Κεφάλαιο 5 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ

Η στρατηγική της αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι αντίστροφη μ' αυτή της αριθμητικής παραγώγισης. Δηλαδή, εάν δίνονται τα σημεία $[x_i, y_i]$ από τα οποία διέρχεται η συνάρτηση, βρίσκουμε το συμπτωτικό πολυώνυμο και στη συνέχεια το ολοκληρώνουμε. Δηλαδή:

$$\int_{\alpha}^{\beta} y(x)dx \;\rightarrow\; \int_{\alpha}^{\beta} P_n(x)dx \qquad \textit{Εξ. 5.1}$$

Έτσι, χρησιμοποιώντας τον τύπο του Newton για το συμπτωτικό πολυώνυμο

$$\boxed{P_n(x_s) = f_0 + s\cdot\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2!}\cdot\Delta^2 f_0 + \frac{s(s-1)(s-2)}{3!}\cdot\Delta^3 f_0 + \ldots = \sum_{i=0}^{n}\binom{s}{i}\cdot\Delta^i f_0}$$

λαμβάνουμε διάφορες μεθόδους προσεγγιστικού υπολογισμού της τιμής των ορισμένων ολκληρωμάτων.

Ι. Για προσέγγιση με συμπτωτικό πολυώνυμο 1ου βαθμού

Βρίσκουμε:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1}(f_0 + s\Delta f_0)dx = h\int_{s=0}^{s=1}(f_0 + s\Delta f_0)ds = hf_0 s\Big|_0^1 + h\Delta f_0\frac{s^2}{2}\Big|_0^1$$
$$= h\left(f_0 + \frac{1}{2}\Delta f_0\right) \qquad \textit{Εξ. 5.2}$$

Δηλαδή τελικά:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1)}$$

Είναι προφανές ότι έχουμε αντικαταστήσει στο διάστημα ολοκλήρωσης από x_0 έως x_1 τη συνάρτηση $f(x)$ με μια ευθεία που ενώνει τα σημεία $(x_0, f(x_0))$ και $(x_1, f(x_1))$ και το αποτέλεσμα είναι να υπολογίζουμε το εμβαδό του τραπέζιου που σχηματίζεται.

ΣΦΑΛΜΑ

Το σφάλμα στον υπολογισμό του ολοκληρώματος λόγω της αντικατάστασης της $f(x)$ με το συμπτωτικό πολυώνυμο $p(x)$ υπολογίζεται από την ολοκλήρωση του σφάλματος, δηλαδή

$$E = \int_{x_0}^{x_1}\frac{s(s-1)}{2}h^2 f''(\xi)dx = h^3\int_{s=0}^{s=1}\frac{s^2 - s}{2}f''(\xi_1)ds = h^3 f''(\xi_1)\left[\frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4}\right]_0^1$$
$$\boxed{= -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi_1)} \qquad \textit{Εξ. 5.3}$$

όπου το ξ_1 είναι σημείο του διαστήματος $x_0 \le \xi_1 \le x_1$.

ΙΙ. Για προσέγγιση με συμπτωτικό πολυώνυμο 2ου βαθμού
Βρίσκουμε:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2}\left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s\text{-}1)}{2}\Delta f_0^2 \right)dx = h\int_{s=0}^{s=2}\left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s\text{-}1)}{2}\Delta f_0^2 \right)ds$$

$$= h\left(2f_0 + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3}\Delta f_0^2 \right)$$

$$\boxed{= \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)} \qquad \textit{Εξ. 5.4}$$

<u>**ΣΦΑΛΜΑ**</u>

Αν ολοκληρώσουμε τον επόμενο όρο για τον υπολογισμό του σφάλματος βρίσκουμε:

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

το οποίο αποτελεί «ευτυχή σύμπτωση». Οπότε ολοκληρώνουμε το μεθεπόμενο όρο και το σφάλμα είναι:

$$\mathrm{E} = \int_{x_0}^{x_2} \frac{s(s\text{-}1)(s\text{-}2)(s\text{-}3)}{24} h^4 f^{(4)}(\xi)dx = \boxed{-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi_1)} \qquad \textit{Εξ. 5.5}$$

με $x_0 \le \xi_1 \le x_2$.

