3. Αριθμητική ολοκλήρωση

Η αριθμητική ολοκλήρωση αφορά την εύρεση της τιμής ενός ορισμένου ολοκληρώματος. Η αρχή αυτής της προσπάθειας ανάγεται στην αρχαιότητα και ένα παράδειγμα είναι ο διαμερισμός (quadrature) του κύκλου με εγγεγραμμένα κανονικά πολύγωνα που οδήγησε τον Αρχιμήδη στον καθορισμό των ορίων της τιμής του π που ως γνωστό είναι ατέρμων αριθμός. Από την εποχή του Αρχιμήδη και ιδιαίτερα μετά τον δέκατο έκτο αιώνα παρουσιάστηκαν πολλές μέθοδοι αριθμητικής ολοκλήρωσης. Στα παρακάτω κεφάλαια θα ασχοληθούμε όμως με τους πλέον συνήθεις κανόνες ολοκλήρωσης που εφαρμόζονται στους υπολογισμούς που προκύπτουν σε κλάδους της επιστήμης των μηχανικών και σε άλλες εφαρμοσμένες επιστήμες.

Georg Friedrich Bernhard Riemann ή Bernhard Riemann (1826-1866) είναι ένας από τους πιο γνωστούς μαθηματικούς του 19ου αιώνα. Στην σύντομη σταδιοδρομία του εισήγαγε ιδέες βασικής σημασίας στην πραγματική και μιγαδική ανάλυση, την διαφορική γεωμετρία, και την θεωρία αριθμών. Η δουλεία του στην διαφορική γεωμετρία, όπως επεκτάθηκε από τον Hermann Minkowski, απετέλεσε την βάση της γενικής θεωρίας της σχετικότητας. Ο Riemann άρχισε σπουδές θεολογίας στο Πανεπιστήμιο του Göttingen αλλά γρήγορα μεταφέρθηκε στο τμήμα φιλοσοφίας, για να μελετήσει επιστήμες και μαθηματικά και υπήρξε μαθητής του Gauss. Μετά από ένα χρόνο Göttingen πήγε στο Πανεπιστήμιο του Βερολίνου όπου υπήρξε μαθητής των Jacobi, Steiner, Eisenstein και Dirichlet, οποίος και τον επηρέασε σημαντικά στην επαγγελματική του σταδιοδρομία.

Οι συναρτήσεις που θα διαπραγματευτούμε θεωρούνται ότι είναι ολοκληρώσιμες με την έννοια που καθόρισε ο Riemann. Η συνάρτηση μιας μεταβλητής, $y = f(x)$, φραγμένη στο πεπερασμένο διάστημα $[a, b]$ είναι ολοκληρώσιμη κατά Riemann όταν θεωρώντας:

(1) Τον διαμερισμό του διαστήματος $[a, b]$ σε n υποδιαστήματα που ορίζονται από τα σημεία $a = x_0 < x_1 < x_2 < ..... < x_n = b$ και ένα σημείο ξ_j σε κάθε υποδιάστημα $x_j \le \xi_j \le x_{j+1}$

(2) Το άθροισμα $S_n = \sum_{j=1}^{n} f(\xi_j)(x_j - x_{j-1})$, που ονομάζεται άθροισμα Riemann, και σχηματίζοντας τις σειρές αθροισμάτων $S_1, S_2, ..., S_n$ όπου ο δείκτης δηλώνει το μέγιστο μήκος του υποδιαστήματος $\Delta_n = \max_j (x_j - x_{j+1})$ και θεωρήσουμε ότι στο όριο $\lim_{n\to\infty} \Delta_n = 0$.

Τότε εάν για κάθε σειρά και για την αντίστοιχη εκλογή του σημείου ξ_j η σειρά $\{S_n\}$ έχει ένα κοινό όριο S. Το δε ολοκλήρωμα της συνάρτησης

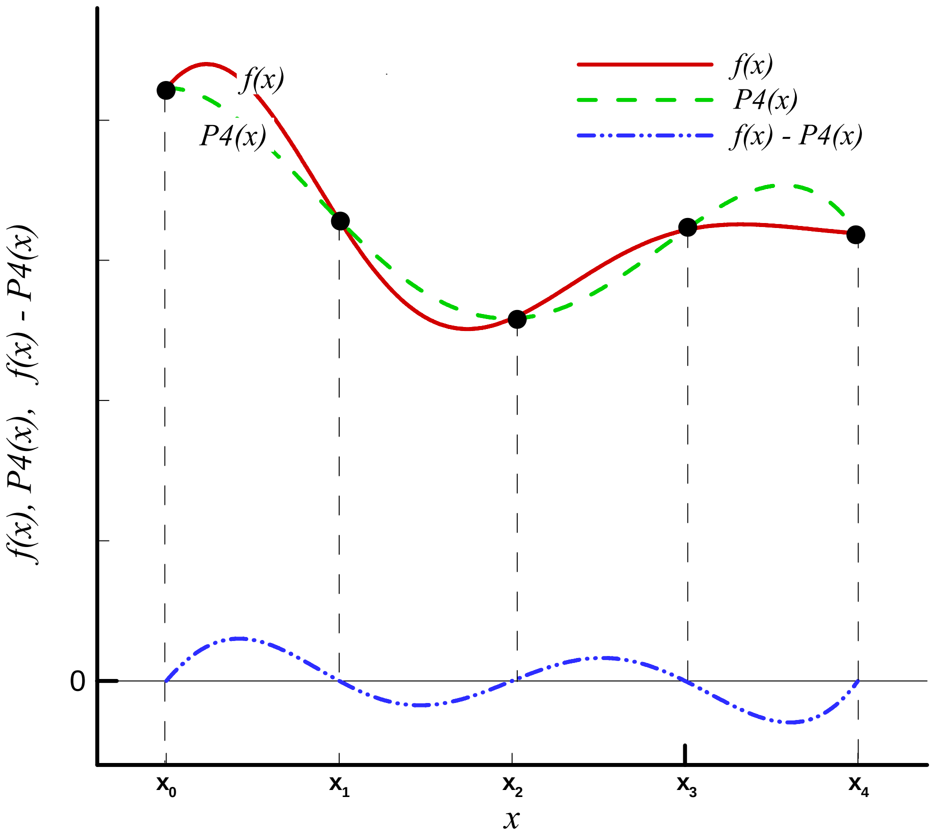
$f(x)$ έχει τιμή, S, για το ολοκλήρωμα κατά Riemann στο διάστημα$[a, b]$. Η ικανή και αναγκαία συνθήκη για την ύπαρξη του ολοκληρώματος κατά Riemann είναι η συνάρτηση $f(x)$ να είναι συνεχής σχεδόν παντού. Εάν η συνάρτηση $f(x)$ είναι συνεχής στο διάστημα $[a, b]$ τότε είναι ολοκληρώσιμη κατά Riemann. Επίσης όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι φραγμένη στο διάστημα $[a, b]$ και συνεχής εκτός από πεπερασμένο αριθμό σημείων ασυνέχειας, τότε πάλι είναι ολοκληρώσιμη κατά Riemann.

Η εύρεση της τιμής του ορισμένου ολοκληρώματος

$$\int_{\alpha}^{b} f(x)dx \tag{3.1}$$

μιας γνωστής συνάρτησης $f(x)$, που έστω ότι είναι ολοκληρώσιμη κατά Riemann, με αναλυτικές μεθόδους είναι πολλές φορές δύσκολη ή ακόμη και αδύνατη, ακόμη και όταν η μορφή της συνάρτησης $f(x)$ είναι σχετικά απλή. Οι τιμές ορισμένων ολοκληρωμάτων και γενικότερα αόριστα ολοκληρώματα πολλών συναρτήσεων μπορεί να βρεθούν από πίνακες ολοκληρωμάτων ή και από προγράμματα στον υπολογιστή, όπως Mathematica, Maple κλπ., που παρέχουν δυνατότητες συμβολικής λογικής.

Σε πολλές εφαρμογές η συνάρτηση $f(x)$ δεν είναι γνωστή με την αναλυτική της έκφραση αλλά δίνεται υπό μορφή πίνακα τιμών $f(x_j)$ σε ορισμένα σημεία x_j, $j = 0,1,.....,n$ του διαστήματος $[a,b]$. Προφανής εναλλακτική λύση για την εύρεση της προσεγγιστικής τιμής του ορισμένου ολοκληρώματος της Εξ. (3.1) στις περιπτώσεις που η συνάρτηση είναι γνωστή μόνο σε διακριτά σημεία, ή όταν ο αναλυτικός προσδιορισμός του ολοκληρώματος δεν είναι δυνατός, αποτελεί η προσέγγιση της συνάρτησης ολοκλήρωσης με κάποιο πολυώνυμο. Ο αναλυτικός προσδιορισμός του ολοκληρώματος ενός πολυωνύμου είναι πάντα δυνατός και η διαδικασία αναλυτικής ολοκλήρωσης είναι ιδιαίτερα απλή. Όταν δε η πολυωνυμική προσέγγιση είναι σχετικά ακριβής η τιμή του ορισμένου ολοκληρώματος βρίσκεται με μικρό σφάλμα. Οι μέθοδοι παρεμβολής και προσέγγισης συναρτήσεων με πολυώνυμα αναπτύχθηκαν με λεπτομέρεια στο προηγούμενο κεφάλαιο και θα χρησιμοποιηθούν για την αριθμητική ολοκλήρωση που θα διαπραγματευτούμε στο κεφάλαιο αυτό. Η προσέγγιση μιας συνάρτησης με πολυώνυμο απεικονίζεται στο Σχ. 3.1.



Σχήμα 3.1 Αριθμητική ολοκλήρωση με προσέγγιση συνάρτησης με πολυώνυμο τέταρτου βαθμού.

Το πολυώνυμο τέταρτου βαθμού $p_4(x)$ στο παραπάνω σχήμα αναπαριστά επ' ακριβώς την συνάρτηση στους κόμβους x_0, x_1, x_2, x_3, x_4. Η τιμή του ολοκληρώματος της συνάρτησης είναι το εμβαδόν κάτω από την συνεχή καμπύλη.

