

ΑΝΤΩΝΙΟΥ Ν. ΑΝΔΡΙΩΤΗ

# ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

(Β' έκδοση)

Κεφάλαιο Πρώτο

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΡΩΤΟ

### Βασικές πράξεις της αριθμητικής ανάλυσης

Θα ξεκινήσουμε τα μαθήματα της Υπολογιστικής Φυσικής θυμίζοντας τις βασικές πράξεις της αριθμητικής ανάλυσης, όπως της παραγωγής, της ολοκλήρωσης και της εύρεσης των ριζών ενός πολυωνύμου, που πολύ συχνά θα χρειαστούμε στα επόμενα μαθήματα. Δεν θα επεκταθούμε πολύ σε λεπτομέρειες της αριθμητικής ανάλυσης. Θα προσπαθήσουμε όμως με εύκολα παραδείγματα να κατανοήσουμε τις βασικές αρχές του προγραμματισμού και της αριθμητικής λύσης. Θα επικεντρώσουμε, κυρίως, την προσοχή μας στον έλεγχο του αριθμητικού λάθους της λύσης μας. Είναι πολύ ουσιαστικό να εντοπίζουμε τις πηγές των σφαλμάτων μιας αριθμητικής λύσης και να γνωρίζουμε τους χειρισμούς, που μπορούμε να κάνουμε για να τις ελέγξουμε. Συγχρόνως, θα αναφερθούμε στις δυνατότητες των νέων υπολογιστικών συστημάτων, στη σωστή εκμετάλλευσή τους, καθώς και στην χρήση διαφόρων λογισμικών για γραφική επεξεργασία.

Ιεραρχώντας τις δυσκολίες, θα ξεκινήσουμε από την εύρεση των ριζών ενός πολυωνύμου και την λύση γραμμικών συστημάτων. Θα επιμείνουμε στην αυτοσυμβιβαστή λύση των γραμμικών συστημάτων σαν εισαγωγή στις αυτοσυμβιβαστές λύσεις της εξίσωσης του Schrodinger για άτομα, μόρια και στερεά. Θα προχωρήσουμε με την ολοκλήρωση και την αριθμητική παραγωγή. Πρέπει να σημειώσουμε από την αρχή, ότι στην αριθμητική ανάλυση, η παραγωγή είναι η δύσκολη πράξη, ενώ η ολοκλήρωση είναι η ευκολότερη. Τούτο θα φανεί και στις ασκήσεις του κεφαλαίου αυτού. Τέλος, θα περιγράψουμε τους πιο απλούς αλγόριθμους λύσεως της εξίσωσης κίνησης του Νεύτωνα, τους οποίους και θα χρησιμοποιήσουμε για την λύση απλών προβλημάτων στο δεύτερο κεφάλαιο.

#### Βιβλιογραφία

- F. Scheid, “Theory and Problems of Numerical Analysis”
- Σ. Περσίδα και Χ. Βάρβογλη, «Αριθμητική Ανάλυση με εφαρμογές στη φυσική» (Βλέπε πίνακα βιβλιογραφίας στις πρώτες σελίδες του βιβλίου).

### 1.1 ΕΥΡΕΣΗ ΤΩΝ ΡΙΖΩΝ ΕΝΟΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ

Στην παράγραφο αυτή θα θυμίσουμε δύο τρόπους εύρεσης των ριζών μιας συνάρτησης  $f(x)$ .

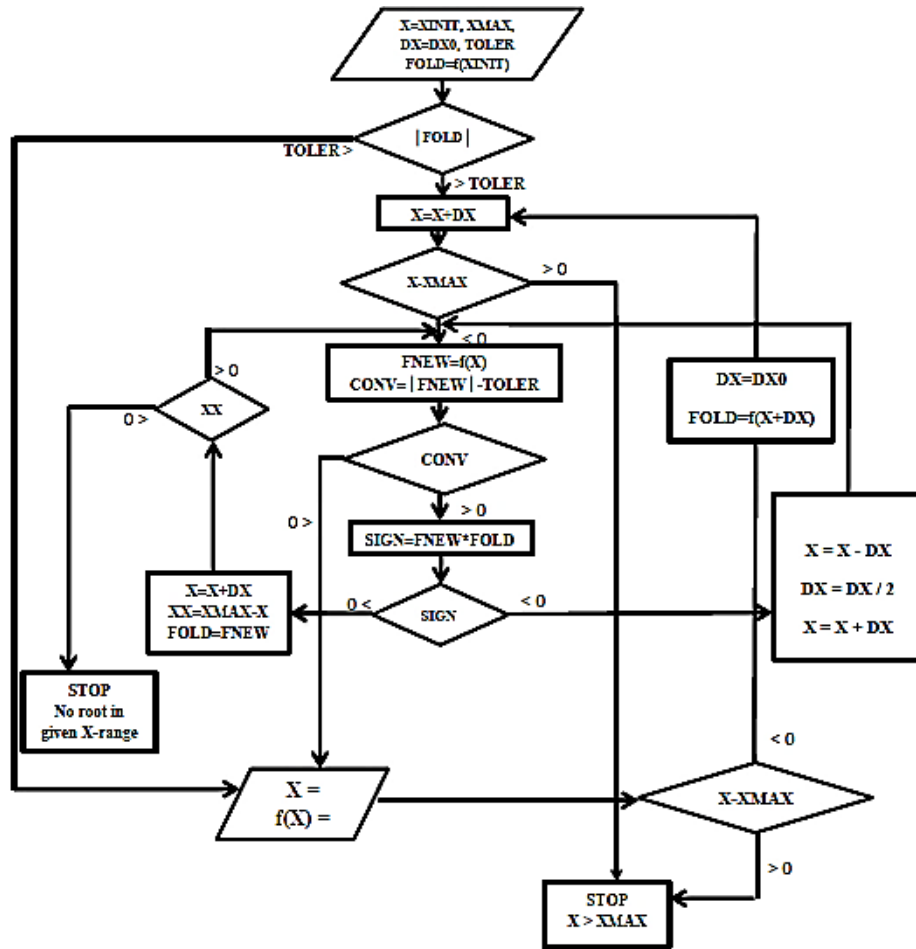
#### 1.1.1 Εύρεση περιοχών στις οποίες η $f(x)$ αλλάζει πρόσημο

Με τον τρόπο αυτό, προσπαθούμε να βρούμε ένα σημείο στη γειτονιά του οποίου η  $f(x)$  αλλάζει πρόσημο. Η διαδικασία είναι η εξής: Θεωρούμε ένα διάστημα  $[x_{\min}, x_{\max}]$  της μεταβλητής  $x$ , το οποίο και σαρώνουμε με βήμα  $dx$ . Σε κάθε βήμα  $x_j$  της σάρωσης, όπου  $x_j = x_{\min} + (j-1)dx$ , βρίσκουμε την τιμή  $f(x_j)$ . Σαρώνουμε μέχρις ότου η  $f(x)$  παρουσιάσει αλλαγή προσημού, δηλαδή, αν για δύο διαδοχικά σημεία  $x_N$  και  $x_{N+1}$ , ισχύει  $f(x_N)f(x_{N+1}) < 0$ . Μ' αυτό το τρόπο, προσδιορίζεται η περιοχή  $[x_N, x_{N+1}]$  στην οποία υπάρχει μία ρίζα της  $f(x)$ , την οποία και μπορούμε να βρούμε, δηλαδή να βρούμε το σημείο για το οποίο  $f(x)=0$ . Για τον ακριβή προσδιορισμό της ρίζας του πολυωνύμου, ο συνηθισμένος τρόπος είναι να υποδιπλασιάσουμε το βήμα σάρωσης  $dx$  και να σαρώσουμε το διάστημα  $[x_N, x_{N+1}]$  μέχρις ότου βρούμε ένα σημείο  $x_k$  στην περιοχή του οποίου  $f(x_k)f(x_{k+1}) < 0$ . Συνεχίζουμε, υποδιπλασιάζοντας το βήμα

σάρωσης και σαρώνουμε το διάστημα  $[x_k, x_{k+1}]$  μέχρις ότου βρούμε πάλι αλλαγή προσήμου στην  $f(x)$  κ.ο.κ. Η διαδικασία αυτή συνεχίζεται μέχρις ότου βρούμε την ρίζα της  $f(x)$  με την επιθυμητή ακρίβεια.

