ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

Μεταπτυχιακό Τμήμα

Επιστημονικοί Υπολογισμοί

(Σημειώσεις)

Αριθμητική Επίλυση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων

Επίκ. Καθηγητής Φίλιππος Τζαφέρης

Αθήνα, Παν. Έτος 2012-13

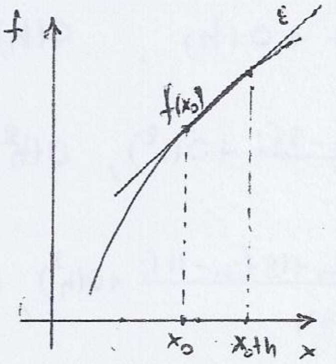
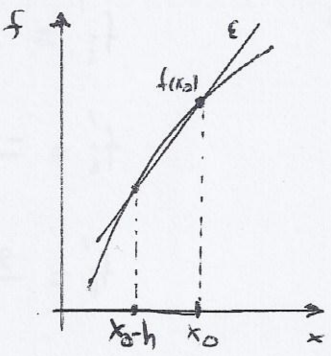
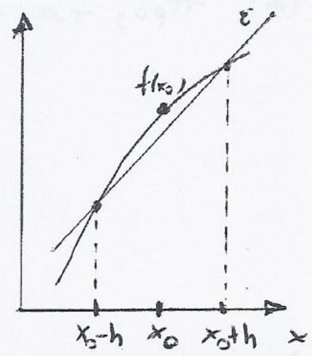
Περιεχόμενα

- Μαθηματικό Υπόβαθρο για την Αριθμητική Επίλυση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων
  - Αριθμητική Παραγώγιση (παραγωγή προσεγγιστικών τύπων)
  - Αριθμητική Ολοκλήρωση (Simpson, Romberg, Δισδιάστατη)

- Αριθμητική Επίλυση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων και Συστημάτων
  - Προβλήματα Αρχικών Τιμών: Μέθοδοι Euler, Taylor, Runge-Kutta
  - Πολυβηματικές μέθοδοι
  - Προβλήματα Συνοριακών τιμών

Αριθμητική Παραγώγιση

Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών

Προς τα εμπρός	Προς τα πίσω	Κεντρικές
		

Η $f'(x_0)$ προσεγγίζεται με την κλίση της ευθείας ε που διέρχεται από το $(x_0, f(x_0))$.

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \qquad f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} \qquad f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$$

Υπάρχουν τρεις διαφορετικοί τρόποι για την παραγωγή προσεγγίσεων διαφορών: Ο πρώτος βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor με υπόθεση ως προς κάποιο κέντρο, ο δεύτερος χρησιμοποιεί τελεστές διαφορών και ο τρίτος είναι η διαφόριση των πολυωνύμων παρεμβολής.

Μέθοδος Παραγώγισης	Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
1. Ανάπτυγμα Taylor	Όροι σφάλματος βέβαιοι Εφαρμόσιμη σε μη ομοιόμορφα δίκτυα (πλέγματα)	Μόνο ένας τύπος μπορεί να παραχθεί σε κάθε στιγμή
2. Τελεστής Διαφορών	Πλήρης ομοιότητα μεταξύ παραγώγων και προσεγγίσεων διαφορών	Χρειάζεται ανάπτυγμα Taylor για την ανάλυση σφάλματος
3. Διαφόριση πολυωνύμων Παρεμβολής	Συστηματική παραγωγή πολυάριθμων τύπων προσεγγίσεων διαφορών	Δυσκολία για εφαρμογή σε μη ομοιόμορφους χώρους σημείων/πλέγματος

Με ανάπτυγμα Taylor

Δίνονται στον παρακάτω πίνακα οι προσεγγίσεις διαφορών που χρησιμοποιούνται συχνά στην πράξη.