ΙΙΙ. Για προσέγγιση με συμπτωτικό πολυώνυμο 3ου βαθμού
Με βάση τα προηγούμενα βρίσκουμε:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_3} P_3(x_3)dx = \boxed{\frac{3h}{8}\left(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right)} \qquad \textit{Εξ. 5.6}$$

με σφάλμα

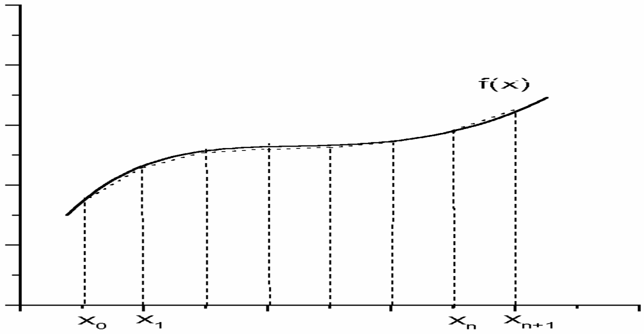
$$\boxed{E - -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi_1)} \qquad x_0 \le \xi_1 \le x_3 \qquad \textit{Εξ. 5.7}$$

Δηλαδή, το σφάλμα είναι της αυτής τάξης $O(h^5)$ με την προηγούμενη μέθοδο. Η ακρίβεια βελτιώνεται στο επόμενο βήμα, δηλαδή για συμπτωτικό πολυώνυμο 4ου βαθμού, το οποίο έχει το ίδιο σφάλμα αν χρησιμοποιήσω συμπτωτικό πολυώνυμο 5ου βαθμού.

Στη βιβλιογραφία, οι παραπάνω σχέσεις αναφέρονται ως **ΤΥΠΟΙ NEWTON-COTES.**

5.1 ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΡΑΠΕΖΙΟΥ

Αν το διάστημα ολοκλήρωσης είναι μεγάλο, τότε ορίζουμε μια διαμέριση του διαστήματος $\{a = x_0, ..., x_{n+1} = b\}$ σε $n+1$ υποδιαστήματα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.1



Στην ουσία παίρνουμε το άθροισμα των εμβαδών των επιμέρους τραπεζίων. Αν τα σημεία είναι ισαπέχοντα, τότε με βάση τα προηγούμενα:

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_{n+1}} f(x)dx = \sum \int_{x_0}^{x_{n+1}} p_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \cdots + \int_{x_1}^{x_2} \cdots + \int_{x_n}^{x_{n+1}} \cdots$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ .... \ + 2f_n + f_{n+1})$$

Τελικά, καταλήγουμε στον γνωστό **κανόνα του τραπεζίου.**

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ .... \ + 2f_n + f_{n+1}) \qquad \text{Εξ. 5.8}$$

ΣΦΑΛΜΑ

Το συνολικό σφάλμα θα είναι το άθροισμα των σφαλμάτων σε κάθε ένα από τα υποδιαστήματα (x_i, x_{i+1})

$$E = -\frac{h^3}{12}[f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \cdots + f''(\xi_n)] \qquad \text{Εξ. 5.9}$$

αν όμως η $f''(x)$ είναι φραγμένη και συνεχής στο $[x_0, x_n]$, τότε υπάρχει ένα κατάλληλο ξ τέτοιο, ώστε το άθροισμα να γίνει $(n+1)f''(\xi)$. Οπότε:

$$\boxed{E = -\frac{h^3}{12}(n+1)f''(\xi) = -\frac{h^2}{12}(b\text{-}\alpha)f''(\xi)} \qquad \text{Εξ. 5.10}$$

5.2 ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΟΥ SIMPSON

Αν το υπό ολοκλήρωση διάστημα το χωρίσουμε σε τριάδες σημείων, τότε για κάθε τριάδα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο (5.4) για την προσέγγιση της συνάρτησης με συμπτωτικό πολυώνυμο 2ου βαθμού. Επομένως, απαιτείται **άρτιος αριθμός υποδιαιρέσεων** του διαστήματος (a,b). Δηλαδή

$$\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{h}{3}\left(f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2}\right)$$

$$\boxed{= \frac{h}{3}\left(f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + 2f_5 + \ldots + 2f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}\right)} \qquad \text{Εξ. 5.11}$$

ΣΦΑΛΜΑ

Θα είναι προφανώς το άθροισμα των επιμέρους σφαλμάτων, επομένως το συνολικό σφάλμα θα είναι:

$$\boxed{E = -\frac{b\text{-}\alpha}{180} h^4 f^{(4)}(\xi)} \quad x_1 \leq \xi \leq x_{n+1} \qquad \text{Εξ. 5.12}$$

5.3 ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΟΥ SIMPSON 3/8

Κατ' αναλογία με την προηγούμενη μέθοδο, αν για κάθε τετράδα σημείων δημιουργήσω ένα συμπτωτικό πολυώνυμο τότε θα καταλήξω στον τύπο

$$\int_{\alpha=x_1}^{b=x_{n+1}} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_1 + 3f_2 + 3f_3 + 2f_4 + 3f_5 + 3f_6 + \ \ldots. \ + 2f_{n\text{-}2} + 3f_n + f_{n+1}) \qquad \text{Εξ. 5.13}$$

που προφανώς θα ισχύει για αριθμό υποδιαιρέσεων που διαιρείται με το 3.