Πρέπει να προσέξουμε όμως, η τιμή του βήματος σάρωσης να είναι συμβατή με την ακρίβεια της λύσεως που επιδιώκουμε. Δηλαδή, η τιμή του βήματος σάρωσης να δώσει μεταβολή στην τιμή της συνάρτησης μικρότερη της τιμής της «ανοχής» σύγκλισης. Στην αντίθετη περίπτωση, το πρόγραμμά μας (η λύση μας) θα μπει σ' ένα ατέρμονα κύκλο επαναλήψεων χωρίς φυσικά να συγκλίνει.

Στην Εικ. 1.1, βλέπετε ένα διάγραμμα ροής που χρησιμοποιούμε για τον προγραμματισμό του προβλήματος της εύρεσης των ριζών ενός πολυωνύμου σύμφωνα με τον τρόπο που αναπτύξαμε στα πιο πάνω.



Εικ.1.1 Διάγραμμα ροής αριθμητικής λύσεως για την εύρεση των ριζών ενός πολυώνυμου εντοπίζοντας περιοχές του πεδίου ορισμού του στις οποίες το πολυώνυμο αλλάζει πρόσημο.

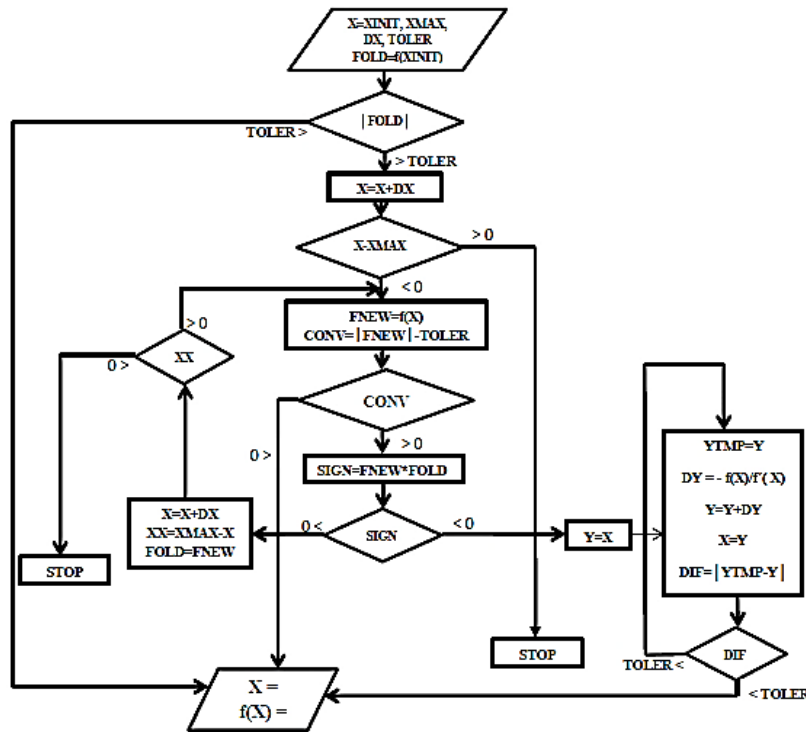
### 1.1.2 Μέθοδος των Newton-Raphson

Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται όταν γνωρίζουμε την (αναλυτική) έκφραση της συνάρτησης,  $f(x)$ , και της πρώτης παραγώγου της,  $f'(x)$ . Υποθέτοντας ότι για κάποιο  $x_0$  ισχύει  $f(x_0)=0$ , μπορούμε προσεγγιστικά να γράψουμε:

$$f(x_0) \approx f(x_j) + \Delta x_j \cdot f'(x_j) \quad (1.1.1)$$

και να προσδιορίσουμε το βήμα σάρωσης  $\Delta x_j$  στην περιοχή (γειτονιά) του  $x_j$  :

$$\Delta x_j = -\frac{f(x_j)}{f'(x_j)}, \quad f'(x_j) \neq 0. \quad (1.1.2)$$



Εικ.1.2 Διάγραμμα ροής αριθμητικής λύσεως εύρεσης των ριζών ενός πολυωνύμου με την μέθοδο των Newton-Raphson.

Για να εντοπίσουμε αριθμητικά μια ρίζα της συνάρτησης  $f(x)$  με την μέθοδο των Newton-Raphson, σαρώνουμε ένα διάστημα τιμών  $[x_a, x_b]$  (γύρω από μια προσδοκώμενη λύση στο διάστημα αυτό) με βήμα σάρωσης  $\Delta x_j$  μεταβαίνοντας από το σημείο  $x_j$  στο  $x_{j+1}$  μέχρις ότου διαπιστώσουμε, ότι κάθε περαιτέρω βήμα συνεχίζει να μας δίνει ένα σταθερό αποτέλεσμα  $x_0$ . Τότε λέμε ότι το

$$\lim_{j \rightarrow \infty} x_j = x_0$$

είναι η ρίζα της συνάρτησης  $f(x)$  που μελετάμε. Για τους περιορισμούς και τις δυνατότητες των δύο μεθόδων που αναπτύξαμε πιο πάνω, μπορεί ο κάθε ενδιαφερόμενος να συμβουλευθεί ένα οποιοδήποτε βιβλίο αριθμητικής ανάλυσης.

Στην Εικ. 1.2, σκιαγραφούμε το διάγραμμα ροής (flow chart) μιας λύσης που χρησιμοποιεί την μέθοδο εντοπισμού αλλαγής προσήμου της συνάρτησης  $f(x)$  για να προσεγγίσει μία λύση της και στη συνέχεια εφαρμόζει τον αλγόριθμο των Newton-Raphson για να υπολογίσει την ρίζα της  $f(x)$  με μεγαλύτερη ακρίβεια. Στο Πρόγραμμα Newton-Raphson (το παραθέτουμε στο τέλος του κεφαλαίου αυτού, §1Π.1) εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο της Εικ. 1.2 για τον προσδιορισμό της τετραγωνικής ρίζας του αριθμού 19, που την προσεγγίζουμε σαν ρίζα της εξίσωσης:  $f(x)=x^2-19=0$ .

## 1.2 ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΛΥΣΕΩΣ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ: ΕΜΜΕΣΕΣ Ή ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Στο κεφάλαιο αυτό συμπεριλάβαμε δύο γνωστές μεθόδους αριθμητικής επίλυσης γραμμικών συστημάτων. Ειδικότερα θα περιγράψουμε εν συντομία την μέθοδο του Jacobi και την μέθοδο των Gauss-Seidel.

Αμφότερες οι μέθοδοι στοχεύουν στην εύρεση μιας ακολουθίας λύσεων  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  του συστήματος N-εξισώσεων

$$A\mathbf{x} = \mathbf{B}, \quad (1.2.1)$$

που συγκλίνει στην ζητούμενη λύση του συστήματος (1.2.1). Πιο συγκεκριμένα, οι επαναληπτικές μέθοδοι λύσης προσπαθούν να γράψουν μια προσέγγιση της λύσεως υπό τη μορφή

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = F(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (1.2.2)$$

και να επιτύχουν την σύγκλιση της σειράς  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  και την εύρεση του ορίου

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}, \quad (1.2.3)$$

που αποτελεί και την λύση της (1.2.1). Ο επαναληπτικός αυτός τρόπος επίλυσης εισαγάγει και στην ιδέα της αυτοσυμβιβαστής (self consistent) λύσεως που θα συναντήσουμε σε πολλούς αλγορίθμους λύσεων των προβλημάτων Φυσικής στα παρακάτω κεφάλαια.