Πρώτη παράγωγος

(α) Προς τα εμπρός

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h), \quad O(h) = -\frac{1}{2} h f_i''$$

$$f_i' = \frac{-f_{i+2} + 4 f_{i+1} - 3 f_i}{2h} + O(h^2), \quad O(h^2) = \frac{1}{3} h^2 f_i^{(3)}$$

$$f_i' = \frac{2 f_{i+3} - 9 f_{i+2} + 18 f_{i+1} - 11 f_i}{6h} + O(h^3), \quad O(h^3) = -\frac{1}{4} h^3 f_i^{(4)}$$

(β) Προς τα πίσω

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + O(h) \qquad O(h) = \frac{1}{2} h f_i''$$

$$f_i' = \frac{3 f_i - 4 f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + O(h^2), \quad O(h^2) = \frac{1}{3} h^2 f_i^{(3)}$$

$$f_i' = \frac{11 f_i - 18 f_{i-1} + 9 f_{i-2} - 2 f_{i-3}}{6h} + O(h^3), \quad O(h^3) = \frac{1}{4} h^3 f_i^{(4)}$$

(c) Κεντρικές

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2), \quad O(h^2) = -\frac{1}{6} h^2 f_i^{(3)}$$

$$f_i' = \frac{-f_{i+2} + 8 f_{i+1} - 8 f_{i-1} + f_{i-2}}{12h} + O(h^4), \quad O(h^4) = \frac{1}{30} h^4 f_i^{(4)}$$

*

$$f_{i+1} = f_i + h f_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' + \frac{h^3}{6} f_i^{(3)} + \frac{h^4}{24} f_i^{(4)} + \cdots$$

$$f_{i-1} = f_i - h f_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' - \frac{h^3}{6} f_i^{(3)} + \frac{h^4}{24} f_i^{(4)} - \cdots$$

$$f_{i+2} = f_i + 2h f_i' + \frac{4h^2}{2} f_i'' + 8 \frac{h^3}{6} f_i^{(3)} + 16 \frac{h^4}{24} f_i^{(4)} + \cdots$$

Δεύτερη παράγωγος

(d) Προς τα εμπρός

$$f_i'' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{h^2} + O(h) \qquad O(h) = -h f_i^{(3)}$$

$$f_i'' = \frac{-f_{i+3} + 4f_{i+2} - 5f_{i+1} + 2f_i}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{11}{12} h^2 f_i^{(4)}$$

(e) Προς τα πίσω

$$f_i'' = \frac{f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}{h^2} + O(h), \qquad O(h) = h f_i^{(3)}$$

$$f_i'' = \frac{2f_i - 5f_{i-1} + 4f_{i-2} - f_{i-3}}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{11}{12} h^2 f_i^{(4)}$$

(f) Κεντρικές

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = -\frac{1}{12} h^2 f_i^{(4)}$$

$$f_i'' = \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{h^2} + O(h^4), \quad O(h^4) = \frac{1}{90} h^4 f_i^{(6)}$$

Τρίτη παράγωγος

(g) Προς τα εμπρός

$$f_i''' = \frac{f_{i+3} - 3f_{i+2} + 3f_{i+1} - f_i}{h^3} + O(h), \qquad O(h) = -\frac{3}{2} h f_i^{(4)}$$

(h) Προς τα πίσω

$$f_i''' = \frac{f_i - 3f_{i-1} + 3f_{i-2} - f_{i-3}}{h^3} + O(h), \qquad O(h) = \frac{3}{2} h f_i^{(4)}$$

(i) Κεντρικές

$$f_i''' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2h^3} + O(h^2), \qquad O(h^2) = -\frac{1}{4} h^2 f_i^{(5)}$$

Παρατηρήσεις

a) Μια προσέγγιση διαφορών για την $f_i^{(p)}$ χρειάζεται τουλάχιστον $p+1$ δεδομένα σημεία.

b) Η προσέγγιση διαφορών προκύπτει με ανάπτυγμα Taylor της f_j ως προς κέντρο x_i

c) Οι παράγωγοι τάξης μικρότερης του p πρέπει να απαλείφονται. Αυτό είναι δυνατό με ένα ελάχιστο των $p+1$ δεδομένων σημείων.

d) Ο όρος σφάλματος είναι ο χαμηλότερης τάξης αποκοπτόμενος όρος.

