Κεφ. 4: Ολοκλήρωση

4.1 Εισαγωγή

4.2 Εξισώσεις ολοκλήρωσης Newton Cotes
- 4.2.1 Κανόνας τραπεζίου
- 4.2.2 Πρώτος και δεύτερος κανόνας Simpson
- 4.2.3 Πολλαπλά ολοκληρώματα

4.3 Ολοκλήρωση Gauss
- 4.3.1 Πολυώνυμα Legendre, Chebyshev, Hermite, Laguerre
- 4.3.2 Gauss-Legendre, Gauss-Chebyshev, Gauss-Laguerre, Gauss-Hermite
- 4.3.3 Παραδείγματα

4.1 Εισαγωγή

Γενικά ο αναλυτικός υπολογισμός ορισμένων ολοκληρωμάτων είναι επίπονος και σε πολλές περιπτώσεις αδύνατος. Επίσης, σε πολλές περιπτώσεις δεν γνωρίζουμε την αναλυτική έκφραση της συνάρτησης που επιθυμούμε να ολοκληρώσουμε, αλλά μόνο τις τιμές της συνάρτησης και συγκεκριμένες τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής. Η εναλλακτική λύση είναι ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων με αριθμητικές μεθόδους.

Οι πλέον συνηθισμένες μέθοδοι αριθμητικής ολοκλήρωσης είναι:

- **Εξισώσεις Newton-Cotes**
- **Ολοκλήρωση Gauss**

Και στις δύο μεθοδολογίες το ολοκλήρωμα προσεγγίζεται με άθροισμα σύμφωνα με τη σχέση

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N} w_i f_i$$

όπου f_i οι τιμές της $f(x)$ στα σημεία $x_i \in [a,b]$ και w_i οι συντελεστές βαρύτητας που προκύπτουν ανάλογα με τη μέθοδο ολοκλήρωσης.

4.2 Αριθμητική ολοκλήρωση Newton Cotes

Γενική εξίσωση: Πρόδρομη έκφραση παρεμβολής Newton

$$f(x) = f(x_0 + ah) = f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) + \frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0) +$$

$$+\frac{a(a-1)(a-2)(a-3)}{4!}\Delta^4 f(x_0) + \ldots + \frac{a(a-1)\ldots(a-n+1)}{n!}\Delta^n f(x_0) + O\left(h^{n+1}\right)$$

όπου $\alpha = \left(x - x_0\right)/h$ είναι ένας πραγματικός αριθμός, $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \ldots = x_n - x_{n-1}$ και

$$\Delta f(x_0) = f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0\right)$$

$$\Delta^2 f(x_0) = \Delta\left(\Delta f\right) = \Delta\left(f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0\right)\right) = \Delta f\left(x_0 + h\right) - \Delta f\left(x_0\right) =$$

$$= f\left(x_0 + 2h\right) - f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0 + h\right) + f\left(x_0\right) = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i$$

...

$$\Delta^n f(x_0) = \Delta^{n-1} f(x_0 + h) - \Delta^{n-1} f(x_0)$$

Σημείωση: $\Delta f(x_0) = hf'(x_0) \Rightarrow \Delta^2 f(x_0) = \Delta\left(hf'(x_0)\right) = h\Delta f'(x_0) = h^2 f''(x_0) \Rightarrow \ldots$

$$\Rightarrow \Delta^n f(x_0) = h^n f^{(n)}(x_0)$$

Απόδειξη πρόδρομης έκφρασης παρεμβολής Newton

$$f(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + b_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})$$

$$b_0 = f_0, \qquad b_1 = \frac{f_1}{x_1 - x_0} + \frac{f_0}{x_0 - x_1} = \frac{\Delta f_0}{h},$$

$$b_2 = \frac{f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{f_1}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_0)} + \frac{f_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} = \frac{\Delta^2 f_0}{2!h^2},$$

$$b_3 = \frac{f_3}{(3h)(2h)h} + \frac{f_2}{(-h)h(2h)} + \frac{f_1}{(-2h)(-h)h} + \frac{f_0}{(-3h)(-2h)(-h)} = \frac{f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0}{6h^3} = \frac{\Delta^3 f_0}{3!h^3},$$

$$\ldots, \; b_n = \frac{\Delta^n f_0}{n!h^n}$$

$$x - x_0 = \alpha h, \; x - x_1 = (\alpha - 1)h, \; x - x_2 = (\alpha - 2)h, \; \ldots, \; x - x_{n-1} = (\alpha - n + 1)h$$

Αντικατάσταση: $f(x) = f_0 + \alpha \Delta f_0 + \dfrac{\alpha(\alpha - 1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \ldots + \dfrac{a(a-1)\ldots(a-n+1)}{n!}\Delta^n f_0$

4.2.1 Κανόνας Τραπεζίου: $h = x_1 - x_0$, $0 \le a \le 1$

$$I_1 = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = h\int_0^1 f(x_0 + ah)da = h\int_0^1 [f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)]da =$$

$$= h\left[af_0 + \frac{a^2}{2}(f_1 - f_0)\right]_0^1 - \frac{h^3}{12}f''(x) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + O(h^3)$$

Κανόνας Τραπεζίου για n **διαστήματα** $h = (b-a)/n$ και $x_i = x_0 + ih$, $i = 0,1,\ldots,n$:

$$I_1 = \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n) - \frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i), \quad x_{i-1} \le \xi_i \le x_i$$

