολυώνυμο και όχι της συνάρτηση:

$$\int_a^b y(x)dx \rightarrow \int_a^b P_n(x)dx \quad \text{όπου} \quad (x_s = x_0 + sh) \tag{1}$$

$$P_n(x_s) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \frac{s(s-1)(s-2)}{3!}\Delta^3 f_0 + \ldots \tag{2}$$

Ανάλογη με τον αριθμό των όρων που διατηρούμε θα είναι και η ακρίβεια της σχέσης που θα δημιουργήσουμε.
Το σφάλμα θα υπολογισθεί απο την ολοκλήρωση της σχέσης του σφάλματος του συμπτωτικού πολυωνύμου.

$$E = \int_a^b E_n(x_s)dx \tag{3}$$

$$E_n(x_s) = \frac{s(s-1)(s-2)\ldots(s-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) \quad \text{όπου} \quad \xi \in [a, b] \tag{4}$$

Χρήση 1ου βαθμού συμπτωτικό πολυώνυμο

Αν χρησιμοποιήσουμε 1ης τάξης συμπτωτικό πολυώνυμο λαμβάνουμε:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \quad \rightarrow \quad \int_{x_0}^{x_1} P_1(x_s)dx = \int_{x_0}^{x_1} (f_0 + s\Delta f_0)\, dx = h\int_{s=0}^{s=1} (f_0 + s\Delta f_0)\, ds$$

$$= \quad hf_0 s\Big|_0^1 + h\Delta f_0 \frac{s^2}{2}\Big|_0^1 = h\left(f_0 + \frac{1}{2}\Delta f_0\right) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) \qquad (5)$$

Το αντίστοιχο σφάλμα για 1-βάθμιο πολυώνυμο θα είναι:

$$f(x) - P(x) = \frac{1}{2}s(s-1)h^2 f''(\xi) \quad \varphi o \rho \quad x_0 \leq \xi \leq x_1 \qquad (6)$$

Το σφάλμα της συγκεκριμένης ολοκλήρωσης θα βρεθεί απο τη ολοκλήρωση της παραπάνω σχέσης

$$E = \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}s(s-1)h^2 f''(\xi)dx = \frac{h^3}{2}\int_{s=0}^{s=1} s(s-1)f''(\xi)ds$$

$$= h^3 f''(\xi_1)\left(\frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4}\right)_0^1 = -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi_1) \quad \text{όπου} \quad \xi_1 \in [x_0, x_1] \qquad (7)$$

Χρήση 2-βάθμιου συμπτωτικού πολυωνύμου

Ακολουθούμε την προηγούμενη διαδικασία

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \quad \rightarrow \quad \int_{x_0}^{x_2} P_2(x_s)dx &= \int_{x_0}^{x_2} \left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{1}{2}s(s-1)\Delta^2 f_0 \right) dx \\
&= h\int_{s=0}^{s=2} \left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{1}{2}s(s-1)\Delta^2 f_0 \right) ds \\
&= h\left(2f_0 + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3}\Delta^2 f_0 \right) = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2 \right) \qquad (8)
\end{aligned}$$

Η ολοκλήρωση του επόμενου όρου θα δώσει το σφάλμα της παραπάνω σχέσης αλλά συμπτωματικά δίνει αποτέλεσμα ΜΗΔΕΝ

$$\frac{1}{6}\int_{x_0}^{x_2} s(s-1)(s-2)\Delta^3 f_0 dx = 0\,. \qquad (9)$$

Οπότε λόγω αυτής της συμπτωσης το σφάλμα θα υπολογισθεί με χρηση του επόμενου όρου στο ανάπτυγμα και προφανώς θα είναι μικρότερο

$$E = \frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2} s(s-1)(s-2)(s-3)h^4 f^{(4)}(\xi)dx = \ldots = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi_1) \quad (10)$$

Χρήση 3-βάθμιου συμπτωτικού πολυωνύμου

Ακολουθώντας την προηγούμενη διαδικασία λαμβάνουμε

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \rightarrow \int_{x_0}^{x_3} P_3(x_s)dx = \frac{3h}{8}\left(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right). \qquad (11)$$