ΣΦΑΛΜΑ

Το συνολικό σφάλμα θα είναι:

$$\boxed{E = -\frac{b\text{-}\alpha}{80} h^4 f^{(4)}(\xi)} \quad x_1 \leq \xi \leq x_{n+1} \qquad \text{Εξ. 5.14}$$

5.4 ΜΕΘΟΔΟΣ ROMBERG

Αν με τον κανόνα του τραπεζίου έχουμε υπολογίσει μια τιμή του ολοκληρώματος, έστω I_1, για βήμα h και στη συνέχεια υπολογίσουμε μια νέα τιμή I_2 για βήμα λh, τότε μπορούμε να κάνουμε μια *πρόβλεψη* για την *ακριβή* τιμή.

Για παράδειγμα, αν χρησιμοποιούμε τη μέθοδο τραπεζίου με βήμα h θα υπολογίσουμε μια τιμή για το ολοκλήρωμα έστω την I_1, ενώ για βήμα λh μια νέα τιμή του ολοκληρώματος έστω την I_2 , οπότε θα έχουμε ότι:

για βήμα h: Ακριβής Τιμή (AT) = $I_1 + ch^2$

για βήμα λh: Ακριβής Τιμή(AT) = $I_2 + c\lambda^2 h^2$

Με AT συμβολίζουμε την ακριβή τιμή του ολοκληρώματος ενω το c είναι μια σταθερά. Δηλαδή δημιουργήσαμε ένα σύστημα με δύο αγνώστους τα AT και c, του οποίου η λύση είναι:

$$A.T. = \frac{\lambda^2 I_1 - I_2}{\lambda^2 - 1} \qquad \text{και} \qquad c = \frac{I_2 - I_1}{h^2(1-\lambda^2)}$$

Επομένως η «ακριβής τιμή» καθορίζεται από τις τιμές των I_1, I_2 και λ. Αν για παράδειγμα θέσουμε $\lambda = 1/2$, τότε

$$\boxed{A.T. = I_2 + \frac{1}{3}(I_2 - I_1)} \qquad \textit{Εξ. 5.15}$$

Γενικότερα, αν υποθέσουμε μέθοδο με σφάλμα h^n, ο παραπάνω τύπος για $\lambda = 1/2$ θα γραφεί:

$$\boxed{A.T. = I_2 + \frac{I_2 - I_1}{2^n - 1}} \qquad \textit{Εξ. 5.16}$$

ΕΦΑΡΜΟΓΗ

Αποδεικνύεται εύκολα ότι η μέθοδος Romberg για τον κανόνα τραπεζίου με $\lambda = 1/2$ είναι ισοδύναμη της μεθόδου Simpson. Πράγματι, το ολοκλήρωμα I_1 για βήμα $h_1 = 2h$ και το ολοκλήρωμα I_2 για βήμα h θα είναι:

$$I_1 = \frac{h_1}{2}\left(f_0 + f_2\right) = \frac{2h}{2}\left(f_0 + f_2\right)$$

$$I_2 = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right) + \frac{h}{2}\left(f_1 + f_2\right) = \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right)$$

οπότε η «ακριβής τιμή» μέ βάση τα προηγούμενα θα είναι:

$$A.T. = \frac{\frac{1}{4}h\left(f_0 + f_2\right) - \frac{1}{2}h\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right)}{-3/4} = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$

που προφανώς αντιστοιχεί στη χρήση της μεθόδου Simpson , εξίσωση (5.4).

5.5 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΩΝ SPLINES ΣΤΗΝ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ ΚΑΙ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ

Οι splines μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον αριθμητικό υπολογισμό **παραγώγων** και **ολοκληρωμάτων**. Η κυβική spline που προσεγγίζει μια συνάρτηση $f(x)$ σε ένα διάστημα $x_i \le x \le x_{i+1}$ γράφεται:

$$f(x) = \alpha_i(x\text{-}x_i)^3 + b_i(x\text{-}x_i)^2 + c_i(x\text{-}x_i) + d_i \qquad \text{Εξ. 5.17}$$

και οι συντελεστές a_i, b_i, c_i και d_i δίνονται από τις σχέσεις:

$$\alpha_i = \frac{S_{i+1} - S_i}{6(x_{i+1} - x_i)}, \qquad b_i = \frac{S_i}{2}, \qquad c_i = f(x_i)$$

$$c_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{2(x_{i+1} - x_i)S_i + (x_{i+1} - x_i)S_{i+1}}{6} \qquad \text{Εξ. 5.18}$$

Ετσι, η **πρώτη** και **η δεύτερη παράγωγος** σε κάποιο σημείο ευρίσκονται αυτόματα από τις σχέσεις

$$f'(x) = 3\alpha_i(x\text{-}x_i)^2 + 2b_i(x\text{-}x_i) + c_i \qquad \text{Εξ. 5.19}$$

$$f''(x) = 6\alpha_i(x\text{-}x_i) + 2b_i \qquad \text{Εξ. 5.20}$$

Ενώ στα $n+1$ σημεία x_i οι παράγωγοι δίνονται πολύ απλά ως

$$f'(x_i) = c_i \quad , \quad f''(x)_i = 2b_i \qquad \text{Εξ. 5.21}$$

Είναι προφανές ότι η κυβική spline είναι ικανοποιητική μόνο για τον υπολογισμό παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης. Για ανώτερης τάξης παραγώγους απαιτούνται ανώτερης τάξης splines.