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\,dx$$

ενώ η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος είναι το εμβαδόν κάτω από την διακεκομμένη καμπύλη

$$\int_{x_0}^{x_4} p_4(x)\,dx$$

Η διαφορά μεταξύ ακριβούς συνάρτησης και της πολυωνυμικής προσέγγισης είναι

$$e(x) = f(x) - p_4(x)$$

και επίσης απεικονίζεται στο Σχ. 3.1. Το συνολικό σφάλμα ολοκλήρωσης είναι

$$\int_{x_0}^{x_4} e(x)\, dx = \int_{x_0}^{x_4} f(x)\, dx - \int_{x_0}^{x_4} p_4(x)\, dx$$

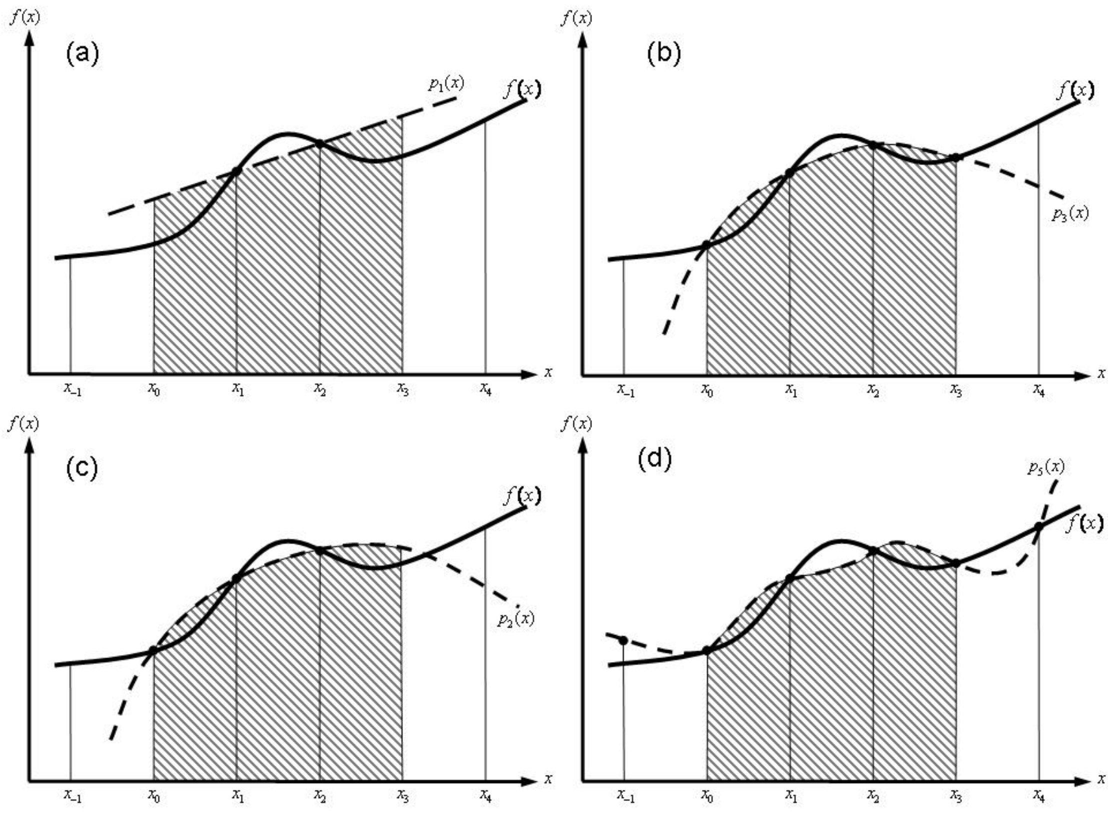
Παρατηρούμε ότι το συνολικό σφάλμα ολοκλήρωσης μπορεί να είναι μικρό ακόμα και όταν η παρεμβολή με πολυώνυμο δεν είναι πολύ καλή επειδή τα σφάλματα με θετικό πρόσημο εξουδετερώνονται από τα σφάλματα με αρνητικό πρόσημο. Αυτό είναι αναμενόμενο διότι όπως είναι γνωστό η ολοκλήρωση είναι μια διαδικασία εξομάλυνσης. Τα σημεία παρεμβολής που σχετίζονται με την ολοκλήρωση ονομάζονται σημεία ολοκλήρωσης και όπως θα δούμε μπορεί να είναι ομοιόμορφα ή μη ομοιόμορφα κατανεμημένα. Στην ολοκλήρωση τα σημεία έχουν ορισμένες ειδικές θέσεις που ονομάζονται σημεία ολοκλήρωσης ή σημεία διαμερισμού (quadrature points από την διαμέριση του κύκλου που αναφέραμε στην αρχή) και η αντίστοιχη διαδικασία αριθμητικής ολοκλήρωσης αναφέρεται ως ολοκλήρωση Gauss (Gaussian quadrature). Η διαδικασία αριθμητικής ολοκλήρωσης με ισαπέχοντα διαστήματα είναι η απλούστερη και ονομάζεται Newton–Cotes. Οι κανόνες ολοκλήρωσης τύπου Newton–Cotes παρουσιάζονται αμέσως παρακάτω.

3.1. Αριθμητική ολοκλήρωση με ισαπέχοντα σημεία ολοκλήρωσης, Newton-Cotes

Έστω ότι η προσεγγιστική τιμή του ορισμένου ολοκληρώματος βρίσκεται από το ολοκλήρωμα του πολυωνύμου παρεμβολής $n^{ου}$ βαθμού.

$$\int_{a}^{b} f(x)\, dx \approx \int_{a}^{b} p_n(x)\, dx \tag{3.2}$$

Υπάρχουν πολλοί τρόποι επιλογής των άκρων του διαστήματος σε σχέση με τα σημεία του πολυωνύμου παρεμβολής όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2. Παραδείγματος χάριν, στο Σχ. 3.2a έχουμε παρεμβολή πολυωνύμου πρώτου βαθμού για τέσσερα ισαπέχοντα σημεία όπου τα όρια ολοκλήρωσης δεν συμπίπτουν με το πρώτο και το τελευταίο σημείο παρεμβολής. Στο Σχ. 3.2b έχουμε πολυώνυμο κυβικής παρεμβολής που βρίσκεται από τις τέσσερις τιμές από τις οποίες η πρώτη και η τελευταία συμπίπτουν με τα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης. Ενώ στο Σχ. 3.2c έχουμε πολυώνυμο παρεμβολής δεύτερου βαθμού που χρησιμοποιεί πιο λίγα σημεία από τα σημεία ολοκλήρωσης. Ενώ στο Σχ. 3.2d το πολυώνυμο παρεμβολής σχηματίζεται με τα επί πλέον σημεία x_{-1} και x_4 πέραν των ορίων ολοκλήρωσης.

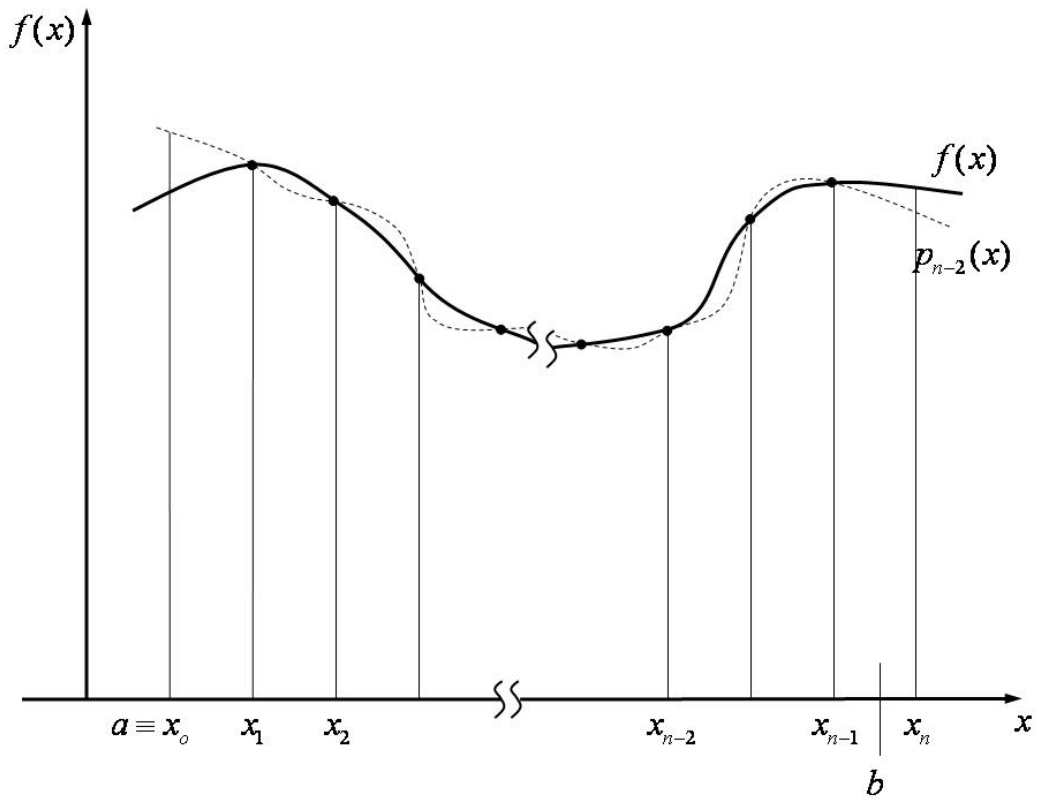


Σχήμα 3.2 Αριθμητική ολοκλήρωση με προσεγγίσεις διαφορετικών μορφών. (b) κλειστού τύπου, (a, d) ανοικτού τύπου.

Η αριθμητική ολοκλήρωση που πραγματοποιείται με πολυώνυμα που υπολογίζονται με σημεία που περιέχουν τα όρια ολοκλήρωσης (δες Σχ. 3.2b) ονομάζεται αριθμητική ολοκλήρωση κλειστού τύπου. Η αριθμητική ολοκλήρωση που βασίζεται σε πολυώνυμο παρεμβολής που βρίσκεται από εσωτερικά σημεία του διαμερισμού που δεν περιέχουν τα όρια ολοκλήρωσης (δες Σχ. 3.2d) είναι μορφές αριθμητικής ολοκλήρωσης ανοικτού τύπου. Η επέκταση σε τιμές της συνάρτησης έξω των ορίων ολοκλήρωσης έχει μικρή πρακτική σημασία διότι συχνά δεν είναι επιθυμητό να επεκτείνουμε την συνάρτηση έξω των ορίων ολοκλήρωσης.

3.2. Newton-Cotes για ολοκλήρωση ανοικτού τύπου

Το πρόβλημα ολοκλήρωσης ανοικτού τύπου δείχνεται σχηματικά στο Σχ. 3.3, όπου κατασκευάζεται ένα πολυώνυμο παρεμβολής βαθμού $n-2$ χρησιμοποιώντας $n-1$ ισαπέχοντα σημεία $x_1,......,x_{n-1}$. Το κάτω όριο ολοκλήρωσης είναι $\alpha \equiv x_0 = x_1 - h$, όπου h είναι το μήκος του ομοιόμορφου διαμερισμού, ενώ το άνω όριο ολοκλήρωσης είναι b.



Σχήμα 3.3 Γενική μορφή του προβλήματος αριθμητικής ολοκλήρωσης ανοικτού τύπου.