### 1.2.1 Μέθοδος Jacobi

Σύμφωνα με την μέθοδο Jacobi, ο πίνακας,  $A$ , των συντελεστών της εξίσ. (1.2.1), γράφεται σαν άθροισμα δύο πινάκων  $C$  και  $D$  με την συνθήκη ο  $D$  να είναι διαγώνιος, δηλαδή

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} = C + D =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & 0 & \cdots & a_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}.$$

Έτσι, η (1.2.1) γράφεται:

$$A\mathbf{x} = (C+D)\mathbf{x} = \mathbf{B},$$

από την οποία παίρνουμε,

$$\mathbf{x} = D^{-1}(\mathbf{B} - C\mathbf{x}). \quad (1.2.4)$$

Αναλυτικότερα, η (1.2.4) παίρνει τη μορφή

$$x_i = -\frac{1}{a_{ii}} \left[ \sum_{j=1, j \neq i}^N a_{ij} x_j - b_i \right] \quad (1.2.5)$$

και είτε στη μορφή της (1.2.5) είτε στην μορφή της (1.2.4) χρησιμοποιείται στην θέση της (1.2.2) για μια επαναληπτική λύση (βλ. άσκηση Α1.20).

### 1.2.2 Μέθοδος των Gauss-Seidel

Κατά την μέθοδο αυτή, ο πίνακας  $A$  της (1.2.1) διασπάται κατά μοναδικό τρόπο σε τρεις πίνακες, τους  $L$ ,  $D$  και  $U$  από τους οποίους ο  $D$  περιέχει μόνο τα διαγώνια στοιχεία του  $A$ , ο  $L$  τα στοιχεία του  $A$  κάτω από την διαγώνιο του και ο  $U$  τα στοιχεία του  $A$  πάνω από την διαγώνιο του, δηλαδή

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Έτσι, η (1.2.1) παίρνει τη μορφή:

$$(D+L+U)\mathbf{x} = \mathbf{B}$$

ή

$$\mathbf{x} = D^{-1}(B - L\mathbf{x} - U\mathbf{x}). \quad (1.2.6)$$

Για να χρησιμοποιηθεί η (1.2.6) σε μία επαναληπτική λύση, οι Gauss και Seidel την γράφουν ως εξής:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = D^{-1}(B - L\mathbf{x}^{(k+1)} - U\mathbf{x}^{(k)}), \quad (1.2.7)$$

που χρησιμοποιείται στη θέση της (1.2.2).

Για την κατανόηση της μεθόδου των Gauss-Seidel περιγράψουμε αναλυτικότερα το σχήμα λύσης που περιγράφει η (1.2.7).

Έστω η προσεγγιστική λύση  $\mathbf{x}^{(k)}$ . Από την πρώτη εξίσωση του συστήματος (1.2.7) έχουμε:

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left( b_1 - \sum_{j=2}^N a_{1j} x_j^{(k)} \right). \quad (1.2.8)$$

Από την δεύτερη εξίσωση της (1.2.7) έχουμε:

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left( b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - \sum_{j=3}^N a_{2j} x_j^{(k)} \right) \quad (1.2.9)$$

και τέλος από την  $i$ -εξίσωση της (1.2.7), παίρνουμε το επαναληπτικό σχήμα:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (1.2.10)$$

### 1.3 ΕΥΡΕΣΗ ΣΥΜΠΤΩΤΙΚΟΥ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΚΑΙ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ

Συνήθως στη Φυσική έχουμε την πληροφορία για ένα φαινόμενο είτε από πειραματικά δεδομένα είτε από κάποια αριθμητική λύση με μορφή ενός συνόλου στοιχείων δεδομένων  $(x_i, y_i)$ ,  $i=1, \dots, N$ . Το σύνολο των δεδομένων αυτών λέγουμε ότι ορίζουν μια διακριτή συνάρτηση.

Στην διαδικασία αξιολόγησης των δεδομένων αυτών, όταν δηλαδή τα δεδομένα αυτά παραλληλίζονται με αποτελέσματα διαφόρων θεωρητικών προτύπων (μοντέλων), πολλές φορές απαιτείται η εύρεση μιας συνεχούς συνάρτησης  $p(x)$ , που για το δοσμένο σύνολο  $(x_i, y_i)$  (collocation points) ικανοποιεί την αντιστοιχία:

$$(x_i, y_i) \rightarrow (x_i, p(x_i)). \quad (1.3.1)$$

Στην αριθμητική ανάλυση έχουν αναπτυχθεί εδώ και πολλά χρόνια οι τεχνικές, που μας βοηθούν να βρούμε την συνάρτηση  $p(x)$  υπό μορφή ενός πολυώνυμου, που ονομάζουμε συμπτωτικό πολυώνυμο (collocation polynomial). Υπενθυμίζουμε, ότι η αληθινή (πραγματική) συνάρτηση  $F(x)$  που περιγράφει το σύνολο των δεδομένων μας, δεν είναι το πολυώνυμο  $p(x)$  που βρίσκουμε. Παρ' όλα αυτά, είναι δυνατόν το σφάλμα αποκοπής

$$\delta(x) = F(x) - p(x) \quad (1.3.2)$$

να γίνει πολύ μικρό κατ' απόλυτο τιμή (στο διάστημα τιμών της  $p(x)$ ) και η  $p(x)$  να αποτελεί μια πολύ καλή προσέγγιση της πραγματικής συνάρτησης  $F(x)$ . Η δυσκολία στην αριθμητική παραγωγή εντοπίζεται στο γεγονός ότι, ενώ το σφάλμα  $\delta(x)$  μπορεί να γίνει αρκετά μικρό, η αντίστοιχη απόλυτη τιμή του σφάλματος της παραγώγου

$$\delta'(x) = F'(x) - p'(x), \quad (1.3.3)$$

δεν είναι δυνατόν πολλές φορές να ελαχιστοποιηθεί. Γι' αυτό και η αριθμητική παραγωγή παρουσιάζεται σαν δυσκολότερη αριθμητική πράξη συγκρινόμενη με την αριθμητική ολοκλήρωση.

Στην περίπτωση που ο αριθμός των δεδομένων είναι πολύ μεγάλος, η προσέγγιση των δεδομένων μας με ένα συμπτωτικό πολυώνυμο δεν είναι ούτε εφικτή αλλά και ούτε πρακτική λόγω των πολλών διακυμάνσεων που παρουσιάζει το συμπτωτικό πολυώνυμο. Στην περίπτωση αυτή, προσεγγίζουμε τα δεδομένα μας με ένα "πολυώνυμο προσέγγισης", που μας επιτρέπει την "εξομάλυνση" των δεδομένων και ένα ακριβέστερο τρόπο υπολογισμού της παραγώγου της συναρτήσεως, αυτής που προσεγγίζει τα δεδομένα μας.

Στις επόμενες παραγράφους, θα αναφερθούμε στους βασικότερους τρόπους εύρεσης του συμπτωτικού πολυώνυμου, καθώς και στην προσέγγιση δεδομένων με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Θα



προχωρήσουμε με τις μεθόδους αριθμητικής παραγωγίσης και ολοκλήρωσης, και θα κλείσουμε την παράγραφο αυτή με απλές εφαρμογές.