Γενικός αλγόριθμος για την παραγωγή προσέγγισης διαφορών

Υποθέτουμε ότι έχουμε L σημεία σε ένα πλέγμα αριθμημένα ως εξής: $i = \alpha, \beta, \dots, \lambda$.

Έστω επίσης $L \geq p+1$ όπου p η τάξη της παραγώγου που προσεγγίζεται.

Οι τετμημένες των σημείων είναι: $x_i = \alpha h, \beta h, \dots, \lambda h$ και συμβολίζονται με $x_\alpha, x_\beta, \dots, x_\lambda$.

x_{-2}	x_{-1}	x_0	x_1	x_2	x_3	ισαπέχοντα σημεία πλέγματος
$i=-2$	-1	0	1	2	3	δείκτες σημείων
$\alpha=-2$	$\beta=-1$	$\gamma=0$			$\lambda=3$	» » σε χρήση
x_α	x_β	x_γ			x_λ	τετμημένες των σημείων

Η προσέγγιση διαφορών για την p-τάξης παράγωγο της $f(x)$ γράφεται στην μορφή:

$$f_0^{(p)} = \frac{\alpha_\alpha f_\alpha + \alpha_\beta f_\beta + \dots + \alpha_\lambda f_\lambda}{h^p} + E \qquad (1)$$

όπου α_α έως α_λ είναι L προσδιοριστέοι συντελεστές,

$f_\alpha = f(x_\alpha)$, $f_\beta = f(x_\beta)$, ... είναι οι τεταγμένες για χρήση

και το σφάλμα γράφεται:

$$E = c_1 h^{L-p} f^{(L)} + c_2 h^{L-p+1} f^{(L+1)} \qquad (2)$$

Η ιδέα του αλγορίθμου είναι να εισαχθούν τα αναπτύγματα Taylor των f_i στην (1) και να προσδιοριστούν οι προσδιοριστέοι συντελεστές έτσι ώστε το σφάλμα να ελαχιστοποιείται ή ισοδύναμα η τάξη του E να γίνεται το δυνατόν υψηλότερη.

Για λύση του προβλήματος, υποθέτουμε ότι

$$p=1, \quad L=3, \quad \alpha=0, \quad \beta=1, \quad \gamma=2.$$

Τότε η (1) γράφεται:

$$f_0' = \frac{\alpha_0 f_0 + \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2}{h} + E \qquad (3)$$

όπου $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ προσδιοριστέοι συντελεστές

και $x_0=0, \quad x_1=h, \quad x_2=2h$.

Εισάγοντας τα αναπτύγματα Taylor των f_1 και f_2 ως προς $x=0$ στην (3) προκύπτει:

$$f_0' = \frac{\alpha_0 f_0}{h} + \frac{\alpha_1}{h}\left(f_0 + h f_0' + \frac{h^2}{2!} f_0'' + \frac{h^3}{6} f_0^{(3)} + \dots\right)$$
$$+ \frac{\alpha_2}{h}\left(f_0 + 2h f_0' + \frac{4h^2}{2} f_0'' + \frac{8h^3}{6} f_0^{(3)} + \dots\right) + E$$

ή

$$f_0' = f_0(\alpha_0+\alpha_1+\alpha_2)\cdot\frac{1}{h} + f_0'(0+\alpha_1+2\alpha_2) + f_0''(0+\alpha_1+4\alpha_2)\frac{h}{2}$$
$$+ f_0^{(3)}(0+\alpha_1+8\alpha_2)\frac{h^2}{6} + f_0^{(4)}(0+\alpha_1+16\alpha_2)\frac{h^3}{24} + \dots + E \qquad (4)$$

Η εξίσωση (4) περιέχει 3 προσδιοριστέους συντελεστές που μπορούν να προσδιοριστούν με την απαίτηση τριών συνθηκών.
Για να ελαχιστοποιήσουμε το σφάλμα στην (4) θέτουμε ως συντελεστές των f_0, f_0' και f_0'' τις τιμές 0, 1, 0 αντίστοιχα οπότε έχουμε:

$$\left.\begin{array}{l} \alpha_0+\alpha_1+\alpha_2 = 0 \\ 0+\alpha_1+2\alpha_2 = 1 \\ 0+\alpha_1+4\alpha_2 = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \alpha_0 = -\frac{3}{2} \\ \alpha_1 = 2 \\ \alpha_2 = -\frac{1}{2} \end{array} \qquad (5)$$