Η προσέγγιση του ολοκληρώματος της συνάρτησης $f(x)$ είναι

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_{n-2}(x)\, dx \tag{3.17}$$

Έστω ότι το πολυώνυμο προσέγγισης κατασκευάζεται με κατάντη διαφορές (forward differences)

$$p_{n-2}\left(x_0+\beta h\right)=f\left(x_1\right)+\left(\beta-1\right)\Delta f\left(x_1\right)+\frac{\left(\beta-1\right)\left(b-2\right)}{2\,!}\Delta^2 f\left(x_1\right)$$
$$+\frac{\left(\beta-1\right)\left(\beta-2\right)\left(\beta-3\right)}{3\,!}\Delta^3 f\left(x_1\right)+....+\frac{\left(\beta-1\right)...\left(\beta-n+2\right)}{\left(n-2\right)!}\Delta^{n-2}_{f\left(x_1\right)}$$

(3.18)

Η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος στο διάστημα $\left[a,b\right]$ με ανώτερο όριο b είναι

$$\int_a^b f\left(x\right)dx \approx \int_{x_0}^b p_{n-2}\left(x\right)dx = h\int_0^{\hat{b}} p_{n-2}\left(x_0+\beta h\right)d\beta \qquad (3.19)$$

όπου $\hat{b}=\left(b-x_0\right)/h \quad \kappa\alpha\iota \quad \beta=\left(x-x_0\right)/h$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (3.19) το πολυώνυμο παρεμβολής από την Εξ. (3.18) βρίσκουμε ότι η προσεγγιστική τιμή του ορισμένου ολοκληρώματος είναι:

$$\int_a^b f\left(x\right)dx \approx h\int_0^{\hat{b}}\left[f\left(x_1\right)+\left(\beta-1\right)\Delta f\left(x_1\right)+....\right]d\beta$$
$$=h\left[f\left(x_1\right)+\left(\frac{\beta^2}{2}-\beta\right)\Delta f\left(x_1\right)+\left(\frac{\beta^3}{6}-\frac{3\beta^2}{4}+\beta\right)\Delta^2 f\left(x_1\right)+....\right]_0^{\hat{b}} \qquad (3.20)$$

στο κατώτερο όριο ολοκλήρωση $\beta=0$ όλοι οι όροι μηδενίζονται οπότε

$$\int_0^b f\left(x\right)dx \simeq h\left[\hat{b}f\left(x_1\right)+\left(\frac{\hat{b}^2}{2}-\hat{b}\right)\Delta f\left(x_1\right)+\left(\frac{\hat{b}^3}{6}-\frac{3\hat{b}^2}{4}+\hat{b}\right)\Delta^2 f\left(x_1\right)+......\right] \qquad (3.21)$$

το σφάλμα προσέγγισης είναι

$$h\int_0^{\hat{b}} R_{n-2}\left(x_0+\beta\, h\right)dx = h\int_0^{\hat{b}}\frac{\left(\beta-1\right)\left(b-2\right)...\left(\beta-n+1\right)}{\left(n-1\right)!}f^{\left(n-1\right)}\left(\xi\right)d\beta,\quad x_0<\xi<b \qquad (3.22)$$

Όταν το άνω όριο ολοκλήρωσης στις Εξ. (3.21) και (3.22) συμπίπτει με το σημείο x_m, τότε έχουμε ολοκλήρωση για m συνολικά διαστήματα το καθένα από τα οποία έχει μήκος h. Επί πλέον, το μετασχηματισμένο άνω όριο ολοκλήρωσης είναι $\hat{b} = \left(x_m - x_0\right)/h$ και έχει ακέραιη τιμή. Η εκλογή $\hat{b} = n$ αντιστοιχεί στην παρακάτω ομάδα κανόνων ολοκλήρωσης ανοικτού τύπου (open-type Newton–Cotes).

$$\hat{b} = 2, \quad \int_{x_0}^{x_2} f\left(x\right)dx = 2h\, f\left(x_1\right) + \frac{h^3}{3} f^{(2)}\left(\xi\right)$$

$$\hat{b} = 3, \quad \int_{x_0}^{x_3} f\left(x\right)dx = \frac{3h}{2}\left[f\left(x_1\right) + f\left(x_2\right)\right] + \frac{3h^3}{4} f^{(2)}\left(\xi\right)$$

$$\hat{b} = 4, \quad \int_{x_0}^{x_4} f\left(x\right)dx = \frac{4h}{3}\left[2f\left(x_1\right) + 2f\left(x_3\right)\right] + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}\left(\xi\right)$$

$$\hat{b} = 5, \quad \int_{x_0}^{x_5} f\left(x\right)dx = \frac{5h}{24}\left[11f\left(x_1\right) + f\left(x_2\right) + f\left(x_3\right) + 11f\left(x_4\right)\right] + \frac{95h^5}{144} f^{(4)}\left(\xi\right)$$

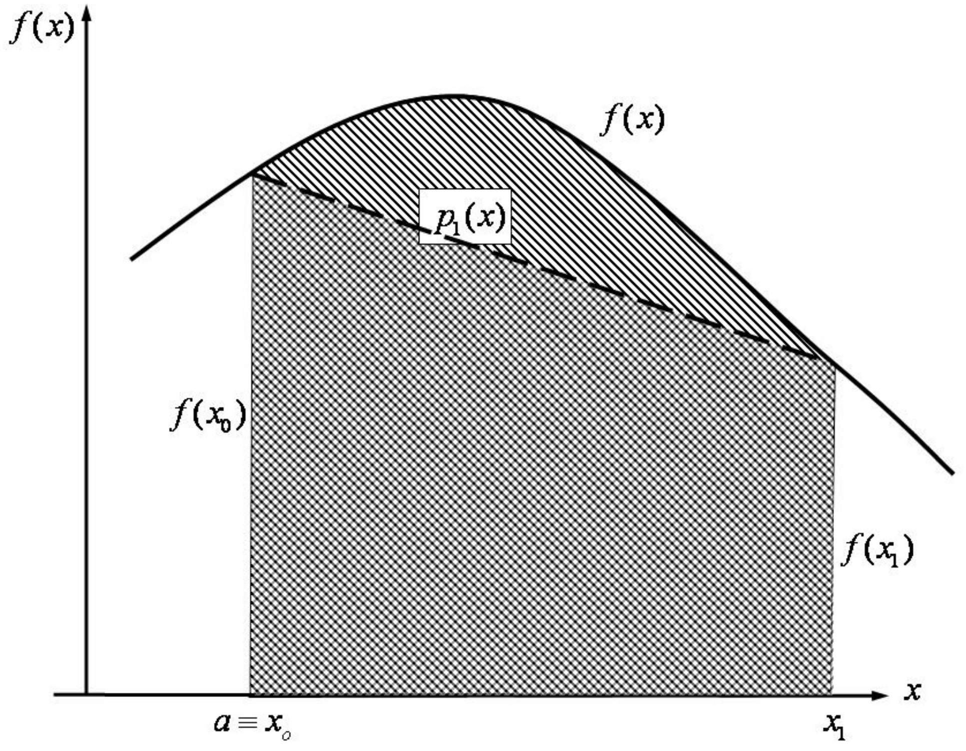
$$\hat{b} = 6, \quad \int_{x_0}^{x_5} f\left(x\right)dx = \frac{3h}{10}\left[11f\left(x_1\right) - 14f\left(x_2\right) + 26f\left(x_3\right)\right.$$

$$\left. -14f\left(x_4\right) + 11f\left(x_5\right)\right] + \frac{41h}{140} f^{(6)}\left(\xi\right)$$

Για άρτιες τιμές του μετασχηματισμένου άνω ορίου ολοκλήρωσης $\hat{b}$ (άρτιο αριθμό διαστημάτων ή περιττό αριθμό σημείων βάσης) οι παραπάνω τύποι ολοκλήρωσης είναι ακριβείς για πολυώνυμα βαθμού $\hat{b} - 1$ ή μικρότερου. Όταν μετασχηματισμένο άνω ορίου ολοκλήρωσης $\hat{b}$ είναι περιττός αριθμός οι κανόνες ολοκλήρωσης είναι ακριβείς για συναρτήσεις $f\left(x\right)$ που είναι πολυώνυμα βαθμού $\hat{b} - 2$ ή μικρότερου. Όταν το άνω όριο $\hat{b}$ είναι άρτιος αριθμός ο συντελεστής της κατάντη διαφοράς $\Delta^{\hat{b}-1} f\left(x_1\right)$ είναι μηδέν, δηλαδή το σφάλμα έχει μόνο παραγώγους τάξης $\hat{b}$ αντί για $\hat{b} - 1$. Γι' αυτό τον λόγο προτιμώνται οι κανόνες ανοικτού τύπου ολοκλήρωσης για άρτιο $\hat{b}$.

3.1 Newton – Cotes για ολοκλήρωση κλειστού τύπου

Η απλούστερη μορφή κλειστού τύπου αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι ο κανόνας του τραπεζίου που απεικονίζεται γραφικά στο Σχ. 3.4.



Σχήμα 3.4 Κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης κλειστού τύπου δύο σημείων, κανόνας τραπεζίου.

Στο Σχ. 3.4 τα δυο σημεία βάσης που συμπίπτουν με τα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης $x_0 = \alpha$ και $x_1 = b$ χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό ενός πολυωνύμου παρεμβολής πρώτης τάξης, $p_1(x) = p_1(x_0 + \beta h)$, δηλαδή

$$f(x) \simeq f(x + \beta\, h) = f(x_0) + \beta\, \Delta\, f(x_o) + R_1(x_0 + \beta\, h)$$
$$= p_1(x_0 + \beta\, h) + R_1(x_0 + \beta\, h) \tag{3.3}$$

όπου το σφάλμα της παραπάνω γραμμικής προσέγγισης είναι

$$R_1(x_0 + \beta\, h) = h^2\, \beta(\beta - 1)\frac{f''(\xi)}{2\,!} = h^2\, \beta(\beta - 1) f[x, x_0, x_1],\ \ x_0 < \xi < x_1 \tag{3.4}$$

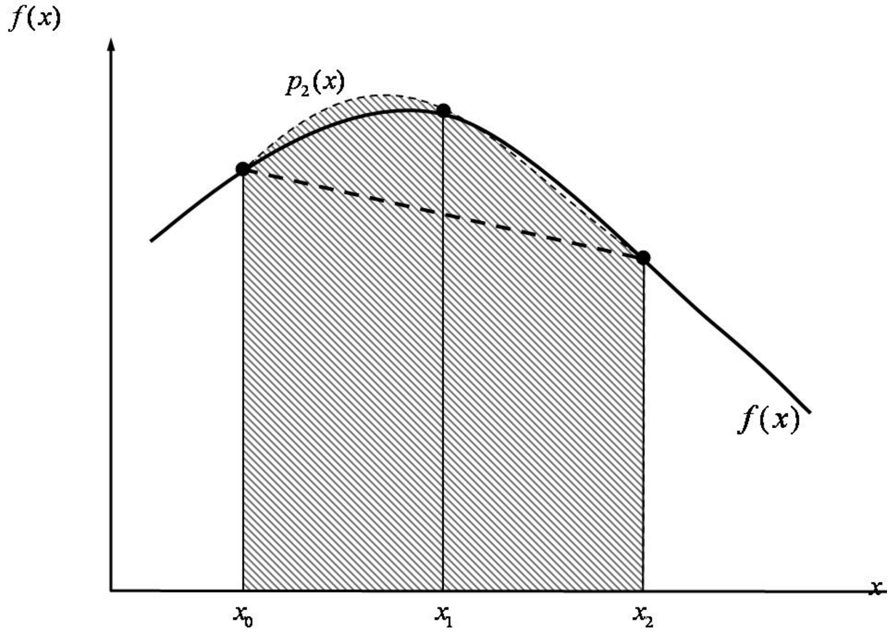
Χρησιμοποιούμε τον μετασχηματισμό $\beta=(x-x_0)/h$ για την αλλαγή της μεταβλητής ολοκλήρωσης από x σε β και με αντικατάσταση του πολυώνυμου παρεμβολής $p_1(x)$ στην θέση της συνάρτησης βρίσκουμε

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} p_1(x)dx = h\int_0^1 p_1(x_0+\beta\,\eta)d\beta \\ &= h\int_0^1 \left[f(x_0)+\beta\,\Delta f(x_0)\right]d\,\beta \qquad (3.5) \\ &= h\left[\beta f(x_0)+\frac{\beta^2}{2}\,\Delta\, f(x_0)\right]_0^1 = h\left[f(x_0)+\frac{\Delta f(x_0)}{2}\right]\end{aligned}$$

ο ορισμός της πρώτης τάξης κατάντη διαφοράς (forward difference) είναι $\Delta f(x_0)=f(x_0+h)-f(x_0)$ και η Εξ. (3.5) γίνεται

$$\int_{a=x_0}^{b=x_1} f(x)dx \approx h\left[f(x_0)+\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{2}\right]=\frac{h}{2}\left[f(x_0)+f(x_1)\right] \qquad (3.6)$$

Η παραπάνω σχέση είναι όμως ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης του τραπεζίου όπου το εμβαδόν κάτω από την καμπύλη του Σχ. 3.4 προσεγγίζεται με το εμβαδόν του τραπεζίου κάτω από την διακεκομμένη γραμμή.