Σημείωση: $\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \simeq nf''(\xi)$, $a \le \xi \le b \Rightarrow -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi)$

4.2.2 1^{ος} και 2^{ος} Κανόνας Simpson

1^{ος} Κανόνας Simpson: $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$, $0 \le a \le 2$

$$I_2 = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = h\int_0^2 f(x_0 + ah)da =$$

$$= h\int_0^2 [f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) + \frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0) + O\left(h^4\right)]da =$$

$$= h\left[af_0 + \frac{a^2}{2}\Delta f(x_0) + \left(\frac{a^3}{6} - \frac{a^2}{4}\right)\Delta^2 f(x_0) + \left(\frac{a^4}{24} - \frac{a^3}{6} + \frac{a^2}{6}\right)\Delta^3 f(x_0)\right]_0^2 + O\left(h^5\right) =$$

$$= h\left[2f_0 + 2(f_1 - f_0) + \frac{1}{3}(f_2 - 2f_1 + f_0)\right] - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(x) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + O\left(h^5\right)$$

1^{ος} Κανόνας Simpson για n **διαστήματα**:

$$I_2 = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

2ος Κανόνας Simpson ή Κανόνας 3/8: $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = x_3 - x_2$, $0 \le a \le 3$

$$I_3 = \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = h\int_0^3 f(x_0 + ah)da = h\int_0^3 [f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) +$$

$$+\frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0) + O\left(h^4\right)]da =$$

$$= h\left[af_0 + \frac{a^2}{2}\Delta f(x_0) + \left(\frac{a^3}{6} - \frac{a^2}{4}\right)\Delta^2 f(x_0) + \left(\frac{a^4}{24} - \frac{a^3}{6} + \frac{a^2}{6}\right)\Delta^3 f(x_0)\right]_0^3 + O\left(h^5\right) =$$

$$= h[3f(x_0) + \frac{9}{2}[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{9}{4}[f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)] +$$

$$\frac{3}{8}[f(x_3) - f(x_2) - 2f(x_2) + 2f(x_1) + f(x_1) - f(x_0)] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}\left(x\right) =$$

$$= h\left[\frac{3}{8}f(x_0) + \frac{9}{8}f(x_1) + \frac{9}{8}f(x_2) + \frac{3}{8}f(x_2)\right] + O\left(h^5\right)$$

2ος Κανόνας Simpson : $I_3 = \frac{3h}{8}\left[f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}\left(\xi\right)$

$$0 \le a \le 4:\ I_4 = \int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = h\int_0^4 f(x_0+ah)da = h\int_0^4 [f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) +$$

$$+\frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0) + \frac{a(a-1)(a-2)(a-3)}{4!}\Delta^4 f(x_0) + \frac{a(a-1)(a-2)(a-3)(a-4)}{5!}\Delta^5 f(x_0)]da =$$

$$= h[af(x_0) + \frac{a^2}{2}\Delta f(x_0) + (\frac{a^3}{6} - \frac{a^2}{4})\Delta^2 f(x_0) + (\frac{a^4}{24} - \frac{a^3}{6} + \frac{a^2}{6})\Delta^3 f(x_0) +$$

$$+(\frac{a^5}{120} - \frac{a^4}{16} + \frac{11a^3}{72} - \frac{a^2}{8})\Delta^4 f(x_0) + \frac{1}{120}(\frac{a^6}{6} - 2a^5 - \frac{35a^4}{4} - \frac{50a^3}{3} - 12a^2)\Delta^4 f(x_0)]_0^4 =$$

$$= h[4f(x_0) + 8[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{20}{3}[f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)] +$$

$$\frac{8}{3}[f(x_3) - f(x_2) - 2f(x_2) + 2f(x_1) + f(x_1) - f(x_0)] +$$

$$+\frac{14}{45}[f(x_4) - f(x_3) - f(x_3) + f(x_2) - 2f(x_3) + 2f(x_2) + 2f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_2) - f(x_1) - f(x_1) + f(x_0)] \Rightarrow$$

$$I_4 = h\frac{2}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi)$$

Εναλλακτική διατύπωση εξισώσεων Newton-Cotes

Απόδειξη του 1ου κανόνα ολοκλήρωσης Simpson $\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$, αντικαθιστώντας τη συνάρτηση $f(x)$ με το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange 2ης τάξης.

$$P_2(x) = \sum_{i=0}^{2} L_i(x) f_i = L_0(x) f_0 + L_1(x) f_1 + L_2(x) f_2, \text{ όπου } L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{2} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Το πολυώνυμο παρεμβολής Lagrange 2ης τάξης υπολογίζεται από τη σχέση

$$P_2(x) = f_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Με δεδομένο ότι τα f_0, f_1, f_2 είναι σταθερές ως προς την ολοκλήρωση γράφουμε

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = f_0 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} dx + f_1 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} dx + f_2 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} dx$$

Εισάγουμε την αλλαγή μεταβλητής $x = x_0 + ht$ απ' όπου προκύπτει $dx = hdt$.

Η νέα μεταβλητή ολοκλήρωσης είναι το $t \in [0,2]$.