Άρα $$E = -f_0^{(3)}(0+\alpha_1+8\alpha_2)\frac{h^2}{6} - f_0^{(4)}(0+\alpha_1+16\alpha_2)\frac{h^3}{24} + \dots \qquad (6)$$

Από (2) και (6) έχουμε:

$$E = c_1 h^2 f^{(3)} + c_2 h^3 f^{(4)}$$

$$E = -(0+\alpha_1+8\alpha_2)\frac{h^2}{6} f_0^{(3)} - (0+\alpha_1+16\alpha_2)\frac{h^3}{24} f_0^{(4)} + \dots$$

Άρα:

$$c_1 = -\frac{1}{6}(\alpha_1 + 8\alpha_2)$$

$$c_2 = -\frac{1}{24}(\alpha_1 + 16\alpha_2)$$

Για $\alpha_1 = 2$ και $\alpha_2 = -\frac{1}{2}$ έχουμε:

$$c_1 = -\frac{1}{6}\left(2 - \frac{8}{2}\right) = \frac{1}{3}$$

$$c_2 = -\frac{1}{24}\left(2 - \frac{16}{2}\right) = \frac{1}{4}$$

Άρα $E = \frac{1}{3} h^2 f_0^{(3)} + \underbrace{\cancel{\frac{1}{4} h^3 f_0^{(4)}}}_{\text{αγνοείται}}$ (7)

Αν στην (6) ο πρώτος όρος είναι 0, τότε ο δεύτερος όρος περιορίζει το σφάλμα.

Άρα τελικά:

$$f_0' = \frac{1}{h}\left(-\frac{3}{2} f_0 + 2 f_1 - \frac{1}{2} f_2\right) + E$$

ή $$f_0' = \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h} + E$$

όπου $E = \frac{1}{3} h^2 f_0^{(3)}$.

Γενικά χρησιμοποιώντας L δεδομένα σημεία, μπορούν να προσδιορισθούν L προσδιοριστέοι συντελεστές στην (1).

Έτσι λοιπόν το σφάλμα προκύπτει ανάλογο του $L+1$ όρου ή ισοδύναμα της L παραγώγου αν ο συντελεστής δεν είναι 0. Αν αυτός είναι 0 ο όρος σφάλματος είναι μιας τάξης υψηλότερος.

Ο αλγόριθμος αυτός μπορεί να εφαρμοσθεί και όταν τα σημεία $a, b, \ldots$ δεν είναι ακέραιοι.

Με τελεστές διαφορών

Ορίζουμε τρεις τελεστές διαφορών [Ralston; Isaacson/Keller]

(α) Τελεστής προς τα εμπρός διαφοράς Δ

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$$

(b) Τελεστής προς τα πίσω διαφοράς ∇

$$f_i = f_i - f_{i-1}$$

(c) τελεστής κεντρικής διαφοράς δ

$$\delta f_i = f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}$$

ή $\delta f_{i+\frac{1}{2}} = f_{i+1} - f_i$ όπου $f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_i + \frac{h}{2})$

Οι τελεστές υψηλότερης τάξης διαφορών μπορούν να γραφούν ως δυνάμεις των παραπάνω τελεστών διαφορών δηλαδή

Δ^n, ∇^n, δ^n και επίσης $\nabla^{n-m}\Delta^m$ όπου $1 \leq m \leq n$.

Για $n=2$ οι τελεστές διαφοράς παράγουν

$$\Delta^2 f_i = \Delta(f_{i+1} - f_i) = f_{i+2} - 2f_i + f_i$$

$$\nabla^2 f_i = \nabla(f_i - f_{i-1}) = f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}$$

$$\delta^2 f_i = \delta(f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$

$$\Delta\nabla f_i = \Delta(f_i - f_{i-1}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$

$$\nabla\Delta f_i = \nabla(f_{i+1} - f_i) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$

Παρατηρούμε ότι ισχύει: $\delta^2 = \Delta\nabla = \nabla\Delta$

Αν η είναι άρτιος και $m = \frac{n}{2}$ τότε ισχύει

$$\nabla^{n-m}\Delta^{m} = \nabla^{m}\Delta^{m} = \delta^{2m} = \delta^{n}$$

Οι προσεγγίσεις διαφορών προκύπτουν με προσέγγιση των τελεστών διαφόρισης με τελεστές διαφοράς.