Ενώ το αντίστοιχο σφάλμα θα είναι:

$$E = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi_1) \quad \text{φορ} \quad x_0 \leq \xi_1 \leq x_3 \qquad (12)$$

Δηλαδή, το σφάμα θα είναι $O(h^5)$ που είναι ίδιας τάξης με το σφάλμα που βρήκαμε προηγουμένως για συμπυωτικό πολυώνυμο 2ου βαθμού. ΑΠΟΔΕΙΞΤΕ τις σχέσεις (10) και (11). Αυτή η 'σύμτωση' στην τάξη

των σφαλμάτων συμβαίνει και για 4ης και 5ης τάξης συμπτωτικά πολυώνυμα και είνια $O(h^7)$.

Σχέσεις Newton - Cotes

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) - \frac{1}{12}h^3 f^{(2)}(\xi_1)$$

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi_1)$$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi_1)$$

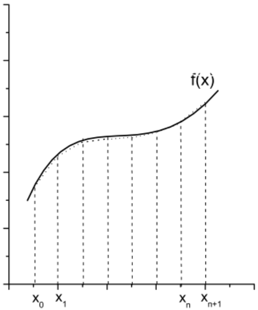
Πίνακας: Σχέσεις Newton - Cotes για ολοκλήρωση με 1ης, 2ης και 3ης τάξης συμπτωτικά πολυώνυμα.

Αν το διάστημα (a, b) είναι σχετικά μεγάλο τότε το υποδιαιρούμε σε n υποδιαστήματα, δηλαδή $\{a = x_0, \ldots, x_n = b; n\}$ με $h = \Delta x = x_{i+1} - x_i = (b-a)/n$ οπότε

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_1(x)dx \\
&= \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} P_1(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} P_1(x)dx \\
&= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n) \quad (13)
\end{aligned}$$

Συνολικό Σφάλμα:

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{h^3}{12}[f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \ldots + f''(\xi_n)] \approx -\frac{h^3}{12} n f''(\xi) \\
&= -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi) \quad \text{όπου} \quad x_0 \leq \xi_1 \leq x_{n+1} \quad (14)
\end{aligned}$$


f(x)
x0
x1
xn
xn+1

Κανόνας του Simpson

Τύπος Simpson 1/3

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-2} \int_{x_i}^{x_{i+2}} P_2(x)dx = \sum_{i=0}^{n-2} \frac{h}{3}(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2})$$

$$= \frac{h}{3}(f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) \quad (15)$$

Συνολικό Σφάλμα:

$$E = -\frac{h^5}{90}\frac{n}{2}f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \quad \text{για} \quad x_0 \leq \xi \leq x_n \qquad (16)$$

Τύπος Simpson 3/8

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x)\, dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + \ldots + 2f_{n-3} + 3f_{n-2} + 3f_{n-1} + f_n) \qquad (17)$$

Συνολικό Σφάλμα:

$$E = -\frac{b-a}{80}h^4 f^{(4)}(\xi_1) \quad \text{για} \quad x_0 \leq \xi_1 \leq x_n \qquad (18)$$

Τύποι γα Αριθμητική Ολοκλήρωση

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + ... + 2f_{n-1} + f_n)$$
$$- \frac{b-a}{12} h^2 f^{(2)}(\xi_1)$$
$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + ... + 2f_{n-2} + 4f_n + f_{n+1})$$
$$- \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi_1)$$ απαιτεί άρτιο αριθμό υποδιαιρέσεων
$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + 3f_4 + 3f_5 + ... + 3f_{n-2} + 3f_{n-1} +$$
$$- \frac{b-a}{80} h^4 f^{(4)}(\xi_1)$$ απαιτεί διαιρετό δια 3 αριθμό υποδιαιρέσ

όπου $x_0 \leq \xi_1 \leq x_n$

- Για βήμα h: Ακριβής τιμή : $A = I_1 + ch^2$
- Για βήμα kh: Ακριβής τιμή : $A = I_2 + ck^2h^2$

Οπότε λαμβάνουμε:

$$A = \frac{k^2 I_1 - I_2}{k^2 - 1} \quad \text{και} \quad c = \frac{I_2 - I_1}{h^2(1 - k^2)} \tag{19}$$