### 1.3.1 Εύρεση συμπτωτικού πολυώνυμου με την βοήθεια λύσης γραμμικών συστημάτων

Υποθέτουμε ότι μας δίδονται  $(N+1)$  ζεύγη δεδομένων (σημείων)  $(x_i, y_i)$ ,  $i=0,1,\dots,N$  του πεδίου ορισμού και τιμών μιας υποκείμενης πραγματικής συνάρτησης  $F(x)$ , την οποία και δεν γνωρίζουμε. Προσπαθούμε όμως να την προσεγγίσουμε με ένα συμπτωτικό πολυώνυμο  $p(x)$ , το οποίο να συμπίπτει με την πραγματική συνάρτηση  $F(x)$  στα δοσμένα σημεία  $x_i$ , δηλαδή

$$y_i = p(x_i) = F(x_i), \quad i = 0,1,2, \dots, N. \quad (1.3.4)$$

Υποθέτουμε ότι τα  $x_i$ ,  $i=0,1,2,\dots,N$  είναι διαφορετικά μεταξύ τους. Από την γενική μορφή ενός πολυώνυμου,  $p_N(x)$ ,  $N$ -βαθμού,

$$p_N(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_N x^N, \quad (1.3.5)$$

παρατηρούμε, ότι για να βρούμε τους συντελεστές  $a_0, a_1, \dots, a_N$  χρειαζόμαστε  $(N+1)$  εξισώσεις. Είναι προφανές, ότι αυτές οι εξισώσεις δίδονται από την (1.3.4) και έτσι, ο προσδιορισμός των συντελεστών  $a_0, a_1, \dots, a_N$  καταλήγει να είναι ο προσδιορισμός της λύσης του γραμμικού συστήματος

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$$

όπου

$$A = \begin{pmatrix} x_0^N & x_0^{N-1} & \dots & x_0 & 1 \\ x_1^N & x_1^{N-1} & \dots & x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_N^N & x_N^{N-1} & \dots & x_N & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.3.6)$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} a_N \\ a_{N-1} \\ \vdots \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}. \quad (1.3.7)$$

Μπορεί ναδειχθεί, ότι η ορίζουσα του πίνακα  $A$  είναι διάφορη του μηδενός, πράγμα που μας εξασφαλίζει την μοναδικότητα της λύσεως και την δυνατότητα να μπορούμε να λύσουμε το σύστημα (1.2.1) χρησιμοποιώντας είτε τις αναλυτικές είτε τις αριθμητικές μεθόδους. Οι τελευταίες αφορούν όχι μόνο τις μεθόδους που αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο (εύρεση ριζών πολυώνυμου) αλλά και αυτές που βασίζονται σε αλγορίθμους αριθμητικού υπολογισμού οριζουσών (π.χ. μέθοδος Cramer, Gaussian elimination, κλπ).

#### Παράδειγμα:

Βρείτε το πολυώνυμο τρίτου βαθμού το οποίο για  $x_0=0$ ,  $x_1=1$ ,  $x_2=2$  και  $x_3=3$ , παίρνει αντίστοιχα τις τιμές:  $y_0=5$ ,  $y_1=12$ ,  $y_2=29$  και  $y_3=62$ .

Λύση: Το ζητούμενο πολυώνυμο είναι της μορφής

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3.$$

Σύμφωνα με την θεωρία της § 1.3.1 (βλ. εξίσ. (1.3.6)),

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 3 & 9 & 27 \end{pmatrix}$$

και έχουμε να λύσουμε το σύστημα:

$$A \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 12 \\ 29 \\ 62 \end{pmatrix},$$

το οποίο έχει τη λύση:  $a_0=5$ ,  $a_1=4$ ,  $a_2=2$  και  $a_3=1$ . Η λύση αυτή βρίσκεται εύκολα με αναλυτικές μεθόδους. Είναι όμως το παράδειγμα αυτό μια καλή αρχή, για να αρχίσουμε να εφαρμόζουμε τις αριθμητικές μεθόδους. Για παράδειγμα, μπορούμε να βρούμε τη λύση βρίσκοντας αριθμητικά τις ρίζες του πολυωνύμου  $p(x)$ , ή γράφοντας ένα πρόγραμμα υπολογισμού ορίζοντας και εφαρμόζοντας τη μέθοδο Cramer.

### 1.3.2 Εύρεση του συμπτωτικού πολυωνύμου με την μέθοδο Lagrange

Η μέθοδος του Lagrange βασίζεται στην παρατήρηση ότι οι συντελεστές  $a_0, a_1, a_2, \dots, a_N$  του συστήματος (1.2.1) είναι γραμμικές συναρτήσεις των  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_N$ , δηλαδή,

$$p(x) = \sum_{i=0}^N L_i(x) y_i \quad (1.3.8)$$

με

$$L_i(x_k) = \delta_{ik} = \begin{cases} 0 & x_k \neq x_i \\ 1 & x_k = x_i \end{cases}. \quad (1.3.9)$$

Αυτές οι συνθήκες μας δίδουν τους συντελεστές Lagrange,  $L_i(x)$ , όπως ονομάζονται, με την μορφή

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_N)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_N)}. \quad (1.3.10)$$

Σημειώνουμε ότι η μέθοδος Lagrange χρησιμοποιείται συνήθως όταν τα  $x_i$  δεν ισαπέχουν μεταξύ τους, σε αντίθεση με την μέθοδο Newton που θα περιγράψουμε στην επόμενη παράγραφο.

Για την κατανόηση της μεθόδου Lagrange, παραθέτουμε ένα απλό παράδειγμα.

#### Παράδειγμα:

Να προσδιορισθεί με τη μέθοδο Lagrange το συμπτωτικό πολυώνυμο 3<sup>ου</sup> βαθμού που για  $x_0=1$ ,  $x_1=2$ ,  $x_2=4$  και  $x_3=5.5$ , παίρνει αντίστοιχα τις τιμές:  $y_0=7$ ,  $y_1=4$ ,  $y_2=46$  και  $y_3=166.75$ .

Λύση: Λόγω του ότι τα  $x_i$  δεν ισαπέχουν, χρησιμοποιούμε την μέθοδο Lagrange:

$$p(x) = \sum_{i=0}^3 L_i(x) y_i$$

Υπολογίζουμε τους συντελεστές  $L_i(x)$  σύμφωνα με την εξίσωση (1.3.10), ήτοι:

$$L_0(x) = \frac{(x-2)(x-4)(x-5.5)}{(1-2)(1-4)(1-5.5)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-4)(x-5.5)}{(2-1)(2-4)(2-5.5)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-5.5)}{(4-1)(4-2)(4-5.5)}$$

$$L_3(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-4)}{(5.5-1)(5.5-2)(5.5-4)}$$

και ύστερα από κάποια απλή άλγεβρα βρίσκουμε:

$$p(x) = 2x^3 - 6x^2 + x + 10.$$

### **Υπόδειξη προγραμματισμού της μεθόδου Lagrange:**

```
subroutine lagrange (xtemp, x, f, n, k)    ! xtemp = given point
dimension x(n)
f=1.    ! f is the k-th Lagrange coefficient fitted to x(j), j=1,...,n at xtemp
do j=1,n
if(j .ne. k) then
f = f * (xtemp - x(j)) / (x(k) - x(j))
endif
enddo
return
end
```