Για παράδειγμα ο τελεστής (βασικός) διαφόρισης πρώτης τάξης προσεγγίζεται με τρείς διαφορετικούς τρόπους:

$$\frac{d}{dx} \simeq \frac{\Delta}{\Delta x} \quad , \quad \frac{d}{dx} \simeq \frac{\nabla}{\nabla x} \quad , \quad \frac{d}{dx} \simeq \frac{\delta}{\delta x}$$

Εφαρμόζοντας τις προσεγγίσεις αυτές σε μια συνάρτηση $f(x)$ προκύπτουν:

$$\left[\frac{d}{dx} f(x)\right]_{x_i} \simeq \frac{\Delta}{\Delta x} f_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \qquad \text{όπου } \Delta x = x_{i+1} - x_i = h$$

$$\left[\frac{d}{dx} f(x)\right]_{x_i} \simeq \frac{\nabla}{\nabla x} f_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}$$

$$\left[\frac{d}{dx} f(x)\right]_{x_i} \simeq \frac{\delta}{\delta x} f_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$

Η προσέγγιση κεντρικής διαφοράς προκύπτει επίσης παίρνοντας τον αριθμητικό μέσο των προσεγγίσεων με προς τα εμπρός και προς τα πίσω διαφορών, δηλαδή

$$\left[\frac{d}{dx} f(x)\right]_{x_i} \simeq \frac{1}{2}\left[\frac{\Delta}{\Delta x} + \frac{\nabla}{\nabla x}\right] f_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$

Οι προσεγγίσεις για τον δεύτερης τάξης τελεστή διαφορών προκύπτουν ως εξής:

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{\Delta^2}{\Delta x^2} \quad , \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{\nabla^2}{\nabla x^2} \quad , \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{\delta^2}{\delta x^2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{\nabla}{\nabla x}\left(\frac{\Delta}{\Delta x}\right) = \frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{\nabla}{\nabla x}\right)$$

Με διαφόριση πολυωνύμων παρεμβολής

Ο τύπος πολυωνύμου παρεμβολής του Newton με προς τα εμπρός διαφορές που διέρχεται από $N+1$ δεδομένα σημεία είναι:

$$P_N(x) = P_N(x_k + sh) = \sum_{n=0}^{N} \binom{s}{n} \Delta^n f_k$$

$$= f_k + s\Delta f_k + \frac{1}{2}s(s-1)\Delta^2 f_k + \frac{1}{6}s(s-1)(s-2)\Delta^3 f_k$$

$$+ \frac{1}{24}s(s-1)(s-2)(s-3)\Delta^4 f_k + \dots + \binom{s}{N}\Delta^N f_k \qquad (1)$$

όπου $$s = \frac{x - x_k}{h}$$

και $f_k := f(x_k)$
$\vdots$
$f_{k+N} := f(x_{k+N})$

Η ακρίβεια των προσεγγίσεων εξαρτάται από το N καθώς επίσης και από το σημείο της περιοχής παρεμβολής στο οποίο προσεγγίζεται η παράγωγος. Στην παρεμβολή Newton η ακρίβεια είναι καλύτερη στο κέντρο της περιοχής παρεμβολής.