Αν για παράδειγμα $k = 1/2$ τότε

$$A = I_2 + \frac{1}{3}(I_2 - I_1) \tag{20}$$

Στη γενική περίπτωση για μεθόδους με σφάλμα $O(h^n)$ θα είναι:

$$A = I_2 + \frac{I_2 - I_1}{2^n - 1}. \tag{21}$$

Ξεκινάμε με τον κανόνα του τραπεζίου:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2h}{2}\left(f_0 + f_2\right) = h\left(f_0 + f_2\right) \\ I_2 &= \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right) + \frac{h}{2}\left(f_1 + f_2\right) = \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right) \end{aligned}$$

Οπότε **η αληθής τιμή**, με βάση την (20), θα είναι:

$$A = \frac{2h(f_0 + 2f_1 + f_2) - h(f_0 + f_2)}{3} = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$

Ολοκλήρωση με Splines

Με τα Splines για κάθε διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$ βρίσκουμε ένα 3ο-βάθμιο συμπτωτικό πολυώνυμο, δηλαδή :

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{a_i}{4}(x-x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x-x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x-x_i)^2 + d_i(x-x_i) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\
&= \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{a_i}{4}(x_{i+1}-x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x_{i+1}-x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x_{i+1}-x_i)^2 + d_i(x_{i+1}-x_i) \right] .
\end{aligned}$$

Οπότε η ολοκλήρωση ανάγεται στον υπολογισμό των αθροισμάτων:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h^4}{4}\sum_{i=0}^{n-1} a_i + \frac{h^3}{3}\sum_{i=0}^{n-1} b_i + \frac{h^2}{2}\sum_{i=0}^{n-1} c_i + h\sum_{i=0}^{n-1} d_i \qquad (22)$$

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ : Δεν συνίσταται ως μέθοδος παρά μόνο αν ήδη προυπάρχουν τα Splines.

Θεώρημα της μέσης τιμής:

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\,f(\xi) \tag{23}$$

Μπορούμε να πάρουμε μια προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος γράφοντας:

$$I = \int_a^b f(x)dx \equiv c_0 f(a) + c_1 f(b) \tag{24}$$

Αυτή η μορφή θα είναι ακριβής για πολυώνυμα της μορφής $f(x) = 1$ και $f(x) = x$

$$f(x) = x \quad \Rightarrow \quad \int_a^b x \cdot dx = \left.\frac{x^2}{2}\right|_a^b = \frac{1}{2}\left(b^2 - a^2\right) \equiv c_0 \cdot a + c_1 \cdot b \tag{25}$$

$$f(x) = 1 \quad \Rightarrow \quad \int_a^b 1 \cdot dx = x|_a^b = (b-a) \equiv c_0 \cdot 1 + c_1 \cdot 1 \tag{26}$$

$$c_0 = \frac{b-a}{2} \quad \text{και} \quad c_1 = \frac{b-a}{2} \tag{27}$$

Επομένως

$$\int_a^b f(x)dx \equiv \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \tag{28}$$

Αν με βάση τα παραπάνω σχηματίσουμε μια σχέση με 3 όρους :

$$\int_a^b f(x)dx \equiv c_0 f(a) + c_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + c_2 f(b) \tag{29}$$

Αυτή θα είναι ακριβής για πολυώνυμα της μορφής:
$f(x) = 1$,
$f(x) = x$ και
$f(x) = x^2$
οπότε:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \tag{30}$$

Μέθοδος Euler-Maclaurin

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να εμπλουτισθεί με τη χρήση παραγώγων π.χ.:

$$\int_a^b f(x)dx = c_0 f(a) + c_1 f(b) + c_2 f'(a) + c_3 f'(b) \tag{31}$$

Που τελικά μπορεί να γενικεύθει στον παρακάτω τύπο των Euler-Maclaurin

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x)\, dx &= \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &- \frac{h^2}{12}[f'(x_n) - f'(x_0)] + \frac{h^4}{720}\left[f^{(3)}(x_n) - f^{(3)}(x_0)\right] \\ &- \frac{h^6}{30240}\left[f^{(5)}(x_n) - f^{(5)}(x_0)\right] \end{aligned} \tag{32}$$