### **1.3.3 Εύρεση του συμπτωτικού πολυωνύμου με την μέθοδο Newton προς τα εμπρός (Newton's forward method)**

Ένας παλιός και ευρύτατα διαδεδομένος τρόπος εύρεσης του συμπτωτικού πολυωνύμου  $p(x)$  βασίζεται στην θεωρία των πεπερασμένων διαφορών. Κατά την θεωρία αυτή, θεωρούμε ότι για την διακριτή συνάρτηση  $(x_k, y_k)$ ,  $k=0,1,2,\dots,n$ , ισχύει

$$x_{k+1} - x_k = h \quad \forall k. \quad (1.3.11)$$

Ορίζουμε τις διαφορές:

$$\begin{aligned} \Delta y_k &= \Delta^{(1)} y_k = y_{k+1} - y_k \\ \Delta^{(2)} y_k &= \Delta^{(1)} y_{k+1} - \Delta^{(1)} y_k \end{aligned} \quad (1.3.12)$$

$$\Delta^{(n)}y_k = \Delta^{(n-1)}y_{k+1} - \Delta^{(n-1)}y_k.$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι

$$\Delta^{(k)}y_0 = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} y_{k-i} \tag{1.3.13}$$

όπου  $\Delta^{(0)}y_k = y_k$  και

$$\binom{k}{i} = \frac{k!}{i!(k-i)!}, \quad k > i. \tag{1.3.14}$$

Βάσει των πεπερασμένων διαφορών  $\Delta^{(n)}y_k$ , που ορίσαμε στους πιο πάνω τύπους (1.3.11), (1.3.12), ένα συμπτωτικό πολυώνυμο  $p(x)$ , n-βαθμού ως προς x, μπορεί να βρεθεί με διαφορετικούς τρόπους. Ένας από αυτούς είναι η μέθοδος του Newton, την οποία παραθέτουμε αμέσως παρακάτω.

$$p_k = \sum_{i=0}^n \binom{k}{i} \Delta^{(i)}y_0 \tag{1.3.15}$$

ή ισοδύναμα

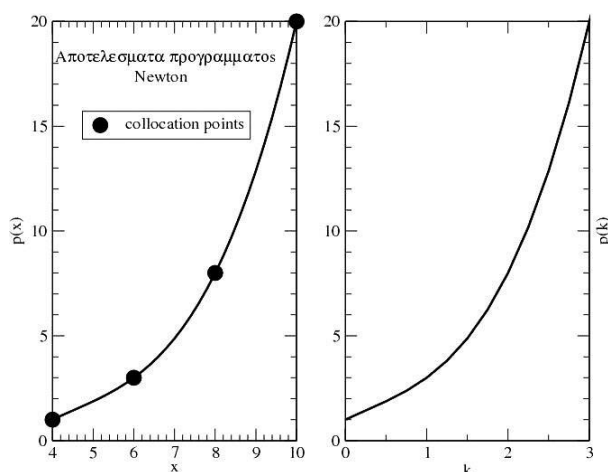
$$p(x_k) = y_0 + \frac{\Delta^{(1)}y_0}{h}(x_k - x_0) + \frac{\Delta^{(2)}y_0}{2!h^2}(x_k - x_0)(x_k - x_1) + \dots$$

$$\dots + \frac{\Delta^{(n)}y_0}{n!h^n}(x_k - x_0)(x_k - x_1)\dots(x_k - x_{n-1}). \tag{1.3.16}$$

Το πολυώνυμο n-βαθμού που βρίσκουμε από τον τύπο (1.3.15) ή (1.3.16), συμπίπτει με (n+1) τιμές  $y_k$  της διακριτής συνάρτησης που θεωρήσαμε και ειδικότερα της  $p(x_k)=y_k, k=0,1,\dots,n$ .

Με το πρόγραμμα newton, που παραθέτουμε στο τέλος του κεφαλαίου αυτού, §1Π.2, υπολογίζουμε το συμπτωτικό πολυώνυμο με την μέθοδο του Newton (προς τα εμπρός). Σαν παράδειγμα, χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα αυτό για να βρούμε το συμπτωτικό πολυώνυμο, που καθορίζεται από τα συμπτωτικά σημεία του παρακάτω πίνακα. Στην Εικ. 1.3 παραθέτουμε τα αποτελέσματα του υπολογισμού.

<b>Δεδομένα εισόδου προγράμματος newton (συμπτωτικά σημεία)</b>	
<b><math>x_k</math></b>	<b><math>p(x_k)=y_k</math></b>
4.0	1.0
6.0	3.0
8.0	8.0
10.0	20.0



Εικ.1.3 Γραφική παράσταση των δεδομένων εξόδου του προγράμματος newton. Στο αριστερό γράφημα δείχνονται τα συμπτωτικά σημεία (μαύροι κύκλοι) και το συμπτωτικό πολυώνυμο  $p(x)$  (συνεχής καμπύλη). Στο δεξιό γράφημα δείχνουμε το πολυώνυμο  $p_k$ .

### 1.3.4 Περιγραφή δεδομένων με πολυώνυμο προσέγγισης: Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων

Στις παραγράφους 1.3.1-1.3.3 γνωρίσαμε μεθόδους προσδιορισμού ενός συμπτωτικού πολυωνύμου  $p(x)$  που ικανοποιεί τη σχέση  $p(x_n)=y_n$ , δηλαδή ταυτίζεται με ένα σύνολο δεδομένων εισόδου  $y_n$  στα σημεία  $x_n$ ,  $n=0,1,\dots,N$ . Πολλές φορές όμως, είτε γιατί τα δεδομένα είναι πάρα πολλά ( $N>20$ ) είτε γιατί οι τιμές των  $y_n$  δεν είναι ακριβείς είτε γιατί ορίζονται μέσα σε μια ευρεία ζώνη τιμών, είναι πρακτικότερο να προσδιορίσουμε όχι πια ένα συμπτωτικό πολυώνυμο αλλά ένα πολυώνυμο,  $\varphi(x)$ , που να προσεγγίζει το σύνολο των δεδομένων μας κατά το δυνατόν καλλίτερα. Με άλλα λόγια, προσπαθούμε να βρούμε ένα πολυώνυμο  $\varphi(x)$ , που θα αναπαραγάγει τα δεδομένα μας με το μικρότερο σφάλμα.

Ένα κριτήριο αυτού του σφάλματος είναι το άθροισμα

$$A = \sum_{i=0}^N [y_i - \varphi(x_i)]^2 \quad (1.3.17)$$

να παίρνει την ελάχιστη δυνατή τιμή. Ο προσδιορισμός του πολυωνύμου  $\varphi(x)$ , που μας εξασφαλίζει την ελάχιστη τιμή του αθροίσματος  $A$  της (1.3.17), αποτελεί τον πυρήνα της μεθόδου, που είναι γνωστή σαν μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων. Τα βήματα που ακολουθούμε για τον προσδιορισμό του πολυωνύμου  $\varphi(x)$  είναι τα εξής:

Πρώτα, από την μορφή της κατανομής των δεδομένων μας υποθέτουμε τον πιθανό βαθμό του πολυωνύμου  $\varphi(x)$ . Αν για παράδειγμα, τα δεδομένα μας παρουσιάζουν μια κατανομή κατά μήκος μιας νοητής ευθείας, τότε το πολυώνυμο  $\varphi(x)$  πρέπει να προσεγγίζει την ευθεία αυτή και επομένως το πολυώνυμο είναι πρώτου βαθμού. Αν πάλι, η κατανομή των δεδομένων μας θυμίζει καμπύλη γραμμή, τότε το πολυώνυμο που ζητούμε είναι δευτέρου ή μεγαλύτερου βαθμού. Έστω ότι το πολυώνυμο  $\varphi(x)$  είναι  $m$ -βαθμού, δηλαδή

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m. \quad (1.3.18)$$

Αντικαθιστούμε την (1.3.18) στην (1.3.17), οπότε παίρνουμε

$$A = \sum_{i=0}^N [y_i - (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m)]^2. \quad (1.3.19)$$