Σχήμα 3.5 Μείωση του σφάλματος αριθμητικής ολοκλήρωσης με την δεύτερης τάξης προσέγγιση της συνάρτησης $f(x)$.

Ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης του τραπεζίου έχει όπως φαίνεται στο Σχ. 3.5 μεγαλύτερο σφάλμα από την δεύτερης τάξης προσέγγιση της συνάρτησης $f(x)$. Το σφάλμα προσέγγισης είναι :

$$\int_{x_0}^{x_1} R_1(x)dx = h\int_0^1 R_1(x_0 + b\,h)d\beta$$

$$= h^3 \int_0^1 \beta(\beta-1)\frac{f''(\xi)}{2\,!}d\,\beta \qquad x_0 < \xi < x_1 \tag{3.7}$$

Όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι συνεχής τότε $f''(\xi) = 2\,!f[x, x_0, x_1]$ είναι επίσης συνεχής αλλά άγνωστη συνάρτηση του x. Εφαρμόζοντας το θεώρημα μέσης τιμής βρίσκουμε

$$\int_0^b q(x)g(x)dx = q(\overline{\xi})\int_a^b g(x)dx$$

που ισχύει για δυο συνεχείς συναρτήσεις $q(x)$ και $g(x)$ στο διάστημα $\alpha \le x \le b$ όπου η συνάρτηση g(x) δεν αλλάζει πρόσημο και $a < \overline{\xi} < b$ στην Εξ. (3.7) όπου ο παράγων $g = \beta(\beta-1)$ είναι πάντοτε αρνητικός στο διάστημα $0 < \beta < 1$ έχουμε

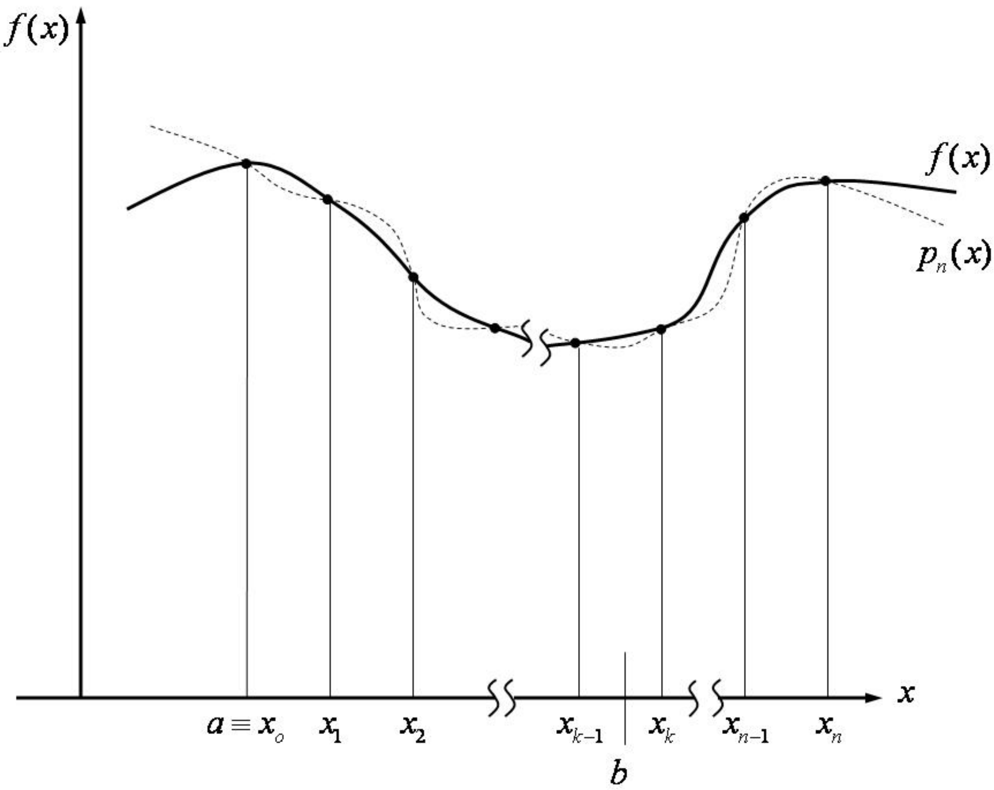
$$h^3\int_0^1 \beta(\beta-1)\frac{f''(\xi)}{2!}d\beta = h^3\,\frac{f''(\overline{\xi})}{2!}\int_0^1 \left(B^2 - \beta\right)dB$$

$$= -\frac{h^3}{12}f''(\overline{\xi}) \qquad x_0 < \overline{\xi} < x_1$$

και ο κανόνας ολοκλήρωσης τραπεζίου είναι

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] - \frac{h^3}{12}f''(\overline{\xi}) \qquad x_0 < \overline{\xi} < x_1 \tag{3.8}$$

Δηλαδή το σφάλμα είναι μηδέν μόνο όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι γραμμική, δηλαδή πολυώνυμο πρώτου βαθμού.



Σχήμα 3.6 Αριθμητική ολοκλήρωση κλειστού τύπου.

Το γενικό πρόβλημα αριθμητικής ολοκλήρωσης κλειστού τύπου με πολυώνυμα παρεμβολής ανώτερου βαθμού παρουσιάζεται γραφικά στο Σχ. 3.6. Το πολυώνυμο παρεμβολής είναι βαθμού n και προσδιορίζεται από τα $n+1$ ισαπέχοντα σημεία βάσης $x_0,.....x_n$. Η προσεγγιστική τιμή του ολοκληρώματος είναι

$$\int_0^b f(x)dx \approx \int_0^b p_n(x)dx = h\int_0^{\hat{b}} p_n(x_0+Bh)dB$$

$$= h\int_0^{\hat{b}} \Big[f(x_0) + \beta\,\Delta\, f(x_0) + \frac{\beta(\beta-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)$$

$$+\frac{\beta(\beta-1)(\beta-2)}{3\,!}\Delta^3 f(x_0) + ... + \frac{\beta(\beta-1).....(\beta-n+1)}{n\,!}\Delta^n f(x_0)\ \Big] d\,\beta \tag{3.9}$$

όπου το κάτω όριο ολοκλήρωσης $\alpha \equiv x_0$ και το άνω όριο ολοκλήρωσης μετασχηματίζεται ως $\hat{b} = \dfrac{b - x_o}{h}$. Η αναλυτική ολοκλήρωση της Εξ. (3.9) είναι

$$h\int_0^{\hat{b}} p_n\left(x_0 + \beta h\right)d\beta = h\left[\beta f\left(x_0\right) + \frac{\beta^2}{2}\Delta\, f\left(x_0\right) + \left(\frac{\beta^3}{6} - \frac{\beta^2}{4}\right)\Delta^2 f\left(x_0\right) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\beta^2}{24} - \frac{\beta^3}{6} + \frac{\beta^2}{6}\right)\Delta^3 f\left(x_0\right) + \left(\frac{\beta^5}{120} - \frac{\beta^4}{16} + \frac{11\beta^3}{72} - \frac{\beta^2}{8}\right)\Delta^4 f\left(x_0\right) + \ldots\right]_0^{\hat{b}} \tag{3.19}$$

όπου όλοι οι όροι είναι μηδέν στο κάτω όριο ολοκλήρωσης δηλαδή

$$\int_a^b f\left(x\right)dx \approx h\left[\hat{b}f\left(x_o\right) + \frac{\hat{b}^2}{2}\Delta f\left(x_o\right) + \left(\frac{\hat{b}^3}{6} - \frac{\hat{b}^2}{4}\right)\Delta^2 f\left(x_0\right) + \ldots\ldots\right] \tag{3.11}$$

και το σφάλμα της αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι

$$h\int_0^{\hat{b}} R_n\left(x_0 + \beta h\right)d\beta = h^{n+2}\int_0^{\hat{b}} \left[\beta\left(\beta - 1\right)\left(\beta - 2\right)\ldots\left(\beta - n\right)\frac{f^{(n+1)}\left(\xi\right)}{\left(n+1\right)!}\right]d\beta \tag{3.12}$$

Τα διαστήματα είναι ισαπέχοντα $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \ldots.x_n - x_{n-1} = h$ και όταν το άνω όριο ολοκλήρωσης συμπίπτει με τα σημεία βάσης $b \equiv x_n$, τότε το μετασχηματισμένο άνω όριο ολοκλήρωσης, $\hat{b} = \left(b - x_0\right)/h$, είναι ακέραιος αριθμός και όταν ακόμα $b = x_n$ τότε $\hat{b} = n$. Στην γενική περίπτωση όμως που $b \equiv x_n$ $x_0, \ldots.x_m \ldots.x_n$ το πολυώνυμο προσέγγισης προσδιορίζεται από σημεία που βρίσκονται έξω από το διάστημα ολοκλήρωσης $a \equiv x_0$, $b \equiv x_m$. Όταν $\hat{b} = m$ είναι άρτιος ακέραιος δηλαδή το χωρίο ολοκλήρωσης χωρίζεται σε άρτιο αριθμό διαστημάτων εύρους h τότε ο συντελεστής της κατάντη παραγώγου $\Delta^{n+1} f\left(x_0\right)$ είναι μηδέν. Η παραπάνω παρατήρηση δείχνεται για $\hat{b} = m = 2$.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx h\int_0^2 f(x+\beta h)d\beta$$

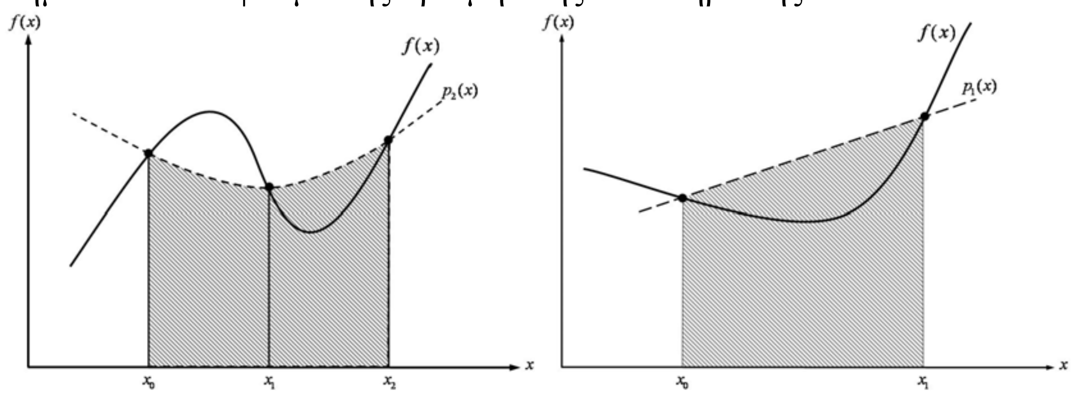
$$= h\Big[2f(x_0) + 2\Delta f(x_0) + \frac{1}{3}\Delta^2 f(x_0) \qquad (3.13)$$

$$+ 0\,\Delta^3 f(x_0) - \frac{1}{90}\Delta^4 f(x_0) + \ldots\ldots\ \Big]$$

όπου ο συντελεστής $\Delta^3 f(x_0) = \Delta^{\hat{b}+1} f(x)$ είναι μηδέν. Αντικαθιστώντας τις τιμές από τους ορισμούς των κατάντη διαφορών βρίσκουμε

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\big[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big] \qquad (3.14)$$

Η παραπάνω σχέση ονομάζεται κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης Simpson και χρησιμοποιείται πολύ συχνά για αριθμητική ολοκλήρωση. Η γραφική αναπαράσταση και η σύγκριση του κανόνα με τον κανόνα αριθμητικής ολοκλήρωσης του τραπεζίου φαίνεται στο Σχ. 3.7. Είναι προφανές ότι η προσέγγιση με ένα πολυώνυμε δεύτερου βαθμού μειώνει σημαντικά το σφάλμα της αριθμητικής ολοκλήρωσης.