Το **ολοκλήρωμα** της $f(x)$ μπορεί να προσεγγιστεί ως εξής:

$$\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\alpha_i}{4}(x\text{-}x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x\text{-}x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x\text{-}x_i)^2 + d_i(x - x_i)\right]_{x_i}^{x_{i+1}}$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\alpha_i}{4}(x_{i+1}\text{-}x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x_{i+1}\text{-}x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x_{i+1}\text{-}x_i)^2 + d_i(x_{i+1}\text{-}x_i)\right]$$

αν $h = x_{i+1} - x_i$, τότε:

$$\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x)dx = \frac{h^4}{4}\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i + \frac{h^3}{3}\sum_{i=1}^{n+1}b_i + \frac{h^2}{2}\sum_{i=1}^{n+1}c_i + h\sum_{i=1}^{n+1}d_i \qquad \text{Εξ. 5.22}$$

ουσιαστικά, επομένως, αρκεί να υπολογίσουμε τα παραπάνω αθροίσματα για να έχουμε μια εξαιρετικά ακριβή τιμή του ολοκληρώματος.

Προφανώς, η μέθοδος παρά την ακρίβειά της δεν είναι η βέλτιστη από άποψη αριθμού πράξεων, και τούτο διότι ο υπολογισμός των splines είναι χρονοβόρα διαδικασία. Εάν όμως οι συντελεστές a_i, b_i, c_i και d_i έχουν ήδη υπολογισθεί, τότε η μέθοδος συνιστάται ανεπιφύλακτα.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Να υπολογισθεί το ολοκλήρωμα (και οι παράγωγοι) της συνάρτησης $f(x) = \sin(\pi x)$ *στο διάστημα* $0 \le x \le 1$ *με μια spline που χρησιμοποιεί τα σημεία x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0.*

Χρησιμοποιώντας τη συνθήκη $S_1 = 0$ *και* $S_5 = 0$ *βρίσκουμε τους εξής συντελεστές:*

I	*X*	s_i	a_i	b_i	c_I	d_I
1	*0*	*0*	*-4.8960*	*0*	*3.1340*	*0*
2	*0.25*	*-7.344*	*-2.0288*	*-3.6720*	*2.2164*	*0.7071*
3	*0.5*	*-10.3872*	*2.0288*	*-3.1936*	*0*	*1.0*
4	*0.75*	*-7.3440*	*4.8960*	*-3.6720*	*-2.2164*	*0.7071*

Οπότε το ολοκλήρωμα γίνεται:

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{6.251^4}{4}(0) + \frac{(0.25)^3}{3}(-12.5376) + \frac{(0.25)^2}{2}(3.1340) + 0.25(2.4142)$$

$$= 0.6362 \qquad (\alpha\kappa\rho\iota\beta\acute{\eta}\varsigma\ 0.6366)$$

Το σφάλμα θα είναι $\varepsilon \approx 0.0004$*, ενώ με τη μέθοδο Simpson το σφάλμα είναι:* - 0.0015

5.6 ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΤΕΩΝ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ

Γνωρίζουμε από τον Ολοκληρωτικό Λογισμό ότι υπάρχει μια κατάλληλη τιμή ξ στο διάστημα ολοκλήρωσης (α,β) ούτως ώστε να είναι:

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx = (\beta - \alpha)f(\xi) \qquad \textbf{ΘΕΩΡΗΜΑ ΜΕΣΗΣ ΤΙΜΗΣ} \qquad \text{Εξ. 5.23}$$

Αν το γενικεύσουμε, θα μπορούσαμε να προσεγγίσουμε ένα διάστημα με ένα γραμμικό συνδυασμό τιμών της $f(x)$ εντός του διαστήματος (α,β). Επίσης, θα μπορούσαμε να συνδυάσουμε και παραγώγους της $f(x)$ σ' αυτό το διάστημα. Στην πιο απλή περίπτωση, προσεγγίζουμε το ολοκλήρωμα με δυο μόνο τιμές της συνάρτησης, την $f(\alpha)$ και την $f(\beta)$. Οπότε γράφουμε:

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx \equiv c_0 f(\alpha) + c_1 f(\beta) \qquad \text{Εξ. 5.24}$$

Οι τιμές των c_0, c_1 εξαρτώνται από την $f(x)$ αλλά και από τις τιμές των α και β.