Για να παίρνει ακρότατες τιμές το άθροισμα  $A$  (της (1.3.19)), (θεωρούμενο σαν συνάρτηση των  $a_k$ ,  $k=0, 1, \dots, m$ ), πρέπει να ικανοποιεί το σύνολο των πιο κάτω συνθηκών:

$$\frac{\partial A}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m. \quad (1.3.20)$$

Οι εξισώσεις (1.3.20) αποτελούν ένα σύστημα  $(m+1)$  εξισώσεων με  $(m+1)$  αγνώστους η λύση του οποίου μας δίνει τους συντελεστές  $a_k$ ,  $k=0, 1, \dots, m$  του  $\varphi(x)$ . Οι εξισώσεις (1.3.20) συνιστούν μία ικανή και αναγκαία συνθήκη για να έχει ακρότατο το άθροισμα  $A$  της (1.3.19). Δεν εξασφαλίζουν όμως πάντοτε συνθήκη ελαχίστου και γι' αυτό θα πρέπει να είμαστε προσεκτικοί. Για μικρές όμως τιμές του βαθμού  $m$ , οι εξισώσεις (1.3.20) μας προσδιορίζουν το ελάχιστο του δεξιού μέλους της (1.3.19). Για μεγάλες όμως τιμές του  $m$ , η λύση του συστήματος, που αποφέρουν οι εξισώσεις (1.3.20), παρουσιάζει μεγάλες αποκλίσεις από τα δεδομένα μας και δεν συνιστάται η χρησιμοποίηση της μεθόδου αυτής. Τέλος προσθέτουμε, ότι η περιγραφή των δεδομένων μας με πολυώνυμο προσέγγισης είναι πολύ χρήσιμη όταν θέλουμε να “εξομαλύνουμε” τα δεδομένα μας και να χρησιμοποιήσουμε το πολυώνυμο προσέγγισης για να υπολογίσουμε τις παραγώγους του.

### 1.3.5 Πολυώνυμο προσέγγισης πρώτου βαθμού

Για την κατανόηση της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων, θα αναπτύξουμε στην παράγραφο αυτή ένα παράδειγμα εφαρμογής της και ειδικότερα θα αναπτύξουμε την περίπτωση εφαρμογής της μεθόδου για την οποία το πολυώνυμο προσέγγισης  $\varphi(x)$  είναι πρώτου βαθμού, δηλαδή

$$\varphi(x) = ax + b, \quad (1.3.21)$$

που θεωρούμε ότι προσεγγίζει καλλίτερα ένα σύνολο δεδομένων  $(x_i, y_i)$ ,  $i=0, 1, \dots, N$ . Στην περίπτωση αυτή,  $m=1$  και η (1.3.19) παίρνει τη μορφή

$$A = \sum_{i=0}^{N-1} [y_i - (ax_i + \beta)]^2 \quad (1.3.22)$$

ενώ οι εξισώσεις (1.3.20) μας δίνουν:

$$\frac{\partial A}{\partial \alpha} = -2 \sum_{i=0}^N [y_i - \alpha x_i - \beta] x_i = -2 \sum_{i=0}^N y_i x_i + 2\alpha \sum_{i=0}^N x_i^2 + 2\beta \sum_{i=0}^N x_i = 0 \quad (1.3.23)$$

$$\frac{\partial A}{\partial \beta} = -2 \sum_{i=0}^N [y_i - \alpha x_i - \beta] = -2 \sum_{i=0}^N y_i + 2\alpha \sum_{i=0}^N x_i + 2\beta \sum_{i=0}^N 1 = 0. \quad (1.3.24)$$

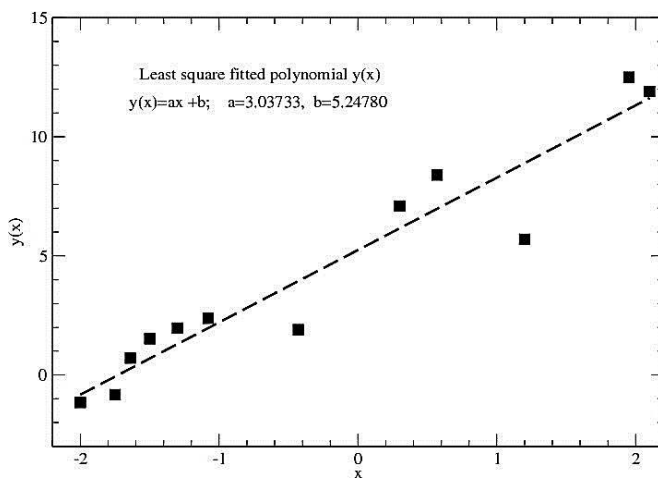
Από τις εξισώσεις (1.3.23) και (1.3.24) παίρνουμε το σύστημα των εξισώσεων (ως προς  $\alpha$  και  $\beta$ ):

$$\begin{pmatrix} 2 \sum_{i=0}^N x_i^2 & 2 \sum_{i=0}^N x_i \\ 2 \sum_{i=0}^N x_i & 2 \sum_{i=0}^N 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \sum_{i=0}^N x_i y_i \\ 2 \sum_{i=0}^N y_i \end{pmatrix}. \tag{1.3.25}$$

Από το σύστημα των εξισώσεων (1.3.25) προσδιορίζουμε εύκολα τους συντελεστές  $\alpha$  και  $\beta$ . Στην περίπτωση αυτή, είναι εύκολο να δείξει κανείς, ότι η λύση που παίρνουμε υπάρχει πάντοτε και μας εξασφαλίζει ελάχιστη τιμή του αθροίσματος  $A$  της (1.3.22).

Με το πρόγραμμα `linear_fit`, (§1Π.3, που παραθέτουμε στο τέλος του κεφαλαίου αυτού), προσεγγίζουμε ένα σύνολο δεδομένων με ένα πολυώνυμο προσέγγισης πρώτου βαθμού ακολουθώντας την θεωρία της παραγράφου αυτής (§1.3.5). Σαν παράδειγμα, προσεγγίζουμε με αυτό το πρόγραμμα, το σύνολο των δεδομένων που παραθέτουμε πιο κάτω (και που αποτελεί και τα στοιχεία εισόδου του προγράμματος `linear_fit`).

Με το πρόγραμμα `parabolic_fit`, (που το παραθέτουμε κι αυτό στο τέλος του κεφαλαίου αυτού, §1Π.4), χρησιμοποιούμε το τυπολόγιο της §1.3.4 για να βρούμε ένα πολυώνυμο προσέγγισης δευτέρου βαθμού. (Βλέπε Άσκηση Α1.7).



Εικ.1.4 Γραφική απεικόνιση πολυωνύμου προσέγγισης πρώτου βαθμού (διακεκομμένη ευθεία) του συνόλου δεδομένων (απεικονίζονται με τα μαυρισμένα τετράγωνα) που δίδεται αμέσως παρακάτω.

Δεδομένα εισόδου προγράμματος <code>linear_fit</code>	
-2.00	-1.15
-1.75	-0.83
-1.64	0.71
-1.50	1.52
-1.30	1.97
-1.08	2.38
-0.43	1.90
0.30	7.10

0.57	8.40
1.20	5.70
1.95	12.50
2.10	11.90

#### 1.4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ

Για να βρούμε αριθμητικά την παράγωγο της συνάρτησης  $F(x)$ , (αυτής που υποκρύπτεται σε ένα σύνολο δεδομένων μας) ή το ολοκλήρωμά της σ' ένα πεπερασμένο διάστημα  $[\alpha, \beta]$ , κάνουμε την βασική υπόθεση, ότι

$$F'(x) \sim p'(x) \quad (1.4.1)$$

$$\int_{\alpha}^{\beta} F(x)dx \sim \int_{\alpha}^{\beta} p(x)dx, \quad (1.4.2)$$

όπου  $p(x)$  το αντίστοιχο συμπτωτικό (ή προσεγγιστικό) πολυώνυμο. Στη παράγραφο αυτή θα βρούμε πρώτα το συμπτωτικό πολυώνυμο και μετά να εφαρμόσουμε τους τύπους (1.4.1) και (1.4.2).