Σχήμα 3.7 Σφάλμα αριθμητικής ολοκλήρωσης μα τον κανόνα Simpson και τον κανόνα τραπεζίου.

Το σφάλμα της αριθμητικής ολοκλήρωσης με τον κανόνα Simpson $(n=2)$ είναι πως αναφέρθηκε της ίδιας τάξης με εκείνο για $n=3$ δηλαδή

$$h\int_0^2 R_3(x_0+\beta h)d\beta = h^2\int_0^2 \beta(\beta-1)(\beta-2)(\beta-3)\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}d\beta,\ \ x_o < \xi < x_2 \qquad (3.15)$$

που μπορεί να αποδειχθεί ότι είναι $\dfrac{-h^5 f^{(4)}(\xi)}{90}$ και ο κανόνας αριθμητικής ολοκλήρωσης Simpson γίνεται.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) - \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90} \right], \ x_0 < \xi < x_2 \quad (3.16)$$

Και είναι ακριβής όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι πολυώνυμο τρίτου βαθμού ή μικρότερου.

Οι σχέσεις αριθμητικής ολοκλήρωσης που βρίσκουμε από την Εξ. (3.9) ονομάζονται κανόνες ολοκλήρωσης κλειστού τύπου (close-type Newton–Cotes) και για τιμές του άνω μετασχηματισμένου ορίου ολοκλήρωσης, $\hat{b} = 1,2,...6$, είναι

$\hat{b} = 1$ <u>(κανόνας τραπεζίου)</u>

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1) \right] - \frac{h^3}{12} f''(\xi)$$

$\hat{b} = 2$ <u>($1^{ος}$ κανόνας Simpson)</u>

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

$\hat{b} = 3$ <u>($2^{ος}$ κανόνας Simpson)</u>

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right] - \frac{5h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$$

$\hat{b} = 4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}\left[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4) \right] - $$

$$- \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi)$$

$\hat{b} = 5$

$$\int_{x_0}^{x_5} f(x)dx = \frac{5h}{288}\left[19f(x_0) + 75f(x_1) + 50f(x_2) \right.$$

$$\left. + 50f(x_3) + 75f(x_4) + 19f(x_5) \ \right] \quad - \frac{275h^7}{12096} f^{(6)}(\xi)$$

$\hat{b} = 6$

$$\int_{x_0}^{x_6} f(x)dx = \frac{h}{140}\Big[41f(x_0) + 216f(x_1) + 27f(x_2) +$$
$$+272f(x_3) + 27f(x_4) + 216f(x_5)$$
$$+41f(x_6) - \frac{9h^9}{1400} f^{(8)}(\xi)$$

Οι κανόνες άρτιας τάξης ολοκλήρωσης $\hat{b} = 2k$ είναι ακριβείς για πολυώνυμα βαθμού $\hat{b}+1$ ενώ οι κανόνες ολοκλήρωσης για $\hat{b}$ περιττό $\hat{b} = 2k+1$ είναι ακριβείς για πολυώνυμα βαθμού $\hat{b}$.

3.3 Σύνθετη ολοκλήρωση

Το σφάλμα ολοκλήρωσης είναι δυνατόν να μειωθεί ακόμη και όταν χρησιμοποιούμε χαμηλής τάξης τύπου ολοκλήρωσης όταν υποδιαιρέσουμε το διάστημα ολοκλήρωσης $[a,b]$ σε μικρότερα υποδιαστήματα όπου εφαρμόζουμε αριθμητική ολοκλήρωση. Η διαδοχική εφαρμογή χαμηλότερης τάξης αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι συχνά προτιμότερη από την εφαρμογή υψηλότερης τάξης ολοκλήρωσης λόγω της απλότητας των χαμηλότερης τάξης τύπων αριθμητικής ολοκλήρωσης. Οι σχέσεις που προκύπτουν από την υποδιαίρεση του διαστήματος και διαδοχική εφαρμογή των χαμηλής τάξης τύπων ολοκλήρωσης ονομάζονται σύνθετοι τύποι ολοκλήρωσης.

Ο απλούστερος σύνθετος τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης βρίσκεται από διαδοχική εφαρμογή του κανόνα τραπεζίου. Η διαδοχική εφαρμογή n φορές για κάθε υποδιάστημα με εύρος $h = (b-a)/n$ και σημεία βάσης $x_j = x_0 + jh, \quad j = 0,1,2,....n$ είναι

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx =$$

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

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

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

$$\frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n) \right] + h\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j)$$

$$= \frac{(b-a)}{n}\left[\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} + \sum_{j=1}^{n-1} f\left(a + \frac{b-a}{n} j \right) \right] \tag{3.23}$$

Το σφάλμα στην παραπάνω σχέση σύνθετη ολοκλήρωσης είναι

$$-\frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^{n-1} f''(\xi_j) \qquad x_{j-1} < \xi_j < x_j$$

ή (3.24)

$$-\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi) \qquad a < \xi < b$$

και είναι ανάλογο του $1/n^2$ που σημαίνει ότι όταν διπλασιάζεται ο αριθμός διαστημάτων το σφάλμα αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι περίπου τέσσερις φορές μικρότερο. Το σφάλμα δεν μειώνεται ακριβώς ως $1/n^2$ διότι η τιμή της δεύτερης παραγώγου $f''(\xi)$ διαφέρει για διαφορετικές τιμές διαστημάτων.

Υποθέτουμε ότι η σύνθετη ολοκλήρωση της Εξ. (3.23) εφαρμόζεται για δυο διαφορετικές τιμές n_1 και n_2. Τότε η ακριβής τιμή του ολοκληρώματος I^* είναι

$$I^* = I_{n_1} + E_{n_1} = I_{n_2} + E_{n_2} \tag{3.25}$$

Το σφάλμα δίνεται από την Εξ. (3.24) συνεπώς

$$\frac{E_{n_2}}{E_{n_1}} = \frac{-\dfrac{(b-a)^3}{12n_2^2} f''(\xi_2)}{-\dfrac{(b-a)^3}{12n_1^2} f''(\xi_1)}, \qquad \xi_1, \xi_2 \in (a,b) \tag{3.26}$$

Υποθέτοντας ότι οι τιμές της δεύτερης παραγώγου είναι περίπου ίσες βρίσκουμε

$$\mathrm{E}_{n_2} = \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2 E_{n_1} \tag{3.27}$$

και με αντικατάσταση στην Εξ. (3.25) βρίσκουμε

$$I^* = I_{n_1} + \frac{I_{n_2} - I_{n_1}}{1 - \left(\dfrac{n_1}{n_2}\right)^2} \tag{3.28}$$

όταν $n_2 = 2n_1$ η παραπάνω σχέση γίνεται

$$I^* = \frac{4}{3} I_{n_2} - \frac{1}{3} I_{n_1} \tag{3.29}$$

Η διαδικασία προσέγγισης ενός ολοκληρώματος με δυο διαφορετικούς διαμερισμούς για να καταστεί δυνατή η εύρεση μιας τρίτης πιθανώς καλύτερης προσέγγισης ονομάζεται Richardson extrapolation. Με διαδοχική εφαρμογή της Εξ. (3.29) για διαμερισμούς $n_2 = 2n_1$ και $n_3 = 2n_2$ βρίσκουμε

$$I_{n_3} = \frac{1}{4}\left(5I_{n_2} - I_{n_1}\right) \tag{3.30}$$

ή απ' ευθείας εκτιμούμε ότι η βελτιωμένη πρόβλεψη είναι $I = \frac{1}{3}\left(4I_{n_2} - I_{n_1}\right)$. Δηλαδή όταν υπολογίσουμε δυο προσεγγίσεις του ολοκληρώματος I_{n_1} *και* I_{n_2} με τον κανόνα τραπεζίου με διαμερισμούς

n_1 $\kappa\alpha\iota$ n_2 $\left(n_2 = 2n_1\right)$ μπορούμε να βρούμε μια καλύτερη προσέγγιση I_{n_3} που αντιστοιχεί σε αριθμό διαστημάτων $n_3 = 2n_2$.

Η διαδικασία σύνθετης ολοκλήρωσης μπορεί να εφαρμοσθεί και για τον κανόνα ολοκλήρωσης Simpson. Η εφαρμογή του κανόνα Simpson n φορές απαιτεί $2n+1$ σημεία βάσης $x_0, x_1, ...x_{2n}$, δηλαδή

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_{2n}} f(x)dx = \frac{h}{3}\Big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) \\
+2f(x_4) + ... + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n}) \ \Big] \\
= \frac{(b-a)}{6n}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f\left(a + \frac{b-a}{n}j\right) + 4\sum_{j=1}^{2n-1,2} f\left(a + \frac{b-a}{2n}j\right)\right] \\
= -\frac{(b-a)^5}{1880n^4} f^4(\xi) \qquad a < \xi < b
\end{aligned}
$$

(3.31)

Με εφαρμογή της διαδικασίας Richardson όπως και προηγουμένων βρίσκουμε

$$
I^* = I_{n_1} + \frac{I_{n_2} - I_{n_1}}{1 - \left(\dfrac{n_1}{n_2}\right)^4} \tag{3.32}
$$

όταν $n_2 = 2n_1$ η παραπάνω σχέση γίνεται

$$
I^* = \frac{16}{15} I_{n_e} - \frac{1}{15} I_{n_1} \tag{3.32}
$$

Σύνθετοι κανόνες ολοκλήρωσης όπως αυτούς που αναπτύξαμε αναλυτικά για τον κανόνα τραπεζίου και Simpson μπορεί να βρεθούν και για ανώτερης τάξης κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης. Η εύρεση της αναλυτικής μορφής δεν είναι αναγκαία διότι η εφαρμογή σύνθετων κανόνων ολοκλήρωσης είναι πολύ εύκολη στον προγραμματισμό της στον ηλεκτρονικό υπολογιστή

3.4 Αριθμητική ολοκλήρωση με μη ισοκατανεμημένα διαστήματα

Οι κανόνες ολοκλήρωσης που αναπτύξαμε στα προηγούμενα κεφάλαια έχουν την μορφή

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j) \tag{3.33}$$

όπου οι τιμές των συντελεστών w_j είναι τα σχετικά βάρη των αντίστοιχων $n+1$ διακριτών τιμών της συνάρτησης $f(x_j)$ σε $n+1$ ισαπέχοντα διαστήματα .