Η παραπάνω σχέση παίρνει τη μορφή:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \simeq f_0 \int_0^2 \frac{h(t-1)h(t-2)}{(-h)(-2h)} hdt + f_1 \int_0^2 \frac{h(t-0)h(t-2)}{(h)(-h)} hdt + f_2 \int_0^2 \frac{h(t-0)h(t-1)}{(2h)(h)} hdt =$$

$$= f_0 \frac{h}{2} \int_0^2 \left(t^2 - 3t + 2\right) dt - f_1 h \int_0^2 \left(t^2 - 2t\right) dt + f_2 \frac{h}{2} \int_0^2 \left(t^2 - t\right) dt =$$

$$= f_0 \frac{h}{2} \left(\frac{t^3}{3} - \frac{3t^2}{2} + 2t \right) \Bigg|_{t=0}^{t=2} - f_1 h \left(\frac{t^3}{3} - t^2 \right) \Bigg|_{t=0}^{t=2} + f_2 \frac{h}{2} \left(\frac{t^3}{3} - \frac{t^2}{2} \right) \Bigg|_{t=0}^{t=2} =$$

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

<u>Παράδειγμα</u>: Αριθμητική επίλυση του ολοκληρώματος $\int_{0.2}^{1} e^{-x}dx = 0.450851$ με $h = 0.2$.

$$f_0 = e^{-0.2} = 0.8187,\ f_1 = e^{-0.4} = 0.6703,\ f_2 = e^{-0.6} = 0.5488,\ f_3 = e^{-0.8} = 0.4493,\ \ f_4 = e^{-1.0} = 0.3679$$

$I_1 = \dfrac{0.2}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4 \right) = 0.4523$ (κανόνας τραπεζίου 4 φορές)

$I_2 = \dfrac{0.2}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4 \right) = 0.4508$ (1^{ος} κανόνας Simpson 2 φορές)

$I_3 =$? (η διακριτοποίηση με $h = 2$ δεν οδηγεί στον σωστό αριθμό σημείων ώστε να εφαρμοστεί ο 2^{ος} κανόνας Simpson)

$I_4 = \dfrac{0.4}{45}\left(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4 \right) = 0.4508$

4.2.3 Πολλαπλά ολοκληρώματα)

Αριθμητική ολοκλήρωση σε 2 διαστάσεις (διπλά ολοκληρώματα): $\int_a^b \int_c^d f(x,y)dxdy = \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} f_{i,j} w_{i,j}$

Παράδειγμα: $I = \int_0^2 \int_0^2 \sin(x+y) dxdy = 2.5754 \simeq \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} \sin(x_i + y_j) w_{i,j}$ $\quad (w_{i,j} = w_i w_j)$

Κανόνας τραπεζίου 2 φορές με $\Delta x = \Delta y = 1$:

$$I = \int_0^2 \frac{\Delta x}{2} \left[\sin(x_0 + y_j) + 2\sin(x_1 + y_j) + \sin(x_2 + y_j) \right] dy =$$

$$= \frac{\Delta y}{2} \frac{\Delta x}{2} \{ \sin(x_0 + y_0) + 2\sin(x_0 + y_1) + \sin(x_0 + y_2) +$$

$$+ 2\sin(x_1 + y_0) + 4\sin(x_1 + y_1) + 2\sin(x_1 + y_2) + \sin(x_2 + y_0) + 2\sin(x_2 + y_1) + \sin(x_2 + y_2) \} =$$

$$= \frac{1}{4} \{ 2\sin(1) + \sin(2) + 2\sin(1) + 4\sin(2) + 2\sin(3) + \sin(2) + 2\sin(3) + \sin(4) \} =$$

$$= \sin(1) + 1.5\sin(2) + \sin(3) + 0.25\sin(4) = 2.157$$

Στη συνέχεια υπολογίζεται το ίδιο ολοκλήρωμα εφαρμόζοντας 1$^{\text{ο}}$ Κανόνα Simpson μία φορά με $\Delta x = \Delta y = 1$:

$$I = \int_0^2 \frac{\Delta x}{3}\left[\sin\left(x_0 + y_j\right) + 4\sin\left(x_1 + y_j\right) + \sin\left(x_2 + y_j\right)\right] dy =$$

$$= \frac{\Delta y}{3}\frac{\Delta x}{3}\left\{\sin\left(x_0 + y_0\right) + 4\sin\left(x_0 + y_1\right) + \sin\left(x_0 + y_2\right) + \right.$$

$$\left. +4\sin\left(x_1 + y_0\right) + 16\sin\left(x_1 + y_1\right) + 4\sin\left(x_1 + y_2\right) + \sin\left(x_2 + y_0\right) + 4\sin\left(x_2 + y_1\right) + \sin\left(x_2 + y_2\right)\right\} =$$

$$= \frac{1}{9}\left\{4\sin(1) + \sin(2) + 4\sin(1) + 16\sin(2) + 4\sin(3) + \sin(2) + 4\sin(3) + \sin(4)\right\} =$$

$$= \frac{8}{9}\sin(1) + 2\sin(2) + \frac{8}{9}\sin(3) + \frac{1}{9}\sin(4) = 2.608$$

Παράδειγμα: $I = \int_0^2 \int_0^2 (x+y)\sin(x+y)dxdy = \sum_{j=1}^{J}\sum_{i=1}^{I}(x_i + y_j)\sin(x_i + y_j)w_{i,j}$