Οι διάφοροι τύποι που χρησιμοποιούνται για την αριθμητική παραγωγή και ολοκλήρωση βασίζονται στις διάφορες μεθόδους και προσεγγίσεις που χρησιμοποιούμε για να βρούμε το συμπτωτικό πολυώνυμο  $p(x)$ .

Για μή ισαπέχοντα σημεία δεδομένων  $x_k$ , χρησιμοποιούμε το συμπτωτικό πολυώνυμο του Lagrange. Για ισαπέχοντα σημεία  $x_k$ , μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο του Newton ή τους τύπους των Stirling, Everett, κλπ. Προσέχουμε, ότι όταν έχουμε ισαπέχοντα σημεία  $x_k$  (δηλαδή  $x_k - x_{k-1} = h$  για κάθε  $k$ ) τότε,

$$\frac{d}{dx} p(x) = \frac{1}{h} \frac{d}{dk} p_k. \quad (1.4.3)$$

Επομένως, για να βρούμε την παράγωγο του συμπτωτικού πολυωνύμου, αρκεί να παραγωγίσουμε ή το  $p(x)$  ως προς  $x$  ή το  $p_k$  ως προς  $k$  και να διαιρέσουμε με το βήμα  $h$ . Έτσι, από τον τύπο του Newton (προς τα εμπρός) έχουμε:

$$F'(x) \approx p'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \Delta^{(1)} y_0 + \left( k - \frac{1}{2} \right) \Delta^{(2)} y_0 + \frac{3k^2 - 6k - 2}{6} \Delta^{(3)} y_0 + \dots \right\}. \quad (1.4.4)$$

Σε πολλές περιπτώσεις όμως, χρησιμοποιούμε τους ορισμούς για την πρώτη παράγωγο:

$$F'(x) \cong \frac{p(x+h)-p(x)}{h}, \quad F'(x) \cong \frac{p(x+h)-p(x-h)}{2h}, \quad F'(x) \cong \frac{p(x)-p(x-h)}{h}. \quad (1.4.5a)$$

Ενθυμούμενοι, ότι η δεύτερη παράγωγος είναι η πρώτη παράγωγος της πρώτης παραγώγου και χρησιμοποιώντας την τρίτη από αριστερά εξίσωση της (1.4.5), παίρνουμε:

$$F''(x) \cong \frac{F'(x) - F'(x-h)}{h} \cong \frac{p(x+h) - p(x) - p(x) + p(x-h)}{h^2}$$

$$F''(x) \cong \frac{p(x+h) - 2p(x) + p(x-h)}{h^2}. \quad (1.4.5b)$$



Για την αριθμητική ολοκλήρωση, βασικός στόχος είναι να προσεγγίσουμε την  $F(x)$  με ένα πολυώνυμο  $p(x)$  και να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα της  $p(x)$ :

$$\int_{\alpha}^{\beta} F(x) dx \approx \int_{\alpha}^{\beta} p(x) dx.$$

Στα παραδείγματα που ακολουθούν, θα θεωρήσουμε ότι το  $p(x)$  δίδεται από τον τύπο του Newton (προς τα εμπρός) και θα εξετάσουμε διάφορες υποπεριπτώσεις του.

Υποπερίπτωση Α: Στο διάστημα  $[a, \beta]$  γνωρίζουμε μόνο δύο συμπτωτικά σημεία του  $p(x)$ , τα  $(x_0=a, y_0)$  και  $(x_1=\beta, y_1)$ . Επομένως, το πολυώνυμο  $p(x)$  θα περιέχει μόνο γραμμικούς όρους, άρα

$$p_k = y_0 + \Delta^{(1)}y_0$$

και

$$\int_{\alpha}^{\beta} p(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx = \int_{k=0}^{k=1} (y_0 + k\Delta^{(1)}y_0) h dk = h \left[ y_0 k + \frac{1}{2} k^2 \Delta^{(1)}y_0 \right]_{k=0}^{k=1}$$

$$\int_{x_0}^{x_1} p(x) dx = h \left( y_0 + \frac{1}{2} \Delta^{(1)}y_0 \right) = h \left( y_0 + \frac{1}{2} (y_1 - y_0) \right) = \frac{h}{2} (y_1 + y_0). \quad (1.4.6)$$

Υποπερίπτωση Β: Στο διάστημα  $[a, \beta]$  γνωρίζουμε τρία σημεία του  $p(x)$ , τα:  $(x_0=a, y_0)$ ,  $(x_1, y_1)$  και  $(x_2=\beta, y_2)$ . Επομένως,

$$p_k = y_0 + k\Delta^{(1)}y_0 + \frac{1}{2} k(k-1)\Delta^{(2)}y_0$$

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx &= \int_{k=0}^{k=2} \left( y_0 + k\Delta^{(1)}y_0 + \frac{1}{2} (k^2 - k)\Delta^{(2)}y_0 \right) h dk = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2). \end{aligned} \quad (1.4.7)$$

Υποπερίπτωση Γ: Στο διάστημα  $[a, \beta]$  γνωρίζουμε  $n$ -σημεία. Επομένως, στον τύπο του Newton κρατούμε όρους μέχρι  $k^{(n-1)}$  τάξεως και ολοκληρώνουμε όπως στις υποπεριπτώσεις Α και Β. Έτσι παίρνουμε τους διαφόρους τύπους ολοκληρωμάτων, που είναι γνωστοί σαν τύποι των Newton-Cotes.

Ίσως να νομισθεί ότι όσο μεγαλύτερου βαθμού συμπτωτικό πολυώνυμο επιλέξουμε για να προσεγγίσουμε την  $F(x)$ , τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια θα πετύχουμε στην ολοκλήρωσή μας. Αυτό δεν είναι αλήθεια, γιατί όσο αυξάνει ο βαθμός του πολυωνύμου, τόσο περισσότερες διακυμάνσεις θα παρουσιάζει και λιγότερο ακριβής θα γίνεται η προσέγγιση του συμπτωτικού πολυωνύμου και η ολοκλήρωση.

Συνήθως διαλέγουμε να εφαρμόσουμε ανά δύο ή ανά τρία σημεία τους τύπους των Newton-Cotes και έτσι έχουμε αντίστοιχα την:

**ΜΕΘΟΔΟ ΤΡΑΠΕΖΙΟΥ (ολοκλήρωση ανά δύο σημεία)**

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} F(x) dx &\approx \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} + \int_{x_1}^{x_2} + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} p(x) dx = \\ &= \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \dots + \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n) \\ \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx &= \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \dots + 2y_{n-1} + y_n) \quad (1.4.8) \end{aligned}$$

**ΜΕΘΟΔΟ SIMPSON (ολοκλήρωση ανά τρία σημεία)**

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} F(x) dx &\approx \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} + \int_{x_2}^{x_4} + \dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} p(x) dx = \\ &= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \dots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n). \quad (1.4.9) \end{aligned}$$

Για την δημιουργία υποπρογραμμάτων (ρουτινών) FORTRAN, που θα υπολογίζουν το ολοκλήρωμα κάποιου συμπρωτικού πολυωνύμου σύμφωνα με τους τύπους των εξισώσεων (1.4.8) και (1.4.9), μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις πιο κάτω τεχνικές.