Έστω $N=2$ τότε έχουμε:

$$P_2(x) = f_k + s\Delta f_k + \frac{1}{2}s(s-1)\Delta^2 f_k \qquad (2)$$

Παραγωγίζοντας προκύπτει:

$$P_2'(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta f_k + \frac{1}{2}(2s-1)\Delta^2 f_k\right] \qquad (3)$$

Για $s=0$ προκύπτει $$P_2'(x_k) = \frac{1}{2h}\left[2\Delta f_k - \Delta^2 f_k\right] = \frac{1}{2h}\left[-f_{k+2} + 4f_{k+1} - 3f_k\right]$$

$$P_2'(x_{k+1}) = \frac{1}{2h}\left[2\Delta f_k + \Delta^2 f_k\right] = \frac{1}{2h}\left[f_{k+2} - f_k\right]$$

$$P_2'(x_{k+2}) = \frac{1}{2h}\left[2\Delta f_k + 3\Delta^2 f_k\right] = \frac{1}{2h}\left[3f_{k+2} - 4f_{k+1} + f_k\right]$$

Οι προηγούμενες τρεις εξισώσεις είναι αντίστοιχα η προσέγγιση με προς τα εμπρός διαφορά στο σημείο k, η προσέγγιση με κεντρική διαφορά στο σημείο k+1 και η προσέγγιση με προς τα πίσω διαφορά στο σημείο k+2. Με αντικατάσταση του k με i, i-1, i-2 στην 1η, 2η και 3η εξίσωση αντίστοιχα, προκύπτουν

$$P_2'(x_i) = \frac{1}{2h}\left[-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i\right] \qquad (4)$$

$$P_2'(x_i) = \frac{1}{2h}\left[f_{i+1} - f_{i-1}\right] \qquad (5)$$

$$P_2'(x_i) = \frac{1}{2h}\left[3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}\right] \qquad (6)$$

Το σχήμα ενός πολυωνύμου παρεμβολής Newton με προς τα εμπρός διαφορές εκφράζεται με τον προστιθέμενο όρο αν η παρεμβολή εφαρμοστεί σε ένα επιπλέον σημείο. Χρησιμοποιώντας τον κανόνα αυτό εξηγούμε το σχήμα των προσεγγίσεων διαφορών (4), (5) και (6).

Αν το N αυξάνεται από N=2 σε N=3 τότε προστίθεται ο επιπλέον όρος

$$\frac{1}{6}\, s(s-1)(s-2)\,\Delta^3 f_k \qquad (7)$$

Η παράγωγος του ως προς x είναι:

$$\frac{1}{6h}\left[3s^2 - 6s + 2\right]\Delta^3 f_k \qquad (8)$$

για $s=0 \Rightarrow \frac{1}{3h}\Delta^3 f_k$

για $s=1 \Rightarrow -\frac{1}{6h}\Delta^3 f_k$ (9)

για $s=2 \Rightarrow \frac{1}{3h}\Delta^3 f_k$

Γενικά: $f^{(N)}(x) \simeq \frac{d^N}{dx^N} P_N(x) = \frac{1}{h^N}\Delta^N f_i$ (10)

οπότε γράφουμε: $\Delta^N f_i \simeq h^N f^{(N)}(x)$ (11)

Από τις (9) και (11) προκύπτει προσεγγιστικά

για $s=0$, $\frac{1}{3}h^2 f_k^{(3)}$

για $s=1$, $-\frac{1}{6}h^2 f_k^{(3)}$

για $s=2$, $\frac{1}{3}h^2 f_k^{(3)}$

και περίπου τα σφάλματα των προσεγγίσεων (4), (5) και (6).

ΟΧΙ

Αριθμητική Ολοκλήρωση με άπειρα όρια ή ιδιαιτερότητες (singularities)

Στην παράγραφο αυτή θα εξετάσουμε τους ακόλουθους τύπους ολοκληρωμάτων που χρειάζονται ιδιαίτερη προσοχή

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$$ άπειρα όρια

$$I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}(e^x+1)} dx$$ $$\lim_{x \to 0} \frac{1}{\sqrt{x}(e^x+1)} = +\infty$$

$$I = \int_0^1 x^{0.7} \cos x \, dx$$ όχι προφανής ιδιαιτερότητα (singularity)

Μελετώνται οι μέθοδοι που στηρίζονται στον κανόνα Τραπεζίου και τον διπλό εκθετικό μετασχηματισμό που είναι ισχυρές και εφαρμόζονται με λιγότερη φροντίδα σε μια ευρεία περιοχή προβλημάτων.