Euler-Maclaurin : Παράδειγμα

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin(x)dx$$

Με χρήση της σχέσης (32) μόνο για τα 2 σημεία στα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης λαμβάνουμε :

$$\begin{aligned}
\int_0^{\pi/2} \sin(x)dx &= \frac{\pi}{4}\left(\sin 0 + \sin\frac{\pi}{2}\right) \\
&+ \frac{\pi^2}{2^2 \cdot 12}\left(\cos 0 - \cos\frac{\pi}{2}\right) \\
&- \frac{\pi^4}{2^4 \cdot 720}\left(\sin 0 - \sin\frac{\pi}{2}\right) \\
&+ \frac{\pi^6}{2^6 \cdot 30240}\left(\cos 0 - \cos\frac{\pi}{2}\right) \\
&= \frac{\pi}{4} + \frac{\pi^2}{48} + \frac{\pi^4}{16 \cdot 720} + \frac{\pi^6}{2^6 \cdot 30240} = 0.99996732
\end{aligned}$$

Η μέθοδος του Filon

Για ολοκληρώματα της μορφής:

$$\int_a^b f(x)\sin(x)dx \quad \text{και} \quad \int_a^b f(x)\cos(x)dx$$

ωε ςαν τρψ

$$\int_0^{2\pi} f(x)\sin(x)dx \approx A_1 f(0) + A_2 f(\pi) + A_3 f(2\pi)$$

που θα είναι ακριβής για $f(x) = 1$, $f(x) = x$ και $f(x) = x^2$

$$\begin{aligned} f(x) = 1 \quad &\Rightarrow \quad 0 = A_1 + A_2 + A_3 \\ f(x) = x \quad &\Rightarrow \quad -2\pi = \pi A_2 + 2\pi A_3 \\ f(x) = x^2 \quad &\Rightarrow \quad -4\pi^2 = \pi^2 A_2 + 4\pi^2 A_3 \end{aligned}$$

με λύση $A_1 = 1$, $A_2 = 0$ και $A_3 = -1$. Άρα

$$\int_0^{2\pi} f(x)\sin x dx \approx f(0) - f(2\pi).$$

Η μέθοδος του Filon : Γενική μορφή

$$\int_a^b y(x)\sin(kx)dx \approx h\left[Ay(a)\cos(ka) - Ay(b)\cos(kb) + BS_e + DS_o\right] \quad (33)$$

$$\int_a^b y(x)\cos(kx)dx \approx h\left[Ay(a)\cos(ka) - Ay(b)\cos(kb) + BC_e + DC_o\right] \quad (34)$$

$$A = \frac{1}{q} + \frac{\sin(2q)}{2q^2} - \frac{2\sin^2(q)}{q^3} \quad (35)$$

$$B = \frac{1}{q^2} + \frac{\cos^2(q)}{q^2} - \frac{\sin(2q)}{q^3} \quad (36)$$

$$D = \frac{4\sin(q)}{q^3} - \frac{4\cos(q)}{q^2} \quad (37)$$

$$
\begin{aligned}
S_e &= -y(a)\sin(ka) - y(b)\sin(kb) \\
&+ 2\sum_{i=0}^{n} y(a+2ih)\sin(ka+2iq) \qquad (38) \\
S_o &= \sum_{i=1}^{n} y\left[a+(2i-1)h\right]\sin\left[ka+(2i-1)q\right] \qquad (39) \\
C_e &= -y(a)\sin(ka) - y(b)\sin(kb) \\
&+ 2\sum_{i=0}^{n} y(a+2ih)\sin(ka+2iq) \qquad (40) \\
C_o &= \sum_{i=1}^{n} y\left[a+(2i-1)h\right]\sin\left[ka+(2i-1)q\right] \qquad (41)
\end{aligned}
$$

όπου $q = kh$.