Υποθέτοντας ότι οι θέσεις των σημείων βάσης $x_j,\ j=0,1,....,n$ δεν είναι καθορισμένη τότε υπάρχουν $2(n+1)$ απροσδιόριστες παράμετροι, οι συντελεστές ή βάρη w_j και η θέση των σημείων ολοκλήρωσης x_j. Από την θεωρία προσέγγισης του προηγούμενου κεφαλαίου γνωρίζουμε ότι $2n+2$ παράμετροι προσδιορίζουν ένα πολυώνυμο $2n+1$ βαθμού. Η βασική ιδέα της ολοκλήρωσης Gauss βασίζεται στην παραπάνω παρατήρηση και χρησιμοποιεί $n+1$ μη ομοιόμορφα κατανεμημένα σημεία μαζί με $n+1$ κατάλληλα εκλεγμένα βάρη w_j για να υπολογίσει ακριβώς την τιμή του ολοκληρώματος μιας συνάρτησης $f(x)$ που είναι ένα πολυώνυμο βαθμού $2n+1$ ή μικρότερου. Η ανάπτυξη της θεωρίας της ολοκλήρωσης Gauss απαιτεί την χρήση των ορθογωνίων πολυωνύμων. Το απαραίτητο υπόβαθρο της θεωρίας ορθογωνίων πολυωνύμων αναπτύσσεται σύντομα στο παρακάτω κεφάλαιο και συνοψίζεται στο Παράρτημα Α.

3.4.1 Ορθογώνια Πολυώνυμα

Τα ορθογώνια πολυώνυμα ή γενικότερα οι ορθογώνιες συναρτήσεις. βάσης έχουν πολλές εφαρμογές σε αριθμητικές και σε αναλυτικές μεθόδους. Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε το απαραίτητο υπόβαθρο της θεωρίας των ορθογωνίων συναρτήσεων που κατόπιν θα χρησιμοποιήσουμε για να βρούμε κανόνες αριθμητικής ολοκλήρωσης για μη ισαπέχοντα σημεία βάσης. Τα ορθογώνια πολυώνυμα χρησιμοποιούνται επίσης και για να βελτιωθεί η παρεμβολή ελάχιστων τετραγώνων καθώς και σε άλλες περιοχές της αριθμητικής ανάλυσης.

Carl Gustav Jacob Jacobi (1804 - 1851) είναι Πρώσος μαθηματικός που θεωρείται ένας από τους καλύτερους δασκάλους της εποχής του που ενέπνευσε πολλούς μαθηματικούς και ένας από τους πιο σπουδαίους μαθηματικούς όλων των εποχών. Σπούδασε στο Πανεπιστήμιο του Βερολίνου από όπου και έλαβε το διδακτορικό του το 1825 το οποίο διαπραγματευόταν την θεωρία συναρτήσεων. Το 1829 έγινε καθηγητής στο Πανεπιστήμιο του Königsberg όπου και παρέμεινε μέχρι το 1848 που έχασε την θέση του λόγω τηε εμπλοκής του στην επανάσταση του 1848.

Στα προηγούμενα κεφάλαια τα πολυώνυμα Chebyshev $T_k(x)$ που είναι ουσιαστικά πολυώνυμα βαθμού k που εκ κατασκευής έχουν ιδιαίτερα χαρακτηριστικά. Τα πολυώνυμα Chebyshev όπως και τα πολυώνυμα Legendre είναι ιδικές περιπτώσεις της πιο γενικής οικογένειας πολυωνύμων Jacobi που παρουσιάζονται στο Παράρτημα Α. Θα δείξουμε παρακάτω τα πολυώνυμα Chedyshev είναι ορθογώνιες συναρτήσεις. Γενικεύοντας, θεωρούμε δυο συναρτήσεις $g_m(x)$ και $g_n(x)$ που ανήκουν σε μια οικογένεια συναρτήσεων. Οι συναρτήσεις αυτές είναι ορθογώνιες στο διάστημα $[a,b]$ όταν

$$\int_a^b w(x) g_n(x) g_m(x) dx \begin{cases} 0 & n \neq m \\ c(n) & n = m \end{cases} \tag{3.34}$$

όπου $w(x)$ είναι μια συνάρτηση βάρους, που μπορεί να είναι μια σταθερά και $c(n)$ είναι μια σταθερά που γενικά μπορεί να εξαρτάται από την τάξη n της συνάρτησης. Ορθογώνιες συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται ευρέως είναι οι τριγωνομετρικές συναρτήσεις $\sin(nx)$ και $\cos(n\,x)$ που αποτελούν τις συναρτήσεις βάσης των σειρών Fourier. Οι συναρτήσεις βάσης $1, x, x^2 ....x^n$ που χρησιμοποιήσαμε στις πολυωνυμικές παρεμβολές και συχνά ακόμη και στα πεπερασμένα στοιχεία δεν είναι όμως ορθογώνιες.

Η ορθογωνιότητα μπορεί να θεωρηθεί ως μια γενίκευση της καθετότητας διανυσμάτων σε πολυδιάστατους χώρους. Στο κεφάλαιο αυτό θα επικεντρωθούμε στην παρουσίαση μόνο ορισμένων ορθογωνίων πολυωνυμικών συναρτήσεων όπως Legendre, Laguerre, Chebyshev και

Hermite πολυωνύμων τις οποίες κατόπιν θα χρησιμοποιήσουμε για βρούμε κανόνες αριθμητική ολοκλήρωσης που υπερτερούν σε ακρίβεια από τους κανόνες Newton–Cotes που βρήκαμε προηγουμένως.

3.4.2 Πολυώνυμα Legendre $P_n(x)$

Τα πολυώνυμα Legendre είναι ορθογώνια στο διάστημα $[-1,1]$ ως προς σταθερή συνάρτηση βάρους $w(x)=1$

Adrien-Marie Legendre (1752–1833) είναι μαθηματικός με σημαντική συνεισφορά στην θεωρία αριθμών, την άλγεβρα, την μαθηματική ανάλυση και την στατιστική. Ο Legendre σπούδασε φυσική και αρχικά δίδαξε από ενδιαφέρον και χωρίς να το θεωρεί βιοποριστικό επάγγελμα στην στρατιωτική ακαδημία όπου και ασχολήθηκε με βαλλιστική. Αργότερα ασχολήθηκε μόνο με τα μαθηματικά. Η δουλεία του για τις ρίζες των πολυωνύμων ενέπνευσε ένα άλλο σπουδαίο Γάλλο μαθηματικό τον Évariste Galois (1811 – 1832). Η πιο σημαντική συνεισφορά του Legendre θεωρείται η ανάπτυξη της μεθόδου των ελαχίστων τετράγωνων που ακόμα και σήμερα έχει πλήθος εφαρμογών.

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx\begin{cases} 0 & m \neq n \\ c(n) & m = n \end{cases} \tag{3.35}$$

Τα πολυώνυμα Legendre προκύπτουν με διαδοχική εφαρμογή της επαναληπτικής σχέσης

$$P_n(x)=\frac{(2n-1)x}{n}P_{n-1}(x)-\frac{n-1}{n}P_{n-2}(x) \tag{3.36}$$

όπου $P_0(x)=1$ και $P_1(x)=x$

Τα πρώτα πέντε πολυώνυμα της οικογένειας Legendre είναι

$$P_0(x)=1$$

$$P_1(x)=x$$

$$P_2(x)=\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right)$$

$$P_3(x)=\frac{1}{2}\left(5x^3-3x\right)$$

$$P_4(x)=\frac{1}{8}\left(35x^4-30x^2+3\right) \qquad (3.37)$$

3.4.3 Πολυώνυμα Laguerree $L_n(x)$

Τα πολυώνυμα Laguerre είναι ορθογώνια στο διάστημα $\left[0,\infty\right]$ ως προς συνάρτηση βάρους $w(x)=e^{-x}$

$$\int_0^\infty e^{-x}L_n(x)L_m(x)dx=\begin{cases}0 & n\neq m\\ c(n) & n=m\end{cases} \qquad (3.38)$$

Τα πολυώνυμα Laguerre προκύπτουν από την επαναληπτική σχέση

$$L_n(x)=(2n-x-1)L_{n-1}(-x)-(n-1)^2L_{n-2}(x) \qquad (3.39)$$

όπου $L_0(x)=1$ και $L_1(x)=1-x$. Μερικά από τα αρχικά πολυώνυμα της οικογένειας Laguerre είναι

$$\begin{aligned}L_0(x)&=1\\ L_1(x)&=-x+1\\ L_2(x)&=x^2-4x+2\\ L_3(x)&=-x^3+9x^2-18x+6\end{aligned} \qquad (3.40)$$

3.4.4 Πολυώνυμα Chebyshev $T_n(x)$

Τα πολυώνυμα Chebyshev που αναφέρθηκαν και σε προηγούμενο κεφάλαιο είναι ορθογώνια στο διάστημα $[-1,1]$ ως προς συνάρτηση βάρους $w(x)=1/\sqrt{1-x^2}$

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_m(x) dx = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ c(n) & n = m \end{cases} \tag{3.41}$$

Τα πολυώνυμα Chebyshev προκύπτουν από την επαναληπτική σχέση

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \tag{3.42}$$

όπου $T_0(x)=1 \quad \kappa\alpha\iota \quad T_1(x)=x$. Μερικά από τα πρώτα πολυώνυμα της οικογένειας Chebyshev είναι

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \end{aligned} \tag{3.43}$$

3.4.5 Τα Πολυώνυμα Hermite $H_n(x)$

Τα πολυώνυμα Hermite είναι ορθογώνια στο διάστημα $(-\infty,\infty)$ ως προς την συνάρτηση βάρους $w(x)=e^{-x_2}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ c(n) & n = m \end{cases} \tag{3.44}$$

Τα πολυώνυμα Hermite προκύπτουν από την επαναληπτική σχέση

$$H_n(x) = 2xH_{n-1}(x) - 2_{(n-1)} H_{(n-2)}(x) \tag{3.45}$$

όπου $H_0(x)=1$ και $H_1(x)=2x$. Μερικά από τα πρώτα πολυώνυμα της οικογένειας Hermite είναι

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \end{aligned} \tag{3.46}$$

3.4.6 Ιδιότητες των ορθογωνίων πολυωνύμων

Οι οικογένειες ορθογωνίων πολυωνύμων $p_n(x), L_n(x), T_n(x)$ και $H_n(x)$, που αναφέραμε παραπάνω και πολλές άλλες (δες Παράρτημα Α) είναι πολυώνυμα n βαθμού ως προς x με πραγματικούς συντελεστές και n ρίζες στο διάστημα ορισμούς τους. Οι ρίζες των ορθογωνίων πολυωνύμων είναι ξεχωριστές δηλαδή δεν υπάρχουν πολλαπλές ρίζες. Παραδείγματος χάριν όλες οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre n βαθμού βρίσκονται στο ανοικτό διάστημα $(-1,1)$.