Κανόνας τραπεζίου με $\Delta x = \Delta y = 1$:

$$I = \int_0^2 \frac{\Delta x}{2}\Big[(x_0 + y_j)\sin(x_0 + y_j) + 2(x_1 + y_j)\sin(x_1 + y_j) + (x_2 + y_j)\sin(x_2 + y_j)\Big]dy =$$

$$= \frac{\Delta y}{2}\frac{\Delta x}{2}\Big\{(x_0 + y_0)\sin(x_0 + y_0) + 2(x_0 + y_1)\sin(x_0 + y_1) + (x_0 + y_2)\sin(x_0 + y_2) +$$

$$+2(x_1 + y_0)\sin(x_1 + y_0) + 4(x_1 + y_1)\sin(x_1 + y_1) + 2(x_1 + y_2)\sin(x_1 + y_2) +$$

$$+(x_2 + y_0)\sin(x_2 + y_0) + 2(x_2 + y_1)\sin(x_2 + y_1) + (x_2 + y_2)\sin(x_2 + y_2)\Big\} =$$

$$\frac{1}{4}\Big\{2\sin(1) + 2\sin(2) + 2\sin(1) + 8\sin(2) + 6\sin(3) + 2\sin(2) + 6\sin(3) + 4\sin(4)\Big\} =$$

$$= \sin(1) + 3\sin(2) + 3\sin(3) + \sin(4) = 0.8415 + 2.723 + 0.4234 - 0.7568 = 3.231$$

Παράδειγμα: Υπολογίστε αριθμητικά εφαρμόζοντας τον κανόνα του τραπεζίου 1 φορά σε κάθε κατεύθυνση το τριπλό ολοκλήρωμα:

$$\int_{-1}^{3}\int_{0}^{2}\int_{-2}^{1} x^2 y\,dz\,dy\,dx = 56$$

Σχολιάστε την ακρίβεια του αριθμητικού αποτελέσματος και εξηγήστε τυχόν σημαντικές αποκλίσεις.

Αριθμητική λύση: $\int_{-1}^{3}\int_{0}^{2}\int_{-2}^{1} x^2 y\,dz\,dy\,dx = \int_{-1}^{3} x^2 dx \int_{0}^{2} y\,dy \int_{-2}^{1} dz = \int_{-1}^{3} x^2 dx \int_{0}^{2} y\,dy \frac{h_z}{2}(1+1) =$

$$= \int_{-1}^{2} x^2 \frac{h_y}{2}(2+0)\frac{h_z}{2}(1+1)\,dx = \frac{h_x}{2}(9+1)\frac{h_y}{2}(2+0)\frac{h_z}{2}(1+1) = \frac{h_x h_y h_z}{8}40 = 4\times 2\times 3\times 5 = 120$$

Η σημαντική διαφορά ανάμεσα στην αριθμητική και αναλυτική λύση οφείλεται αποκλειστικά στη επίλυση του ολοκληρώματος ως προς x και συγκεκριμένα στο γεγονός ότι το πολυώνυμο 1^{ου} βαθμού που προκύπτει από τον κανόνα του τραπεζίου δεν προσεγγίζει επαρκώς τη συνάρτηση x^2.
Αντίθετα οι αριθμητικές ολοκληρώσεις στις άλλες δύο κατευθύνσεις y και z είναι απόλυτα ακριβείς.

4.3 Αριθμητική ολοκλήρωση Gauss: $\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Gauss-Legendre: $\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Gauss-Laguerre: $\int_{0}^{\infty} f(x)e^{-x}dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Gauss-Hermitte: $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2}dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Gauss-Chebyshev: $\int_{-1}^{1} f(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Σε κάθε μία από τις ολοκληρώσεις Gauss τα x_i είναι οι ρίζες του αντίστοιχου πολυωνύμου βαθμού n και τα w_i οι συντελεστές βαρύτητας.

4.3.1 Ρίζες πολυωνύμου Legendre $2^{ου}$ και $4^{ου}$ βαθμού και οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας:

± 0.577350269189626	1.000000000000000
± 0.339981043584856	0.652145154862546
± 0.861136311594053	0.347854845137454

Ρίζες πολυωνύμου Hermitte $2^{ου}$ και $4^{ου}$ βαθμού και οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας:

± 0.7071067811	0.8862269255
± 1.6506801239	0.0813128354
± 0.5246476233	0.8049140900

Ρίζες πολυωνύμου Laguerre $4^{ου}$ βαθμού και οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας:

$$x_1 = 0.322547689619 \quad x_2 = 1.745761101158 \quad x_3 = 4.536620296921 \quad x_4 = 9.395070912301$$
$$w_1 = 0.603154104342 \quad w_2 = 0.357418692438 \quad w_3 = 0.03888790851 \quad w_4 = 0.000539294705561$$

Ρίζες πολυωνύμου Chebyshev βαθμού $n+1$ και οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας:

$$x_i = \cos\frac{(2i+1)\pi}{2n+2} \qquad i = 0,1,\ldots,n \qquad w_i = \frac{\pi}{n+1}$$

Ρίζες πολυωνύμου Hermitte βαθμού 16 και συντελεστές βαρύτητας:

±0.4688738939305818E+001	0.2654807474011182E-009
±0.3869447904860123E+001	0.2320980844865211E-006
±0.3176999161979956E+001	0.2711860092537882E-004
±0.2546202157847481E+001	0.9322840086241805E-003
±0.1951787990916254E+001	0.1288031153550997E-001
±0.1380258539198881E+001	0.8381004139898583E-001
±0.8229514491446559E+000	0.2806474585285337E+000
±0.2734810461381525E+000	0.5079294790166137E+000

Ρίζες πολυωνύμου Legendre βαθμού 80 και συντελεστές βαρύτητας:

1.951138325679399765435123D-02	3.901781365630665481128044D-02
5.850443715242066862899332D-02	3.895839596276953119862552D-02
9.740839844158459906327845D-02	3.883965105905196893177418D-02
1.361640228091438865592411D-01	3.866175977407646332707711D-02
1.747122918326468125593390D-01	3.842499300695942318521244D-02
2.129945028576661325723885D-01	3.812971131447763834420679D-02
2.509523583922721204931588D-01	3.777636436200139748977498D-02
2.885280548845118531091393D-01	3.736549023873049002670538D-02
3.256643707477019146191129D-01	3.689771463827600883915100D-02
3.623047534994873156190433D-01	3.637374990583597804396499D-02
3.983934058819692270243796D-01	3.579439395341605460286159D-02
4.338753708317560930623867D-01	3.516052904474759349552659D-02
4.686966151705444770360784D-01	3.447312045175392879436423D-02
5.028041118887849875936728D-01	3.373321498461152281667516D-02
5.361459208971319320198573D-01	3.294193939764540138283618D-02
5.686712681227097847254858D-01	3.210049867348777314805649D-02
6.003306228297517431547463D-01	3.121017418811470164244287D-02
6.310757730468719662479284D-01	3.027232175955798066122001D-02
6.608598989861198017359671D-01	2.928836958326784769276759D-02
6.896376443420276007712076D-01	2.825981605727686239675320D-02
7.173651853620998802540683D-01	2.718822750048638067441871D-02
7.440002975835972723165405D-01	2.607523576756511790296874D-02
7.695024201350413738656161D-01	2.492253576411549110511785D-02
7.938327175046054499486393D-01	2.373188286593010129319252D-02
8.169541386814634703711250D-01	2.250509024633246192622159D-02
8.388314735802552756166230D-01	2.124402611578200638871074D-02
8.594314066631110969771921D-01	1.995061087814199892889193D-02
8.787225676782138287037733D-01	1.862681420829903142873541D-02
8.966755794387706831943241D-01	1.727465205626930635858421D-02
9.132631025717576541647337D-01	1.589618358372568804490291D-02
9.284598771724457959530460D-01	1.449350804050907611696207D-02
9.422427613098726747522660D-01	1.306876159240133929378683D-02
9.545907663436349054934815D-01	1.162411412079782691646677D-02
9.654850890437992514522732D-01	1.016176604110306452083185D-02
9.749091405857277933856452D-01	8.683945269260858426409452D-03
9.828485727386290704182880D-01	7.192904768117312752675571D-03
9.892913024997555310265032D-01	5.690922451403198649269107D-03
9.942275409656882778920635D-01	4.180313124694895236739304D-03
9.976498643982376888994942D-01	2.663533589512681669293536D-03
9.995538226516306298800805D-01	1.144950003186941534544172D-03

4.3.2 Απόδειξη της έκφρασης Gauss-Legendre: $\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

Θέτουμε $f(x) = p_n(x) + R_n(x)$, όπου

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i),\ L_i(x) = \prod_{\substack{j\neq i\\ j=0}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)},\ i = 0,1,\ldots,n,\ i \neq j,\ R_n(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}}{(n+1)!}$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} p_n(x)dx + \int_{-1}^{1} R_n(x)dx = \int_{-1}^{1} \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)dx + \int_{-1}^{1} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}}{(n+1)!} dx =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_{-1}^{1} L_i(x)dx + \int_{-1}^{1} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) q_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)w_i + \int_{-1}^{1} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) q_n(x)dx$$

Εάν η $f(x)$ είναι ένα πολυώνυμο βαθμού $2n+1$ και αφού το $\prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$ είναι ένα πολυώνυμο $n+1$ βαθμού τότε το $q_n(x)$ θα πρέπει να είναι πολυώνυμο βαθμού n.

Γράφουμε τα αναπτύγματα με βάση τα πολυώνυμα Legendre:

$$\prod_{i=0}^{n}\left(x-x_i\right)=b_0P_0+\ldots+b_nP_n+b_{n+1}P_{n+1}=\sum_{i=0}^{n+1}b_iP_i \qquad \text{και} \qquad q_n\left(x\right)=c_0P_0+\ldots+c_nP_n=\sum_{j=0}^{n}c_jP_j$$

Αντικαθιστούμε και εφαρμόζοντας ορθογωνιότητα έχουμε

$$\int_{-1}^{1}\prod_{i=0}^{n}\left(x-x_i\right)q_n\left(x\right)dx=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}b_ic_j\int_{-1}^{1}P_iP_jdx+\sum_{j=0}^{n}b_{n+1}c_j\int_{-1}^{1}P_{n+1}P_jdx=\sum_{i=0}^{n}b_ic_i\int_{-1}^{1}\left[P_i\right]^2dx$$

Για να είναι το σφάλμα μηδενικό θέτουμε $b_0=b_1=\ldots=b_n=0$, ενώ ο συντελεστής b_{n+1} προκύπτει από τη σχέση $\prod_{i=0}^{n}\left(x-x_i\right)=b_{n+1}P_{n+1}$.

Επιπλέον το αποτέλεσμα αυτό δηλώνει ότι το πολυώνυμο $\prod_{i=0}^{n}\left(x-x_i\right)=b_{n+1}P_{n+1}$, δηλαδή έχουν τις ίδιες ρίζες που θα είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre βαθμού $n+1$.

Επειδή όμως πολυώνυμο $\prod_{i=0}^{n}\left(x-x_i\right)$ είναι σε μορφή γινομένου παραγόντων οι ρίζες του είναι τα x_i που πρέπει να είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre βαθμού $n+1$.