Για να είναι αληθής η παραπάνω σχεση, θα πρέπει η $f(x)$ να είναι είτε σταθερή συνάρτηση είτε γραμμική ως προς x. Οπότε, αν αντικαταστήσουμε μια φορά $f(x)=1$ και στη συνέχεια $f(x)=x$, τα ολοκληρώματα υπολογίζονται ακριβώς και επομένως θα δημιουργήσουμε δύο εξισώσεις για τους δύο αγνώστους c_0 και c_1. Δηλαδή:

$$f(x) = x \Rightarrow \int_\alpha^\beta x dx = \left.\frac{x^2}{2}\right|_\alpha^\beta = \frac{1}{2}(\beta^2 - a^2) \equiv c_0 \cdot \alpha + c_1 \cdot \beta$$

$$f(x) = 1 \Rightarrow \int_\alpha^\beta 1 \cdot dx = x\Big|_\alpha^\beta = (\beta - \alpha) \equiv c_0 \cdot 1 + c_1 \cdot 1$$

Τελικά , εύκολα βρίσκουμε ότι:

$$c_0 = \frac{\beta-\alpha}{2} \qquad c_1 = \frac{\beta-\alpha}{2}$$

Άρα

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx \equiv \frac{(\beta-\alpha)}{2}\left[f(\alpha)+f(\beta)\right] \qquad \text{Εξ. 5.25}$$

Ουσιαστικά, έχουμε δημιουργήσει τον «κανόνα του τραπεζίου». Αν γράψω τη σχέση (*5.24)* για τρεις όρους, δηλαδή,

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx \equiv c_0 f(\alpha)+c_1 f(\beta)+c_2 f\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) \qquad \text{Εξ. 5.26}$$

τότε η παραπάνω σχέση μπορεί να είνα ακριβής μόνο αν η $f(x)$ ήταν πολυώνυμο το πολύ 2ου βαθμού. Οπότε, θέτω $f(x)=1, x$ και x^2 και ολοκληρώνοντας για την κάθε μια συνάρτηση δημιουργώ ένα σύστημα τριών εξισώσεων για τους τρείς αγνώστους c_0, c_1 και c_2, από τη λύση του οποίου καταλήγω στην εξίσωση:

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx = \frac{(\beta-\alpha)}{6}\left[f(\alpha)+f\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)+f(\beta)\right] \qquad \text{Εξ. 5.27}$$

που στην ουσία είναι ο κανόνας του Simpson για τρία σημεία.

Θα μπορούσαμε εύκολα να επεκτείνουμε την παραπάνω διακασία, προσθέτοντας και τις πρώτες παραγώγους, για παράδειγμα:

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx = c_0 f(\alpha)+c_1 f(\beta)+c_2 f'(a)+c_3 f'(\beta) \qquad \text{Εξ. 5.28}$$

οπότε θα πρέπει να καταλήξω σε ένα σύστημα με τέσσερεις άγνωστες ποσότητες που θα μας οδηγήσει στη σχέση:

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx = \frac{(\beta-\alpha)}{2}\left(f(\alpha)+f(\beta)\right)+\frac{(\beta-\alpha)^2}{12}\left(f'(\alpha)-f'(\beta)\right) \qquad \text{Εξ. 5.29}$$

Δηλαδή, θα υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα μόνο με βάση τις τιμές της συνάρτησης και της παραγώγου της στα άκρα του διαστήματος $[a,b]$. Η σχέση αυτή γενικεύεται στον τύπο των **Euler – Maclaurin** (πώς;)

$$\boxed{\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = {} & \frac{h}{2}\left(f(x_0)+2f(x_1)+....+2f(x_{n-1})+f(x_n)\right)\\ & -\frac{h^2}{12}\left(f'(x_n)-f'(x_0)\right)\\ & +\frac{h^4}{720}\left(f'''(x_n)-f'''(x_0)\right)\\ & -\frac{h^6}{30240}\left(f^{(5)}(x_n)-f^{(5)}(x_0)\right)\end{aligned}} \qquad \text{Εξ. 5.30}$$