Τα ορθογώνια πολυώνυμα είναι γραμμικοί σύνδεσμοι των μονονύμων $x^n, n=0,1....N$ συνεπώς οποιοδήποτε πολυώνυμο $n^{ου}$ βαθμού $p_n(x)=\sum_{j=0}^{n} \alpha_j\, x^j$ μπορεί να αναπαρασταθεί ως γραμμικός συνδυασμός ορθογωνίων πολυωνύμων, δηλαδή

$$p_n(x)=\beta_0 p_0(x)+\beta_1 p_1(x)+.........+\beta_n p_n(x)=\sum_{j=0}^{n} \beta_j p_j(n) \qquad (3.47)$$

Παράδειγμα
Το πολυώνυμο τέταρτου βαθμού $p_4(x)$ εκπεφρασμένο με πολυώνυμα Legendre είναι

$$p_4(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3+a_4x^4=\beta_0+\beta_1x+\beta_2\left[\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right)\right]$$
$$+\beta_3\left[\frac{1}{2}\left(5x^3-3x\right)\right]+\beta_4\left[\frac{1}{8}\left(35x^4-30x^2+3\right)\right]$$

συνεπώς

$$\beta_4=8/35\, a_4,\quad \beta_3=2/5 a_3,\quad \beta_2=2/3\left(\alpha_2+6/7\,\alpha_4\right)$$
$$\beta_1=a_1+3/5\, a_3,\quad \beta_0=a_0+1/3\, a_2+1/5\, a_4$$

οπότε το πολυώνυμο $p_4(x)=x^4+3x^3-2x^2+2x-1$ είναι ισοδύναμο με τον παρακάτω γραμμικό συνδυασμό πολυωνύμων Legendre

$$p_4(x)=-\frac{25}{15}P_0(x)+\frac{19}{15}P_1(x)-\frac{16}{21}P_2(x)+\frac{6}{5}P_3(x)+\frac{8}{35}P_4(x)$$

3.5 Gaussian Quadrature

Johann Carl Friedrich Gauss (1777 –1855) είναι μαθηματικός και επιστήμονας που είχε μεγάλη συμβολή στην θεωρία αριθμών, την στατιστική, μαθηματική ανάλυση, διαφορική γεωμετρία, αλλά και στην οπτική, την θεωρία του ήλεκτρο–μαγνητικού πεδίου, και την αστρονομία. Θεωρείται ένας από τους μαθηματικούς που επηρέασαν σημαντικά την πορεία και εξέλιξη της μαθηματικής σκέψης και ιδρυτής της σχολής των μαθηματικών του Πανεπιστημίου του Göttingen που μετέπειτα ανέδειξε πολλούς από τους πιο σημαντικούς μαθηματικούς του 20^{ου} αιώνα. Ο Gauss απέδειξε το θεμελιώδες θεώρημα της άλγεβρας που εγγυάται ότι ένα μιγαδικό πολυώνυμο μίας μεταβλητής έχει τουλάχιστο μία ρίζα.

Η προσέγγιση της τιμής του ολοκληρώματος $\int_a^b f(x)dx$ βρίσκεται όταν προσεγγίσουμε την συνάρτηση $f(x)$ με ένα πολυώνυμο παρεμβολής $n^{ου}$ βαθμού το οποίο μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά και κατόπιν να προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα ως

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx \tag{3.48}$$

όπου $R_n(x)$ είναι το σφάλμα προσέγγισης της συνάρτησης $f(x)$ με ένα πολυώνυμο $p_n(x)$ βαθμού n.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο βρήκαμε ότι τα πολυώνυμα Lagrange παρεμβάλουν μια συνάρτηση που ορίζεται σε μη–ισοκατανεμημένα διαστήματα διαστήματα δηλαδή αυθαίρετα εκλεγμένα σημεία x_j. Η παρεμβολή με πολυώνυμα Lagrange έχει την μορφή

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j) + \left[\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\right] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \tag{3.49}$$

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k}\right) \qquad a < \xi < b$$

Έστω ότι το διάστημα ολοκλήρωσης είναι $\left[-1,1\right]$. Η υπόθεση αυτή δεν επηρεάζει την γενικότητα της παρουσίασης διότι όπως είναι γνωστό το διάστημα $\left[a.b\right]$ μπορεί να μετασχηματιστεί στο διάστημα $\left[-1,1\right]$. Δηλαδή, ορίζοντας μια νέα μεταβλητή z έχουμε μια μετασχηματισμένη συνάρτηση με πεδίο ορισμού $\left[-1,1\right]$.

$$z=\frac{2x-\left(a+b\right)}{b-a},\qquad F\left(z\right)=f\left(\frac{\left(b-a\right)z+\left(a+b\right)}{2}\right)$$

Έστω ότι η συνάρτηση $f\left(x\right)$ είναι μια πολυωνυμική συνάρτηση βαθμού $2n+1$. Τότε ο όρος $f^{\left(n+1\right)}\left(\xi\right)/\left(n+1\right)!$ πρέπει να είναι πολυώνυμο βαθμού n το μέγιστο επειδή το ανάπτυγμα $\sum\limits_{j=0}^{n} l_j\left(x\right)f\left(x_j\right)$ είναι πολυώνυμο βαθμού n το μέγιστο. Επίσης, ο όρος του σφάλματος $\prod\limits_{j=0}^{n}\left(x-x_j\right)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $n+1$.

Έστω ότι :

$$\frac{f^{\left(n+1\right)}\left(\xi\right)}{\left(n+1\right)!}=q_n\left(\xi\right) \tag{3.50}$$

όπου $q_n\left(\xi\right)$ είναι ένα πολυώνυμο n βαθμού. Η αρχική συνάρτηση είναι

$$f(x)=\sum_{j=0}^{n} l_j\left(x\right)f\left(x_j\right)+\left[\prod_{j=0}^{n}\left(x-x_j\right)\right]q_n\left(x\right) \tag{3.51}$$

Το ολοκλήρωμα της συνάρτησης στο διάστημα $\left[-1,1\right]$ είναι

$$\int_{-1}^{1} f\left(x\right)dx=\int_{-1}^{1}\sum_{j=0}^{n} l_i\left(x\right)f\left(x_j\right)dx+\int_{-1}^{1}\left[\prod_{j=0}^{n}\left(x-x_j\right)\right]q_n\left(x\right)dx \tag{3.52}$$

Τότε η προσέγγιση του ολοκληρώματος είναι

$$\int_{-1}^{1} f\left(x\right)dx\simeq\sum_{j=0}^{n} f\left(x_j\right)\int_{-1}^{1} l_j\left(x\right)dx=\sum_{j=0}^{n} w_j\left(x\right)f\left(x_j\right) \tag{3.53}$$

Στην παραπάνω σχέση σειρά ολοκλήρωσης και άθροισης εναλλάσσονται διότι οι τιμές $f(x_j)$ είναι σταθερές και τα βάρη άθροισης $w_j(x)$ ορίζονται ως

$$w_j(x) = \int_{-1}^{1} l_j(x)dx = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{k=0 \\ j \neq k}}^{n} \left[\frac{x - x_k}{x_j - x_k} \right] dx \tag{3.54}$$

Ο κανόνας ολοκλήρωσης της Εξ. (3.53) έχει όμως την ίδια μορφή με τους κανόνες ολοκλήρωσης που παρουσιάστηκαν και προηγουμένως, δηλαδή είναι της μορφής $\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j)$, ενώ το σφάλμα στην Εξ. (3.52) είναι

$$\int_{-1}^{1} \left[\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right] q_n(x) dx \tag{3.55}$$

Η εκλογή των σημείων βάσης της ολοκλήρωσης x_j μπορεί λοιπόν να γίνει με τέτοιο τρόπο ώστε το σφάλμα ολοκλήρωσης να μηδενίζεται όταν η συνάρτηση $f(x)$ είναι πολυώνυμο. Η κατάλληλη εκλογή των σημείων βάσης x_j διευκολύνεται με την χρήση των ορθογωνίων πολυωνύμων όπως θα δείξουμε παρακάτω.

3.5.1 Gauss-Legendre Quadrature

Έστω ότι το πολυώνυμο $q_n(x)$ και $\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$ του σφάλματος γράφονται υπό μορφή αναπτύγματος πολυωνύμων Legendre.

$$\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = b_o P_o(x) + b_1 P_1(x) + ... + b_n P_n(x) + b_{n+1} P_{n+1}(x)$$
$$= \sum_{j=0}^{n+1} b_j P_j(x) \tag{3.56}$$

$$q_n(x) = c_o P_0(x) + c_1 P_1(x) + ... + c_n P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j P_j(x) \qquad (3.57)$$

τότε το σφάλμα πολυωνυμικής προσέγγισης είναι

$$q_n(x) \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = \sum_{j=0}^{n} \sum_{k=0}^{n} b_j c_k P_j(x) P_k(x) + b_{n+1} \sum_{j=0}^{n} c_j p_j(x) P_{n+1}(x)$$
$$(3.58)$$

μετά από ολοκλήρωση στο διάστημα $[-1,1]$ όλοι οι όροι της μορφής $\int_{-1}^{1} P_j(x) P_k(x) dx$ για $j \neq k$ μηδενίζονται και το σφάλμα ολοκλήρωσης είναι

$$\int_{-1}^{1} q_n(x) \left[\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right] dx = \int_{-1}^{1} \left\{ \sum_{j=0}^{n} b_j c_j \left[P_j(\overline{x}) \right]^2 \right\} dx \qquad (3.59)$$

Το σφάλμα αριθμητικής ολοκλήρωσης που δίνεται από την Εξ. (3.59) μηδενίζεται όταν οι πρώτοι $n+1$ συντελεστές b_j, $j = 0,1,....n$ είναι μηδέν, δηλαδή (δες Εξ. 3.56)

$$\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = b_{n+1} P_{n+1}(x) \qquad (3.60)$$

Έστω ότι $n = 3$, τότε ο συντελεστής του όρου ανώτερης τάξης του πολυωνύμου Legendre $P_4(x)$ (δες Εξ. (3.37) είναι 35/8. Αλλά ο συντελεστής του όρου ανώτερης τάξης x^{n+1} στο γινόμενο $\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$ είναι μονάδα. Συνεπώς όταν $n = 3$ $b_4 = 8/35$ και με ανάλογο σκεπτικό προκύπτει ότι b_{n+1} είναι το αντίστροφο του συντελεστή του όρου ανώτερης τάξης στο $P_{n+1}(1)$ πολυώνυμο Legentre.

Επί πλέον το πολυώνυμο $\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$ είναι ήδη σε μορφή γινομένου, δηλαδή έχει $n+1$ ρίζες x_j, $j = 0,1,......n$, οι οποίες (δες Εξ. (3.60) είναι ταυτοχρόνως και οι ρίζες του πολυωνύμου $P_{n+1}(x)$. Δηλαδή τα $n+1$ σημεία βάσης τα οποία πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για να μηδενίζεται το σφάλμα όταν η συνάρτηση $f\left(x\right)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $2n+1$, είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre $P_{n+1}\left(x\right)$. Τα βάρη w_j των πολυωνύμων Legendre, δίνονται από την σχέση

$$w_j = -\frac{2}{(n+1)P_{n+1}(x_j)P'(x_j)} = \frac{2}{nP_{n-1}(x_j)P'(x_j)} \tag{3.61}$$

Δεδομένων των σημείων x_j τα βάρη ολοκλήρωσης υπολογίζονται με αναλυτική ολοκλήρωση από την Εξ. (3.54) . Οι τιμές των ριζών και αντίστοιχων βαρών ολοκλήρωσης μπορεί να πινακοποιηθούν. Ο πίνακας ριζών x_j και βαρών w_j για $n=1,2,3,4$ προτίθενται στον Πίνακα 3.1.