Η μέθοδος του Filon: Παράδειγμα

$$I = \int_0^{2\pi} e^{-x/2}\cos(100x)dx = 4.783810813 \times 10^{-5} \qquad (42)$$

Σημειώστε ότι η μέθοδος του Filon με χρής μόνο 4 σημείων είναι πιο ακριβής από τη μέθοδο του Simpson με 1000 σημεία

n	Simpson	Filon
4	1.91733833E+0	4.77229440E-5
8	-5.73192992E-2	4.72338540E-5
16	2.42801799E-2	4.72338540E-5
128	5.55127202E-4	4.78308678E-5
256	-1.30263888E-4	4.78404787E-5
1024	4.77161559E-5	4.78381120E-5
2048	4.78309107E-5	4.78381084E-5

Μέθοδος Gauss

Αποτελεί επέκταση της προηγούμενης μεθόδου, αλλά αντί της χρήσης προκαθορισμένων σημείων, υπολογίζουμε τα κατάλληλα σημεία μαζί με τα αντίστοιχα βάρη. Για παράδειγμα:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx af(x_1) + bf(x_2) \tag{43}$$

αυτό το ολοκλήρωμα είναι ακριβές για $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$ και $f(x) = x^3$.
Οπότε οδηγούμαστε στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων:

$$\left.\begin{array}{lll} f(x) = 1 & \Rightarrow & 2 = a + b \\ f(x) = x & \Rightarrow & 0 = ax_1 + bx_2 \\ f(x) = x^2 & \Rightarrow & \frac{2}{3} = ax_1^2 + bx_2^2 \\ f(x) = x^3 & \Rightarrow & 0 = ax_1^3 + bx_2^3 \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} a = b = 1 \\ x_1 = -x_2 = -\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} = -0.5773 \end{array}$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-0.5773) + f(0.5773)$$

Αρα απαιτείται ο υπολογισμός της τιμής της συνάρτησης σε 2 μόνο κατάλληλα επιλεγμένα σημεία που είναι :

$x_1 = -0.5773$ και $x_2 = 0.5773$.

Μέθοδος Gauss

Αν τα όρια ολοκλήρωσης είναι διαφορετικά απο -1 και 1 τότε χρησιμοποιούμε ένα μετασχηματισμό της μορφής:

$$t = \frac{1}{2}(b-a)x + \frac{1}{2}(b+a) \quad \text{και} \quad dt = \frac{b-a}{2}dx\,. \tag{44}$$

Μέθοδος Gauss : Παράδειγμα

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin(x)dx$$

Κάνουμε αλλαγή της μεταβλητής ολοκλήρωσης που οδηγεί σε αλλαγή των ορίων, σε -1 και 1

$$x = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}t + \frac{\pi}{2}\right) = \frac{\pi}{4}(t+1) \quad \text{ανδ} \quad dx = \frac{\pi}{4}dt$$

οπότε η νέα μορφή του ολοκληρώματος είναι:

$$\begin{aligned} I &= \frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1} \sin\left[\frac{\pi}{4}(t+1)\right] dt \\ &= \frac{\pi}{4}\left[1.0 \cdot \sin\left(0.10566 \cdot \pi\right) + 1.0 \cdot \sin\left(0.39434 \cdot \pi\right)\right] \\ &= 0.99849 \end{aligned}$$

Δηλαδή σφάλμα 1.53×10^{-3} όταν η μέθοδος του τραπεζίου με 2 σημεία δίνει $I = 0.7854$ και η Simposn με 3 σημεία 1.0023.

Η μέθοδος των Gauss-Legendre

Αποτελεί γενίκευση της μεθόδου του Gauss για n σημεία. Δηλαδή, αν γράφουμε το ολοκλήρωμα στη μορφή

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \tag{45}$$

τότε οι ποσότητες A και x_i θα υπολογισθούν από τις $2n$ εξισώσεις.
Η μέθοδος αυτή θα είναι ακριβής για πολυωνυμικές συναρτήσεις ως και $2(n-1)$ βαθμού. Οι $2n$ εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως:

$$A_1 x_1^k + ... + A_n x_n^k = \begin{cases} 0 & \text{για} \quad k = 1, 3, 5, ..., 2n-1 \\ \frac{2}{k+1} & \text{για} \quad k = 2, 4, 6, ..., 2n-2 \end{cases} \tag{46}$$

Μπορεί να αποδειχθεί ότι τα x_i είναι ρίζες των πολυωνύμων Legendre βαθμού n και εμπεριέχονται πάντα στο διάστημα $(-1, 1)$.
Τα πολυώνυμα Legendre μπορούν να παραχθούν από την αναδρομική σχέση:

$$(n+1)\, L_{n+1}(x) - (2n+1)\, x L_n(x) + n L_{n-1}(x) = 0 \tag{47}$$

Για παράδειγμα τα 3 πρώτα είναι:

$$L_0(x) = 1, \qquad L_1(x) = x \quad \text{ανδ} \quad L_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \tag{48}$$