που είναι μια εξαιρετικά ακριβής μέθοδος και στην ουσία βελτιώνει το αποτέλεσμα με μόνο 6 επιπλέον υπολογισμούς της 1ης, 3ης και 5ης παραγώγου της συνάρτησης στα άκρα του διαστήματος.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Εφαρμόστε τη μέθοδο Euler – Maclaurin για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος

$$I = \int_0^{\pi/2} \eta\mu x dx$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (5.30) μόνο για δυο σημεία βρίσκω:

$$\int_0^{\pi/2} \eta\mu x dx = \frac{\pi}{4}\left(\eta\mu 0 + \eta\mu\frac{\pi}{2}\right) + \frac{\pi^2}{48}\left(\sigma\upsilon\nu 0 - \sigma\upsilon\nu\frac{\pi}{2}\right)$$

$$-\frac{\pi^4}{16\cdot 720}\left(\eta\mu 0 - \eta\mu\frac{\pi}{2}\right) + \frac{\pi^6}{2^6\cdot 30240}\left(\sigma\upsilon\nu 0 - \sigma\upsilon\nu\frac{\pi}{2}\right)$$

$$= \frac{\pi}{4} + \frac{\pi^2}{48} + \frac{\pi^4}{16\cdot 720} + \frac{\pi^6}{2^6\cdot 30240} = 0.99996732$$

ΕΦΑΡΜΟΓΗ (ΜΕΘΟΔΟΣ FILON)

Είναι χρήσιμη για ολοκληρώματα της μορφής $\int_a^\beta f(x)\sin(x)dx$, δηλαδή για ολοκληρώματα με συναρτήσεις που ταλαντώνονται. Ουσιαστικά, εφαρμόζουμε τη μέθοδο των προσδιοριστέων συντελεστών. Για παράδειγμα, γράφουμε:

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

και ζητάμε να είναι ακριβής για $f(x) = 1, x$ και x^2 οπότε

$$\left.\begin{array}{l} f(x) = 1 \Rightarrow 0 = A_1 + A_2 + A_3 \\ f(x) = x \Rightarrow -2\pi = \pi A_2 + 2\pi A_3 \\ f(x) = x^2 \Rightarrow -4\pi^2 = \pi^2 A_2 + 4\pi^2 A_3 \end{array}\right\} \begin{array}{l} A_1 = 1 \\ A_2 = 0 \\ A_3 = -1 \end{array}$$

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

ΓΕΝΙΚΟΣ ΤΥΠΟΣ

Ο γενικός τύπος για τη μέθοδο ολοκλήρωσης του Filon είναι:

$$\int_\alpha^b y(x)\sin kx dx \approx h\left[Ay(\alpha)\cos k\alpha - Ay(b)\cos kb + B\cdot S + C\cdot T\right] \qquad \textit{Εξ. 5.31}$$

$$A = \frac{1}{kh} + \frac{\sin 2kh}{2k^2h^2} - \frac{2\sin^2 kh}{k^3h^3} \qquad B = \frac{1+\cos s^2 kh}{k^2h^2} - \frac{\sin 2kh}{k^3h^3}$$

$$C = \frac{4\sin kh}{k^3h^3} - \frac{4\cos kh}{k^2h^2}$$

$$S = -y(\alpha)\sin k\alpha\alpha(b)\sin kb + 2\sum_{i=0}^{n} y(\alpha + 2ih)\sin(k\alpha + 2ikh)$$

$$T = \sum_{i=1}^{n} y[\alpha + (2i-1)h]\sin[k\alpha + (2i-1)kh]$$

5.7 ΜΕΘΟΔΟΣ GAUSS

Στη μέθοδο των προσδιοριστέων συντελεστών επιλέγαμε συγκεκριμένα σημεία στο διάστημα $[a,\beta]$ και στη συνέχεια υπολογίζαμε μόνο τους συντελεστές της συνάρτησης $f(x)$ σ' αυτά τα σημεία. Αν όμως θεωρήσουμε ότι και τα σημεία x_i πρέπει να προσδιοριστούν συγχρόνως με τους συντελεστές, τότε έχουμε τη **μέθοδο Gauss**.

Στην πιο απλή περίπτωση έχουμε:

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt \approx \alpha f(t_1) + bf(t_2) \qquad \text{Εξ. 5.32}$$

Οπότε, έχουμε τέσσερις αγνώστους a,b,t_1,t_2 και θα απαιτήσουμε η μέθοδός μας να είναι ακριβής για πολυώνυμα έως και τρίτου βαθμού $f(t)=1,t,t^2,t^3$, οπότε δημιουργούμε ένα σύστημα τεσσάρων εξισώσεων με τέσσερεις αγνώστους, δηλαδή:

$$\left.\begin{array}{ll} f(t)=1 & 2=\alpha+b \\ f(t)=t & 0=\alpha t_1+bt_2 \\ f(t)=t^2 & \dfrac{2}{3}=\alpha t_1^2+bt_2^2 \\ f(t)=t^3 & 0=\alpha t_1^3+bt_2^3 \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \alpha=b=1 \\ t_1=-t_2=-\left(\dfrac{1}{3}\right)^{1/2}=-0.5773 \end{array}$$

Άρα

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(t)dt \approx f(-0.5773)+f(0.5773)}$$

Για $f(t)=t^n, n=0,1,2,3$, η σχέση είναι ακριβής.