Πίνακας 3.1. Ρίζες των πολυωνύμων Legendre και βάρη για ολοκλήρωση $\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$

N	x_j	w_j	x_j	w_j
1	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{3}$	1	±0.57735 02691	1
2	0	$\frac{8}{9}$	0	0.88888 88888
	$\pm\frac{1}{5}\sqrt{15}$	$\frac{5}{9}$	±0.77495 66692	0.55555 55555
3	$\pm\frac{1}{35}\sqrt{525-70\sqrt{30}}$	$\frac{1}{36}\left(18+\sqrt{30}\right)$	±0.33998 10435	0.65214 51548
	$\pm\frac{1}{35}\sqrt{525+70\sqrt{30}}$	$\frac{1}{36}\left(18-\sqrt{30}\right)$	±0.86113 63115	0.34785 48451
4	0	$\frac{128}{255}$	0	0.56888 88888
	$\pm\frac{1}{21}\sqrt{245-14\sqrt{70}}$	$\frac{1}{900}\left(322+13\sqrt{70}\right)$	±0.53486 93101	0.47862 86704
	$\pm\frac{1}{21}\sqrt{245+14\sqrt{70}}$	$\frac{1}{900}\left(322-13\sqrt{70}\right)$	±0.90617 98459	0.23692 68850

Τα πολυώνυμα Legendre είναι ιδιοσυναρτήσεις της εξίσωσης $\left[\left(1-x^2\right)L_k'(x)\right]' + k(k+1)L_k(x) = 0$ (singular Sturm-Liouville problem). Τα πολυώνυμα Legendre συνήθως κοινονικοποιούνται έτσι ώστε $L_k(1)=1 \ \forall k$ οπότε δίνονται από

$$L_k(x) = \frac{1}{2^k}\sum_{m=0}^{[k/2]}(-1)^m \binom{k}{m}\binom{2k-2m}{k}x^{k-2m}$$

Παράδειγμα

Έστω ότι η συνάρτηση $f(x)$ ορίζεται σε τρία σημεία δηλαδή, $n=2$. Τότε η εφαρμογή του κανόνα ολοκλήρωσης που χρησιμοποιεί σαν σημεία βάσης τις ρίζες του πολυωνύμου Legendre $P_2(x)$ δίνεται από

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \simeq 0.55555f(-0.77459) + 0.88888f(0) + 0.55555f(0.77459)$$

και ολοκληρώνει ακριβώς πολυώνυμο πέμπτου βαθμού μόνο με τρία σημεία βάσης ενώ ο κανόνας ολοκλήρωσης με ισαπέχοντα σημεία βάσης απαιτεί 6 σημεία

3.5.2. Gauss-Lagurre Quadrature

Κανόνες ολοκλήρωσης που μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την προσέγγιση ολοκληρωμάτων της μορφής

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{n} w_j F(x_j) \tag{3.62}$$

Βρίσκονται με την βοήθεια των πολυωνύμων Laguerre. Η διαδικασία εκλογής των βαρών w_j και σημείων βάσης x_j στην Εξ. (3.62) είναι ανάλογη της διαδικασίας που ακολουθήσαμε προηγουμένως με τον κανόνα ολοκλήρωσης με τα πολυώνυμα Legendre.

Το πολυώνυμο παρεμβολής όπως και προηγουμένως είναι

$$\begin{gathered} f(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j) + \left[\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\right] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \\ l_j = \prod_{\substack{k=0 \\ j \neq k}}^{n} \left[\frac{x - x_k}{x_j - x_k}\right] \qquad 0 < \xi < \infty \end{gathered} \tag{3.63}$$

Υποθέτοντας και πάλι ότι η συνάρτηση $f(x)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $2n+1$ τότε $f^{n+1}(\xi)$ είναι πολυώνυμο βαθμού n, δηλαδή

$$\begin{gathered} f(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j) + \left[\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\right] q_n(x) \\ q_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} \end{gathered} \tag{3.63}$$

τότε

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)\,dx = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_0^{\infty} e^{-x} l_i(x)\,dx$$

$$+\int_0^{\infty} \left\{ e^{-x} \left[\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right] q_n(x) \right\} dx \tag{3.64}$$

Εκφράζοντας το γινόμενο $\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$ και το πολυώνυμο $q(x)$ σαν σειρά πολυωνύμων Laguerre και ακολουθώντας το ίδιο σκεπτικό όπως και προηγουμένως καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι : Τα σημεία βάσης είναι οι ρίζες των πολυωνύμων Laguerre και τα βάρη ολοκλήρωσης υπολογίζονται από την σχέση

$$w_j = \int_0^{\infty} e^{-x} j_j(x)\,dx = \int_0^{\infty} e^{-x} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \left[\frac{x - x_k}{x_j - x_k} \right] dx \tag{3.65}$$

Τα σημεία βάσης και τα αντίστοιχα βάρη για τον κανόνα ολοκλήρωσης της Εξ. (3.62) δίνονται στον Πίνακα 3.2.

Πίνακας 3.2 Ρίζες των πολυωνύμων Laguerre και βάρη για την ολοκλήρωση $\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)\,dx = \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j)$

Τύπος ολοκλήρωσης		Ρίζες, x_j	Συντελεστές, w_j
Δύο σημείων	*n=1*	0.585786437	0.85355 33905
		3.414213562	0.14644 66094
Τριών σημείων	*n=2*	0.415774556	0.71109 30099
		2.294280360	0.27851 77335
		6.289945082	0.01038 95650
Τεσσάρων σημείων	*n=3*	0.322547689	0.60315 41043
		1.745761101	0.35741 86924
		4.536620296	0.03888 79085
		9.395070912	0.00053 92947

Παράδειγμα

Αριθμητικός υπολογισμός της τιμής του ολοκληρώματος

$$\int_{1}^{\infty} e^{-x} x^2 dx = 5/e$$

Η αριθμητική ολοκλήρωση απαιτεί εφαρμογή του μετασχηματισμού $x = z + 1$ και χρήση των τιμών του Πίνακα 3.2.

$$\int_{1}^{\infty} e^{-x} x^2 dx = e^{-1} \int_{0}^{\infty} e^{-z} \left(z+1\right)^2 dz = e^{-1} \left[\sum_{j=0}^{1} w_j \left(z_j + 1\right)^2 \right] = 5/e$$

που συμφωνεί με την αναλυτική τιμή επειδή το πολυώνυμο x^2 είναι δεύτερου βαθμού και ο κανόνας ολοκλήρωσης $n = 1$ είναι ακριβής για πολυώνυμο τρίτου βαθμού.

3.5.3 Κανόνας ολοκλήρωσης Gauss–Chebyshev

Η διαδικασία που ακολουθήσαμε για την ανάπτυξη των κανόνων ολοκλήρωσης Gauss–Legendre και Gauss–Laguerre μπορεί να επαναληφθεί για να αναπτύξουμε τον κανόνα ολοκλήρωσης Gauss–Chebyshev που είναι της μορφής

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f\left(x\right) dx = \sum_{j=0}^{n} w_j f\left(x_j\right) \tag{3.66}$$

Ο κανόνας ολοκλήρωσης Gauss–Chebyshev είναι ακριβής όταν η συνάρτηση $f\left(x\right)$ είναι πολυώνυμο βαθμού $2n+1$ ή μικρότερου. Τα σημεία βάσης είναι οι ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev

$$z_j = \cos \frac{\left(2j+1\right)\pi}{\left(2n+2\right)}, \quad j = 0,1,....n \tag{3.67}$$

Τα βάρη ολοκλήρωσης έχουν αναλυτική έκφραση $w_j = \dfrac{\pi}{n+1}$ δηλαδή ο κανόνας ολοκλήρωσης Gauss–Chebyshev έχει την μορφή

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f\left(x\right) dx \simeq \frac{\pi}{n+1} \sum_{j=0}^{n} f\left(x_j\right) \tag{3.68}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι ολοκληρώματα της μορφής

$$\int_{0}^{b} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f\left(x\right) dx \qquad ή \qquad \int_{a}^{b} f\left(x\right) dx$$

Μπορεί να μετασχηματισθούν σε ολοκληρώματα της μορφής $\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx$ δεδομένου ότι τα όρια ολοκλήρωσης a, b είναι πεπερασμένα.

3.5.4 Κανόνας ολοκλήρωσης Gauss – Hermite

Ο κανόνας ολοκλήρωσης Gauss–Hermite χρησιμοποιείται για την αριθμητική ολοκλήρωση της μορφής

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j) \tag{3.69}$$

Τα σημεία βάσης ολοκλήρωσης είναι οι ρίζες του $n+1$ βαθμού πολυωνύμου Hermite. Τα βάρη αριθμητικής ολοκλήρωσης και οι ρίζες των πολυωνύμων Hermite για $n=1, 2, 3, 4$ δίνονται στον Πίνακα 3.3

Πίνακας 3.3 Ρίζες των πολυωνύμων Hermite και βάρη για την ολοκλήρωση $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) \simeq \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j)$

Ρίζες (x_j)		Βάρη ολοκλήρωσης w_j
	Κανόνας ολοκλήρωσης δύο σημείων $n=1$	
±0.70710 67811		0.88622 69255
	Κανόνας ολοκλήρωσης τριών σημείων $n=2$	
±1.22474 48714		0.29450 89752
0.00000 00000		1.18163 59006
	Κανόνας ολοκλήρωσης τεσσάρων σημείων $n=3$	
±1.65068 01239		0.08131 28354
±0.52464 76233		0.80491 40900
	Κανόνας ολοκλήρωσης πέντε σημείων $n=4$	
±2.02018 28705		0.01995 32421
±0.95857 24464		0.39361 93232
0.00000 00000		0.94530 87205

Η αριθμητική ολοκλήρωση πολλών συναρτήσεων επιτυγχάνεται με κατάλληλο μετασχηματισμό και την χρήση των κανόνων ολοκλήρωσης που αναπτύξαμε παραπάνω. Οι μετασχηματισμοί αυτοί έχουν την μορφή

$$\int_0^b f(x)dx = \int_a^b w(x)\left(\frac{f(x)}{w(x)}\right)dx = \int_a^b w(x)g(x)dx \qquad (3.70)$$

Επί πλέον οι κανόνες ολοκλήρωσης Gauss μπορεί να χρησιμοποιηθούν διαδοχικά χωρίζοντας το διάστημα ολοκλήρωσης σε υποδιαστήματα για να αυξήσουμε την ακρίβεια των υπολογισμών. Η όλη διαδικασία σύνθετης ολοκλήρωσης πρέπει όμως να προγραμματισθεί διότι η παραγωγή εξισώσεων σύνθετης ολοκλήρωσης είναι πολύ δύσκολη και δεν μειώνει ουσιαστικά το υπολογιστικό κόστος.