Οπότε τα A_i δίνονται από τη σχέση:

$$A_i = \frac{2\left(1 - x^2\right)}{n^2 \left[L_{n-1}(x_i)\right]^2} \tag{49}$$

Για παράδειγμα, αν $n = 4$ θα πρέπει να βρούμε τις ρίζες του 4-βάθμιου πολυωνύμου Legendre

$$P_4 = \frac{1}{8}\left(35x^4 - 30x^2 + 3\right)$$

που είναι $x_i = \pm\left[(15 \pm 2\sqrt{30})/35\right]^{1/2}$ και στη συνέχεια χρησιμοποιώντας την (49) να βρούμε τα A_i.

Οι ακριβείς τιμές δίνονται στον πίνακα 2

n	x_i	A_i
2	$\pm$ 0.5773502692	1.000000000
4	$\pm$ 0.8611363116	0.3478548451
	$\pm$ 0.3394810436	0.6521451549
8	$\pm$ 0.9602898565	0.1012285363
	$\pm$ 0.7966664774	0.2223810345
	$\pm$ 0.5255324099	0.3137066459
	$\pm$ 0.1834346425	0.3626837834

Πίνακας: Οι τιμές των x_i και A_i για η μέθοδο Gauss-Legendre για 2, 4 και 8 σημεία.

Για ολοκληρώματα του τύπου:

$$I = \int_a^b w(x)y(x)dx \tag{50}$$

μπορούν να χρησιμοποιηθούν εναλλακτικά ορθογώνια πολυώνυμα, οπότε

$$\int_a^b w(x)y(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_i y(x_i) \tag{51}$$

οι προς υπολογισμό ποσότητες x_i και A_i μπορούν να υπολογισθούν σε αντιστοιχία με τα προηγούμενα αλλά συνήθως βρίσκονται εύκολα στα μαθηματικά τυπολόγια.
Ανάλογα με τη μορφή της συνάρτησης βάρους $w(x)$ έχουμε τις παρακάτω επιλογές:

- Μέθοδος **Gauss-Legendre με συνάρτηση βάρους** $w(x) = 1$.

Για ολοκληρώματα της μορφής:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} y(x)\, dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i y(x_i) \tag{52}$$

Δηλαδή η συνάρτηση βάρους είναι $w(x) = e^{-x}$ όπου x_i είναι οι ρίζες των πολυωνύμων Laguerre polynomials που μπορούν να παραχθούν απο την αναδρομική σχέση:

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^n\right) \tag{53}$$

ενώ οι συντελεστές A_i θα δίνονται απο τη σχέση:

$$A_i = \frac{(n!)^2}{x_i \left[L_n'(x_i)\right]^2} \tag{54}$$

Μέθοδος Gauss-Laguerre

Οι ακριβείς τιμές δίνονται στον πίνακα 3.

n	x_i	A_i
2	0.58578644	0.85355339
	3.41421356	0.14644661
4	0.32254769	0.60315410
	1.74576110	0.35741869
	4.53662030	0.03888791
	9.39507091	0.00053929
6	0.22284660	0.10122854
	1.18893210	0.41700083
	2.99273633	0.11337338
	5.77514357	0.01039920
	9.83746742	0.00026102
	15.98287398	0.00000090

Πίνακας: Οι τιμές των x_i και A_i για τη μέθοδο Gauss-Laguerre για 2, 4 και 6 σημεία.