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ

Αν τα όρια ολοκλήρωσης δεν είναι $[-1,1]$, κάνουμε την αντικατάσταση

$$x=\frac{1}{2}(b\text{-}\alpha)t+\frac{1}{2}(b+\alpha) \qquad dx=\frac{b\text{-}\alpha}{2}dt$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Να υπολογισθεί το ολοκλήρωμα: $\int_{0}^{\pi/2} \sin x dx$

Κατ'αρχάς, αλλάζουμε τα όρια

$$x=\frac{\frac{\pi}{2}t+\frac{\pi}{2}}{2}, dx=\frac{\pi}{4}dt$$

και στη συνέχεια, για τα νέα όρια, το ολοκλήρωμα γράφεται:

$$I=\frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1}\sin\left[\frac{\pi}{4}(t+1)\right]dt=\frac{\pi}{4}\left[1.0\cdot\sin(0.10566\cdot\pi)+1.0\cdot\sin(0.39434\cdot\pi)\right]=0.99847\,.$$

Για σύγκριση αναφέρουμε ότι ο κανόνας τραπεζίου 2 σημείων δίνει: 0.7854 και ο κανόνας Simpson 3 σημείων δίνει: 1.0023

ΓΕΝΙΚΕΥΣΗ

Η μέθοδος Gauss μπορεί να γενικευθεί για πάνω από δυο όρων ανάπτυγμα. Δηλαδή:

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(t)dt \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(t_i)} \quad \text{για } n \text{ σημεία} \qquad \textit{Εξ. 5.33}$$

Οπότε δημιουργείται ένα σύστημα 2^n εξισώσεων, αν απαιτήσουμε να είναι ακριβής για πολυώνυμα έως και βαθμού 2^{n-1}, δηλαδή:

$$w_1 t_1^k + \ldots. + w_n t_n^k = \begin{cases} 0 \ \text{για}\ k = 1,\ 3,\ 5,\ \ldots,\ 2n\text{-}1 \\ \\ \dfrac{2}{k+1}\ \text{για}\ k = \ 0,\ 2,\ 4,\ 6,\ \ldots,\ 2n\text{-}2 \end{cases} \qquad \textit{Εξ. 5.34}$$

Αποδεικνείεται ότι τα t_i είναι ρίζες των πολυωνύμων Legendre βαθμού *n*. Τα πολυώνυμα Legendre δίνονται από τις αναδρομικές σχέσεις:

$$\boxed{\begin{array}{l} (n+1)L_{n+1}(x)\text{-}(2n+1)xL_n(x)+nL_{n\text{-}1}(x)=0 \\ L_o(x)=1 \qquad L_1(x)=x \qquad L_2(x)=\dfrac{3}{2}x^2-\dfrac{1}{2} \end{array}} \qquad \textit{Εξ. 5.35}$$

Οπότε τα w_i δίνονται από τις σχέσεις:

$$\boxed{w_i = \frac{2\left(1-x^2\right)}{n^2\left[L_{n\text{-}1}(x_i)\right]^2}} \qquad \textit{Εξ. 5.36}$$

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ: Οι ρίζες των πολυωνύμων Legendre βρίσκονται πάντα εντός του διαστήματος $(-1,1)$. Επομένως, αρκεί να υπολογισθούν μια φορά τα t_i και w_i και στη συνέχεια χρησιμοποιούνται σε κάθε πρόβλημα. Ο παρακάτω πίνακας δίνει τις τιμές των t_i και w_i για $n=2$ και $n=4$

n	t_i	w_i
2	± 0.57735027	1.0000000
4	± 0.86113631	0.34785485
	± 0.33948104	0.62214515

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο Gauss για 4 σημεία:

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = \frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1} \sin\left[\frac{\pi}{4}(t+1)\right]dt$$

$$= \frac{\pi}{4}\left[0.34785\cdot\sin\left(\frac{\pi}{4}\cdot(1+861136)\right)+0.34785\cdot\sin\left(\frac{\pi}{4}(1-0.861136)\right)\right.$$

$$\left. +0.652145\cdot\sin\left(\frac{\pi}{4}(1+0.33998)\right)+0.652145\cdot\sin\left(\frac{\pi}{4}(1-0.33998)\right)\right]$$

$$=1.000000\ldots$$

Αντίστοιχα, η μέθοδος Simpson με 32 σημεία σημεία δίνει: 1.0000003 και για 64 σημεία: 9.99999983.

ΓΕΝΙΚΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ GAUSS

Αν γράψουμε ένα ολοκλήρωμα στη μορφή:

$$\int_{\alpha}^{\beta} w(x)y(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_i y(x_i) \qquad \text{Εξ. 5.37}$$

όπου $w(x)$ είναι μια συνάρτηση βάρους, τότε μπορούμε να δημιουργήσουμε τους τύπους:

(1) Gauss – Legendre

για συνάρτηση βάρους $w(x)=1$ (η προαναφερθείσα μέθοδος)

(2) Gauss – Legendre

για ολοκληρώματα της μορφής $\int_0^{\infty} e^{-x} y(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i y(x_i)$

με συνάρτηση βάρους $w(x)=e^{-x}$ $\qquad L_n(x)=e^x \dfrac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^n\right)$

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

Τα x_i, A_i δίνονται από πίνακες.

(3) Gauss – Hermite

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

$w(x)=e^{-x^2}$ $\qquad$ x_i ρίζες των $H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\dfrac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$

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

Τα x_i, A_i δίνονται από πίνακες.

(4) Gauss – Chebyshev

$w(x)=\left(1-x^2\right)^{-1/2}$ $\qquad \int_{-1}^{1} \dfrac{y(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \sim \dfrac{\pi}{n}\sum_{i=1}^{n} y(x_i)$

x_i ρίζες των πολυωνύμων Chebyshev $T_n(x)=\cos\left(n\cos^{-1}(x)\right)$

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

1. Με τη μέθοδο του τραπεζίου ολοκληρώστε τις συναρτήσεις $\sqrt{x}$, $\log(x)$, και $1/x$ με βήμα $h = 0.1$ και $h = 0.05$ για το διάστημα $[1,1.3]$. Συγκρίνετε με τα ακριβή αποτελέσματα και επίσης πόσο μεταβάλλεται η ακρίβεια με τον υποδιπλασιασμό του βήματος.

2. Στο προηγούμενο πρόβλημα εφαρμόστε τη μέθοδο Romberg και εξετάστε την βελτίωση των αποτελεσμάτων.

3. Επαναλάβετε, την άσκηση 1 για τη μέθοδο του Simpson και συγκρίνετε την ακρίβειά της με αυτή της μεθόδου του τραπεζίου.

4. Υπολογίστε την τιμή του ολοκληρώματος $\int_0^{\pi/2} \sin x dx$ διαιρώντας το διάστημα σε έξι υποδιαστήματα, χρησιμοποιώντας τον κανόναα του τραπεζίου και στη συνέχεια τον κανόνα του Simpson. Συγκρίνετε το αποτέλεσμά σας με το ακριβές και εξετάστε αν το σφάλμα είναι το αναμενόμενο.

5. Εφαρμόστε τη μέθοδο Romberg στο παραπάνω πρόβλημα.

6. Εαν θέλαμε να υπολογίσουμε την τιμή του ολοκληρώματος $\int_{1.8}^{3.4} e^x dx$ χρησιμοποιώντας τον κανόνα του τραπεζίου, και απαιτούσαμε ακρίβεια 5 δεκαδικών ψηφίων, πόσο μικρό έπρεπε να είναι το βήμα h; Υπολογίστε το θεωρητικά και στη συνέχεια εξετάστε αν συμφωνεί με το αριθμητικό αποτέλεσμα.

7. Επαναλάβετε το προηγούμενο πρόβλημα χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Simpson.

8. Υπολογίστε το ελλειπτικό ολοκλήρωμα $\int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k\sin^2 x} dx$ για $k = 0.5$ και $k = 0.25$ με ακρίβεια 4 δεκαδικά ψηφίων.

9. Υπολογίστε το μήκος της περιφέρειας της έλλειψης $x^2/16 + y^2/25 = 1$ με ακρίβεια 6 δεκαδικών ψηφίων.

10. Με τη μέθοδο των προσδιοριστέων συντελεστών υπολογίστε τους συντελεστές στον τύπο $\int_{-h}^{h} y(x)dx = h(a_{-1}y_{-1} + a_0 y_0 + a_1 y_1) + h^2(b_{-1}y'_{-1} + b_0 y'_0 + b_1 y'_1)$ έτσι ώστε να είνα ακριβής για όσο το δυνατόν μεγαλύτερου βαθμού πολυώνυμο.

11. Με τη μέθοδο των προσδιοριστέων συντελεστών δείξτε ότι $\int_0^h y(x)dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) - \frac{h^3}{24}(y''_0 + y''_1)$ για κάθε πολυώνυμο έως και 4ου βαθμού.

12. Υπολογίστε με τη μέθοδο του Filon το ολοκλήρωμα $\int_0^{2\pi} e^{-x}\sin(10x)dx$. Συγκρίνετε την ακρίβεια της μεθόδου με την ακρίβεια της μεθόδου του Simpson στον ίδιο αριθμό σημείων [η αναλυτική επίλυση δίνει $\frac{10}{101}(1 - e^{-10})$].

13. 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 0.858690). Τι παρατηρείτε;