Για την μέθοδο τραπεζίου:

```
SUM=0.0
do i=2,n
bima=x(i)-x(i-1)
SUM=SUM+0.5*(y(i)+Y(i-1))*bima
enddo
embadon=SUM      ! τιμή ολοκληρώματος
```

Για την μέθοδο Simpson:

```
SUM=0.0
bima=h
do i=2,n-2,2
SUM=SUM+y(i)+4*y(i+1)+y(i+2)
enddo
embadon=SUM*bima/3.      ! τιμή ολοκληρώματος
```

**1.4.1 Σφάλμα αποκοπής αριθμητικών ολοκληρωμάτων**

Το σφάλμα αποκοπής που ορίσαμε με την (1.3.2), είναι εύκολο να δειχθεί ότι μπορεί να γραφεί υπό την εξής μορφή στη περίπτωση που το συμπρωτικό πολυώνυμο  $p(x)$  είναι  $n$ -βαθμού:

$$\delta(x) = F(x) - p(x) = \frac{F^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi_n(x) \quad (1.4.10)$$

όπου  $F^{(n+1)}(\xi)$  είναι η  $(n+1)$ -παράγωγος της  $F(x)$  στο σημείο  $\xi$ , το οποίο ανήκει στο πεδίο τιμών του  $p(x)$ , και

$$\pi_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n). \quad (1.4.11)$$

Η εξίσωση (1.4.10) είναι εύκολο να αποδειχθεί, θεωρώντας την συνάρτηση

$$G(t) = F(t) - p(t) - \frac{F(x)-p(x)}{\pi_n(x)}\pi_n(t). \quad (1.4.12)$$

και παραγωγίζοντάς την  $(n+1)$  φορές. Στην συνέχεια υποθέτουμε ότι υπάρχει ένα σημείο  $\xi$  στο πεδίο τιμών της  $p(x)$  με  $G^{(n+1)}(\xi)=0$  και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι  $\pi_n^{(n+1)}(t)=(n+1)!$  και ότι  $p^{(n+1)}(t)=0$ , παίρνουμε την (1.4.10). Σημειώνουμε ότι το σημείο  $\xi=\xi(x)$  είναι δύσκολο να βρεθεί αλλά η (1.4.10) μας επιτρέπει τον προσδιορισμό του μεγίστου σφάλματος αποκοπής αν γνωρίζουμε ότι η  $F^{(n+1)}$  είναι φραγμένη. Επί προσθέτως, η (1.4.10) μας επιτρέπει να βρούμε το σφάλμα αποκοπής των αριθμητικών ολοκληρωμάτων όπως για παράδειγμα της μεθόδου του τραπεζίου και της μεθόδου Simpson. Τούτο είναι αρκετά σημαντικό μια και μπορούμε να βρούμε εκφράσεις που μας επιτρέπουν να συγκρίνουμε διαφόρους μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης ως προς την ταχύτητα υπολογισμού τους, όπως θα δούμε στο έβδομο κεφάλαιο. Πιο κάτω, θα αναπτύξουμε την μεθοδολογία εύρεσης του σφάλματος αποκοπής της αριθμητικής ολοκλήρωσης με την μέθοδο του τραπεζίου και αφήνουμε σαν άσκηση την εύρεση του αντιστοίχου αποτελέσματος για την μέθοδο Simpson.

Θεωρούμε ότι έχουμε το συμπωτικό πολώνυμο πρώτου βαθμού (ευθεία γραμμή) που περιγράφει τα δεδομένα μας μεταξύ των σημείων  $x_0$  και  $x_1$ . Το λάθος αποκοπής της ολοκλήρωσης είναι

$$\Delta_{\tau\rho\alpha\pi} = \int_{x_0}^{x_1} \{F(x) - p(x)\} dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{F^{(2)}(\xi(x))}{2!} (x - x_0)(x - x_1) dx. \quad (1.4.13)$$

Επειδή η συνάρτηση  $\pi_2(x)=(x-x_0)(x-x_1)$  δεν αλλάζει πρόσημο στο διάστημα  $[x_0, x_1]$ , αν υποθέσουμε ότι η  $F^{(2)}(\xi(x))$  είναι συνεχής, μπορούμε να εφαρμόσουμε το θεώρημα της μέσης τιμής στο ολοκλήρωμα της εξίσωσης (1.4.13) και να την γράψουμε υπό την μορφή

$$\Delta_{\tau\rho\alpha\pi} = \frac{F^{(2)}(\xi'(x))}{2!} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx \quad (1.4.14)$$

όπου το σημείο  $\xi'(x) \in [x_0, x_1]$ .

Το ολοκλήρωμα της (1.4.14) είναι απλό και υπολογίζοντάς το, βρίσκουμε

$$\Delta_{\tau\rho\alpha\pi} = -\frac{F^{(2)}(\xi'(x))}{12} h^3 \quad (1.4.15)$$

όπου  $h=(x_1 - x_0)$ .

Αν η ολοκλήρωσή μας γίνεται στο διάστημα  $[x_0, x_n]$  τότε για κάθε διάστημα ολοκλήρωσης  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $i=0, 1, 2, \dots, n-1$ , θα έχω σφάλμα αποκοπής που θα δίδεται από την (1.4.15) με  $\xi' \in [x_i, x_{i+1}]$ . Έτσι, το συνολικό σφάλμα αποκοπής για την ολοκλήρωση στο διάστημα  $[x_0, x_n]$  θα είναι

$$\Delta_{\tau\rho\alpha\pi}^{\text{ολικό}} = -\frac{h^3}{12} \{F^{(2)}(\xi_0(x)) + F^{(2)}(\xi_1(x)) + \dots + F^{(2)}(\xi_{n-1}(x))\}. \quad (1.4.16)$$

Τέλος, υποθέτοντας ότι η  $F^{(2)}(x)$  είναι φραγμένη στο διάστημα  $[x_0, x_n]$  με φράγμα την τιμή  $F^{(2)}(\xi_\alpha)$  με  $\xi_\alpha \in [x_0, x_n]$ , μπορούμε να ξαναγράψουμε την (1.4.16) ως

$$\Delta_{\tau\rho\alpha\pi}^{\text{ολικό}} \leq -\frac{h^3}{12} nF^{(2)}(\xi_\alpha). \quad (1.4.17)$$

Η (1.4.17) παίρνει την τελική μορφή

$$\Delta_{\text{τραπ}}^{\text{ολικό}} = -\frac{(x_n - x_0)^3}{12n^2} F^{(2)}(\xi_\alpha) \quad (1.4.18)$$

αν κάνουμε την αντικατάσταση  $h = (x_n - x_0)/n$ .

Η (1.4.18) είναι πολύ χρήσιμη γιατί μας δίνει την μεταβολή του σφάλματος αποκοπής της ολοκλήρωσης συναρτήσεως του αριθμού των σημείων  $n$  στα οποία διαμερίζεται το δοθέν διάστημα ολοκλήρωσης  $[x_0, x_n]$ .

## 1.5 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΟΣ ΚΥΡΙΑΣ ΤΙΜΗΣ

**(principal value integrals) – Υπολογισμός ολοκληρώματος τύπου Kramer-Krönig**

Οι μέθοδοι που μέχρι τώρα αναπτύξαμε, υποθέτουν σιωπηλά, ότι οι προς ολοκλήρωση συναρτήσεις είναι ομαλές και συγκεκριμένα δεν παρουσιάζουν πόλους. Αν κάτι τέτοιο δεν συμβαίνει, είμαστε υποχρεωμένοι να χρησιμοποιήσουμε μια πολύ πυκνή διαμέριση του διαστήματος ολοκλήρωσης, πράγμα που τις περισσότερες φορές και ασύμφορο είναι αλλά και πιθανότατα αδύνατο από την φύση των δεδομένων μας. Μια τέτοια περίπτωση έχουμε και κατά τον αριθμητικό