4.3.3. Παραδείγματα

Παράδειγμα: Να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα $erf\left(x\right)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt$ με Gauss-Legendre.

Νέα μεταβλητή ολοκλήρωσης:

$$s=\frac{2t-\left(a+b\right)}{b-a}\Rightarrow s=\frac{2t-x}{x}=\frac{2t}{x}-1\Rightarrow t=\frac{x}{2}\left(s+1\right)\Rightarrow dt=\frac{x}{2}ds$$

$$erf\left(x\right)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{x}{2}\int_{-1}^{1}\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(s+1\right)^2\right]ds=\frac{x}{\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{N}\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(s_i+1\right)^2\right]w_i$$

Έκφραση 2 σημείων: $erf\left(x\right)=\frac{x}{\sqrt{\pi}}\left(\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(s_1+1\right)^2\right]w_1+\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(s_2+1\right)^2\right]w_2\right)=$

$$=\frac{x}{\sqrt{\pi}}\left(\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(-0.57735+1\right)^2\right]\times 1+\exp\left[-\frac{x^2}{4}\left(0.57735+1\right)^2\right]\times 1\right)=$$

Για $x=0.5$: $erf\left(0.5\right)=0.5205$

Παράδειγμα: Να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα I= $\int_{-1}^{1}\int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}}\sqrt{x^2+y^2}\,dydx=\frac{2\pi}{3}$ με Gauss-Legendre.

Νέα μεταβλητή ολοκλήρωσης: $s=\frac{2y-(a+b)}{b-a}\Rightarrow s=\frac{y}{\sqrt{1-x^2}}\Rightarrow y=s\sqrt{1-x^2}\Rightarrow dy=ds\sqrt{1-x^2}$

$$\int_{-1}^{1}\int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}}\sqrt{x^2+y^2}\,dydx=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\sqrt{x^2+s^2\left(1-x^2\right)}\sqrt{1-x^2}\,dsdx=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sqrt{x_i^2+s_j^2\left(1-x_i^2\right)}\sqrt{1-x_i^2}\,w_iw_j$$

Έκφραση 2 σημείων: I= $\sqrt{x_1^2+s_1^2\left(1-x_1^2\right)}\sqrt{1-x_1^2}\,w_1w_1+\sqrt{x_1^2+s_2^2\left(1-x_1^2\right)}\sqrt{1-x_1^2}\,w_1w_2+$

$$+\sqrt{x_2^2+s_1^2\left(1-x_2^2\right)}\sqrt{1-x_2^2}\,w_2w_1+\sqrt{x_2^2+s_2^2\left(1-x_2^2\right)}\sqrt{1-x_2^2}\,w_2w_2=2.4$$

Εφαρμόστε ολοκλήρωση Gauss-Legendre περισσοτέρων σημείων.

Μετασχηματισμός από $p\in[-1,1]$ σε $\mu\in[0,\infty)$: $\mu=\frac{1+p}{1-p},\ d\mu=\frac{2dp}{(1-p)^2},\ p=\frac{\mu+1}{\mu-1}$

Ασκήσεις:

1. Να υπολογισθεί με Κανόνα Τραπεζίου, 1$^{\text{ο}}$ Κανόνα Simpson και Gauss-Legendre ο ολοκλήρωμα $\int_{-2}^{2}\int_{0}^{3} xy^3 dydx$.

2. Υπολογίστε το σφάλμα ολοκλήρωσης στον 2$^{\text{ο}}$ Κανόνα Simpson: $I_3 = \frac{3h}{8}\left(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right) + \varepsilon_3$

   Βοήθημα: Στη γενική περίπτωση το ανάπτυγμα της $f(x)$ γράφεται στη μορφή:

$$f(x) = f(x_0 + ah) = \left(1+\Delta\right)^a f(x_0) = f(x_0) + a\Delta f(x_0) + \frac{a(a-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) + \frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0) +$$

$$+\frac{a(a-1)(a-2)(a-3)}{4!}\Delta^4 f(x_0) + \ldots + \frac{a(a-1)\ldots(a-n+1)}{n!}\Delta^n f(x_0) + R_n\left(x_0 + ah\right)$$

όπου $\Delta f(x_0) = f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0\right)$, $\Delta^n f(x_0) = \Delta^{n-1} f(x_0 + h) - \Delta^{n-1} f(x_0)$ και $R_n\left(x_0 + ah\right) = h^{n+1} a\left(a-1\right)\ldots\left(a-n\right)\frac{f^{(n+1)}}{\left(n+1\right)!}$

3. Να υπολογισθεί αριθμητικά το ολοκλήρωμα $I = \int_0^{\infty} x^{12} e^{-x^2} dx$ εφαρμόζοντας έναν αλγόριθμο Newton Cotes και έναν αλγόριθμο Gauss. Σχολιάστε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

4. Να υπολογισθεί αριθμητικά το ολοκλήρωμα της συνάρτησης $f\left(x, y\right) = \sqrt{x^2 + y^2}$ στο πεδίο $-1 < x < 1$ και $-\sqrt{1-x^2} < y < \sqrt{1-x^2}$.