Η μέθοδος Gauss-Hermite

Για ολοκληρώματα της μορφής

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} y(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i y(x_i) \qquad (55)$$

δηλαδή με συνάρτηση βάρους $w(x) = e^{-x^2}$.
Τα x_i είναι ρίζες των πολυωνύμων Hermite. Τα πολυώνυμα Hermite μπορούν να δημιουργηθούν από τις σχέσεις:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right) \qquad (56)$$

ενώ οι συντελεστές A_i υπολογίζονται από τις σχέσεις:

$$A_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H_n'(x_i)]^2} \qquad (57)$$

Τα x_i και A_i δίνονται στον Πίνακα 4.

n	x_i	A_i
2	$\pm$ 0.70710678	0.88622693
4	$\pm$ 0.52464762	0.80491409
	$\pm$ 1.65068012	0.08131284
6	$\pm$ 0.43607741	0.72462960
	$\pm$ 1.33584907	0.15706732
	$\pm$ 2.35060497	0.00453001

Πίνακας: Οι τιμές των x_i και A_i για τη μέθοδο Gauss-Hermite method για 2, 4 και 6 σημεία.

Μέθοδος Gauss-Chebyshev

Για ολοκληρώματα της μορφής :

$$\int_{-1}^{1} \frac{y(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{n} \sum_{i=1}^{n} y(x_i) \tag{58}$$

Με συνάρτηση βάρους

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \tag{59}$$

όπου τα x_i είναι ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev

$$T_n(x) = \cos\left[n \arccos(x)\right] \tag{60}$$

και δίνονται απο τις σχέσεις

$$x_i = \cos\left[\frac{\pi}{2n}(2i-1)\right] . \tag{61}$$

Ενώ τα A_i δίνονται από

$$A_i = \frac{\pi}{n} \tag{62}$$

όπου n είναι ο βαθμός του πολυωνύμου που χρησιμοποιούμε.

Μη-γνήσια ολοκληρώματα

Για παράδειγμα:

$$I = \int_0^\infty xe^{-x} dx$$

που μπορεί να γραφεί ως

$$I = \int_0^1 xe^{-x} dx + \int_1^\infty xe^{-x} dx$$

και μπορεί να αποδειχθεί ότι συγκλίνει με την αντικατάσταση $y = 1/x$
Γενικά γράφουμε το ολοκλήρωμα στη μορφή

$$I = \lim_{A\to\infty} \int_0^A xe^{-x} dx$$

και δοκιμάζουμε για διάφορες τιμές του A. Για παράδειγμα

A	I
1	0.26424
10	0.9995006008
20	0.9999999567157739
100	1.00000000
∞	1.0000000

Πολλαπλά ολοκληρώματα

Αν τα όρια της ολοκλήρωσης είναι σταθερά, τότε ¨σειριακά' μπορούμε να εφαρμόσουμε κάποια από τις προηγούμενες μεθόδους ολοκληρωσης

$$\int_A \int f(x,y)dA = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy \right) dx = \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)dx \right) dy$$

Αν για παράδειγμα χρησιμοποιήσουμε 4 στη x-διεύθυνση και 5 στη διεύθυνση y μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον κανόνα του τραπεζίου στη διεύθυνση x και του Simpson στη διεύθυνση y. Αναλυτικά γράφεται ως:

$$\begin{aligned} \int f(x,y)dxdy &= \sum_{j=1}^{m} v_j \sum_{i=1}^{n} w_i f_{ij} \\ &= \frac{\Delta y}{3} \frac{\Delta x}{2} \left[(f_{11} + 2f_{21} + 2f_{31} + f_{41}) \right. \\ &\quad +4 (f_{12} + 2f_{22} + 2f_{32} + f_{42}) \\ &\quad \left. + \cdots + (f_{15} + 2f_{25} + 2f_{35} + f_{45}) \right] \end{aligned} \tag{63}$$

Ασκήσεις

1. Με τη μέθοδο των προσδιοριστέων συντελεστών υπολογίστε τους συντελεστές στον τύπο

$$\begin{aligned}\int_{-h}^{h} y(x)dx &= h\left[a_{-1}y(-h) + a_0 y(0) + a_1 y(h)\right] \\ &+ h^2\left[b_{-1}y'(-h) + b_0 y'(0) + b_1 y'(h)\right] \qquad (64)\end{aligned}$$

   έτσι ώστε να είνα ακριβής για όσο το δυνατόν μεγαλύτερου βαθμού πολυώνυμο.

2. Εφαρμόστε τη μέθοδο Gauss-Legendre και κατόπιν τη μέθοδο Simpson-Romberg για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος $\int_0^{\pi/2} \log(1+x)dx$ (η ακριβής τιμή είναι 0.856589940). Τι παρατηρείτε ;