5. Να υπολογιστεί το τριπλό ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 y^4 z^6 e^{-x^2-y^2-z^2} dx\ dy\ dz$

6. Να υπολογιστεί αριθμητικά με τον πλέον αποτελεσματικό τρόπο το τετραπλό ολοκλήρωμα: $\int_0^{\infty}\int_0^{2}\int_{-1}^{1}\int_0^{3} x\ y^2 e^{-s^2} dx\ dy\ dz\ ds$

7. Να υπολογιστεί με αριθμητική ολοκλήρωση το ολοκλήρωμα $I=\int_{-1}^{1}\int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}}\sqrt{x^2+y^2}dydx$ εφαρμόζοντας Gauss Chebyshev 2 σημείων στη κατεύθυνση y και $1^{\text{ο}}$ κανόνα Simpson με $h=0.5$ στη κατεύθυνση x.

8. Να υπολογισθεί αριθμητικά το ολοκλήρωμα: $\int_{-1}^{1}\int_{-\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{1-x^2}}\int_{-\sqrt{1-x^2-y^2}}^{\sqrt{1-x^2-y^2}}\frac{dzdydx}{\sqrt{1-x^2-y^2-z^2}}$

9. Υπολογίστε με ολοκλήρωση Gauss-Laguerre τεσσάρων σημείων το ολοκλήρωμα $\int_{0}^{\infty}\frac{xdx}{\left(1+x^2\right)^2}$.

10. Έστω το ολοκλήρωμα $I=\int_{a}^{b}f\left(x\right)dx=\int_{1}^{3}\left(x^3-2x^2+7x-5\right)dx=20.666....$

A) Να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα αριθμητικά εφαρμόζοντας α) κανόνα τραπεζίου μία φορά, β) κανόνα τραπεζίου δύο φορές και γ) $1^{\text{ο}}$ κανόνα Simpson μία φορά. Σχολιάστε την ακρίβεια των υπολογισμών.

$h=b-a$

$$I_{n1}=\frac{h}{2}\left(f_0+f_1\right)=\frac{3-1}{2}\left(1+25\right)\Rightarrow\ I_{n1}=26$$

$$I_{n2}=\frac{h/2}{2}\left(f_0+2f_1+f_2\right)=\frac{3-1}{4}\left(1+2\times9+25\right)\Rightarrow\ I_{n2}=22$$

$$I_S=\frac{h/2}{3}\left(f_0+4f_1+f_2\right)=\frac{3-1}{6}\left(1+4\times9+25\right)\Rightarrow\ I_S=20.666...$$

Το σφάλμα του $1^{\text{ου}}$ Κανόνα Simpson είναι $-\frac{1}{90}h^5f^{(4)}\left(\xi\right)$. Αφού η συγκεκριμένη f είναι πολυώνυμο $3^{\text{ης}}$ τάξης η $4^{\text{η}}$ παράγωγος $f^{(4)}=0$ και επομένως το σφάλμα ολοκλήρωσης μηδενίζεται.

Β) Έστω ότι I_n και R_n η αριθμητική εκτίμηση και το αντίστοιχο σφάλμα με τον κανόνα του τραπεζίου σε n υποδιαστήματα του ολοκληρώματος I διαιρώντας το αρχικό διάστημα $\left[a,b\right]$. Θεωρώντας ότι $I^* = I_n + R_n$ είναι η ακριβής τιμή του ολοκληρώματος, αποδείξτε ότι

$$I^* = I_{n1} + \frac{I_{n2} - I_{n1}}{1-\left(n1/n2\right)^2}$$

όπου $n1$ και $n2$ είναι δύο τιμές του n.

$$\frac{R_{n1}}{R_{n2}} \simeq \left(\frac{n2}{n1}\right)^2 \Rightarrow R_{n2} \simeq R_{n1}\left(\frac{n1}{n2}\right)^2$$

$$I^* = I_{n1} + R_{n1} = I_{n2} + R_{n2} \Rightarrow I_{n1} + R_{n1} = I_{n2} + R_{n1}\left(\frac{n1}{n2}\right)^2 \Rightarrow R_{n1}\left[1-\left(\frac{n1}{n2}\right)^2\right] = I_{n2} - I_{n1} \Rightarrow R_{n1} = \frac{I_{n2} - I_{n1}}{\left[1-\left(n1/n2\right)^2\right]}$$

$$I^* = I_{n1} + R_{n1} = I_{n1} + \frac{I_{n2} - I_{n1}}{\left[1-\left(n1/n2\right)^2\right]}$$

Γ) Επίσης εφαρμόστε τη σχέση για το I^* αξιοποιώντας τα παραπάνω αποτελέσματα αριθμητικής ολοκλήρωσης τραπεζίου 1 και 2 φορές και υπολογίστε τη νέα βελτιωμένη εκτίμηση I^*. Σχολιάστε το αποτέλεσμα.

$$I^* = I_{n1} + \frac{I_{n2} - I_{n1}}{1-\left(n1/n2\right)^2} = 26 + \frac{22-26}{1-\left(1/2\right)^2} = 20.666....$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις για I_{n1} και I_{n2} προκύπτει ο 1$^{\text{ο}}$ κανόνας Simpson:

$$I^* = I_{n1} + \frac{I_{n2} - I_{n1}}{1-\left(n1/n2\right)^2} = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right) + \frac{\frac{h/2}{2}\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right) - \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right)}{\frac{3}{4}} = \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1\right) - \frac{h}{3}\left(f_0 - 2f_1 + f_2\right) = \frac{h/2}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$

11. Υποθέστε ότι οι παράγωγοι $f'(x_0)$ και $f'(x_1)$ είναι γνωστές και αποδείξτε τον βελτιωμένο κανόνα του τραπεζίου:

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

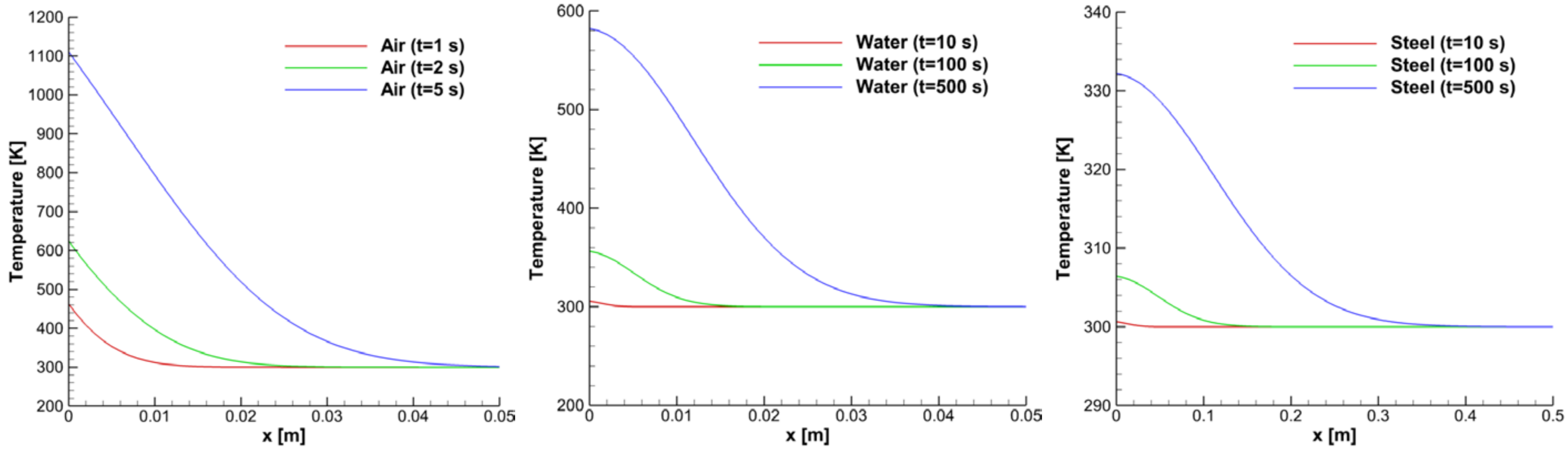
12. Έστω ημιάπειρο χωρίο με συντελεστές θερμικής αγωγής και διάχυσης k και α αντίστοιχα που αρχικά ($t=0$) βρίσκεται σε θερμοκρασία T_0. Στη συνέχεια, για $t>0$ η επιφάνεια $x=0$ δέχεται σταθερή θερμορροή q.
Αποδεικνύεται ότι η χρονομεταβαλλόμενη θερμοκρασιακή κατανομή στο ημιάπειρο χωρίο δίδεται από τη σχέση:

$$T(t,x)=T_0+\frac{q}{k}\left[2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}t}\exp\left(-\frac{x^2}{4\alpha t}\right)-x\,\mathrm{erfc}\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right] \quad \text{όπου} \quad \mathrm{erfc}(s)=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^s e^{-y^2}dy$$

Γράψτε κώδικα που με βάση την παραπάνω έκφραση να υπολογίζει για γνωστές τιμές των παραμέτρων k, α, q και T_0 τον απαιτούμενο χρόνο t ώστε σε κάποια γνωστή απόσταση x η θερμοκρασία να έχει τη προδιαγεγραμμένη τιμή T^*.

Ιδιότητες αέρα, νερού και χάλυβα:

	$\rho\left[\mathrm{K}g/m^3\right]$	$c_p\left[J/(KgK)\right]$	$k\left[W/(mK)\right]$	$a\left[m^2/s\right]$
Air	1.177	1005	0.0262	2.215E-05
Water	996	4180	0.615	1.477E-07
Steel	7830	500	50.2	1.282E-05



Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων άσκησης 12: Κατανομή θερμοκρασίας για αέρα, νερό και χάλυβα για $q = 800\ \mathrm{W/m^2}$ και διάφορους χρόνους t.

13. Εφαρμόστε αριθμητική παρεμβολή με ορθογώνια πολυώνυμα Legendre και προσεγγίστε τη συνάρτηση $f(x) = \dfrac{2x^3+1}{3+e^x}\sin x$ στο διάστημα $[-1,1]$.

Βήματα επίλυσης:

α) σχεδιάζεται η συνάρτηση $f(x)$ στο διάστημα $[-1,1]$,

β) επιλέγεται η τάξη του πολυωνύμου παρεμβολής $\Pi_m(x) = c_0P_0 + c_1P_1 + \ldots + c_mP_m$, όπου P_i, $i = 0,1,..,m$ τα πολυώνυμα Legendre,

γ) επιλέγονται οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre P_n, $n \geq m+1$ ως τα σημεία παρεμβολής $x_1,\ldots,x_n$,

δ) υπολογίζονται οι αντίστοιχες τιμές $f_1,\ldots,f_n$,

δ) υπολογίζονται οι συντελεστές c_i, $i = 0,1,..,m$,

ε) σχεδιάζεται το πολυώνυμο παρεμβολής και σχολιάζεται η σύγκριση ανάμεσα στο πολυώνυμο παρεμβολής και τη συνάρτηση $f(x)$.