Μια συνάρτηση που είναι ολοκληρώσιμη σε μια άπειρη ή ημιάπειρη περιοχή είναι περίπου 0 εκτός από κάποιο τμήμα της περιοχής. Η κύρια συνεισφορά στο ολοκλήρωμα γίνεται από μια σχετικά μικρή περιοχή όπου η συνάρτηση είναι σημαντικά διάφορη του μηδενός.

Έχει αποδειχθεί [Takahashi/Mori ; Mori/Piessens] ότι αν η $f(x)$ είναι αναλυτική στο $[-\infty, +\infty]$ τότε η πλέον αποδοτική μέθοδος για αριθμητική ολοκλήρωση του $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ είναι ο επεκτεταμένος κανόνας του Τραπεζίου.

$$J = h \sum_{i=-M}^{M} f(x_i)$$

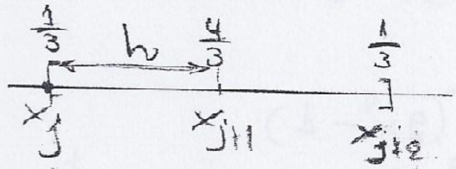
όπου $x_i = i h$ και M αρκετά μεγάλος ακέραιος.

ΟΧΙ

Αριθμητική Ολοκλήρωση

Πως προκύπτει ένας σύνθετος τύπος αριθμητικής ολοκλήρωσης

Κανόνας του Simpson



$$\int_{x_j}^{x_{j+2}} f(x)\,dx \simeq \int_{x_j}^{x_{j+2}} P_2(x)\,dx$$ όπου $P_2(x)$ πολυώνυμο παρεμβολής Newton που περνάει από τα x_j, x_{j+1}, x_{j+2}

$$P_2(x) = \sum_{k=0}^{2} \binom{s}{k} \Delta^k f_j = f_j + s\,\Delta f_j + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_j$$

όπου $x = x_j + sh \Leftrightarrow s = \frac{x - x_j}{h}$ $\quad dx = h\,ds$

$$\int_{x_j}^{x_{j+2}} P_2(x)\,dx = \int_0^2 \left(f_j + s\Delta f_j + \frac{s^2 - s}{2}\Delta^2 f_j \right) h\,ds =$$

$$= h\left[s f_j + \frac{s^2}{2}\Delta f_j + \frac{2s^3 - 3s^2}{12}\Delta^2 f_j \right]_0^2 =$$

$$= h\left[2f_j + 2(f_{j+1} - f_j) + \frac{1}{3}(f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_j) \right] =$$

$$= \frac{h}{3}\left(f_j + 4f_{j+1} + f_{j+2} \right)$$

Σύνθετος τύπος του Simpson για 2m υποδιαστήματα.

Διαιρούμε το διάστημα $[a,b]$ σε $2m$ υποδιαστήματα και χρησιμοποιούμε τον κανόνα του Simpson σε κάθε υποδιάστημα,

με $h = \frac{b-a}{2m}$ και $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{2m} = b$ όπου $x_j = x_0 + jh$
$j = 0(1)2m$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{j=1}^{m} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \left\{ \frac{h}{3}\left(f_{2j-2} + 4f_{2j-1} + f_{2j} \right) \right\} =$$

$$= \frac{h}{3}\left[f_0 + 2\underbrace{\sum_{j=1}^{m-1} f_{2j}}_{XI2} + 4\underbrace{\sum_{j=1}^{m} f_{2j-1}}_{XI1} + f_{2m} \right]$$

Εφαρμογή: Δίνεται το ολοκλήρωμα $I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$.
Να προσδιορισθεί το πλήθος των σημείων της διαμέρισης του $[0,1]$ έτσι ώστε το σφάλμα με τον Τ.Α.Ο του Τραπεζίου (αντίστοιχα του Simpson) να είναι μικρότερο του $\varepsilon = 0.5\cdot 10^{-6}$.

$$f'(x) = -2xe^{-x^2}$$

α) Έχουμε: $$f''(x) = 2e^{-x^2}(2x^2-1)$$

Επίσης $f'''(x) = e^{-x^2}\cdot 4x(3-2x^2)$ που έχει ρίζες $x=0$ ή $x = \pm\sqrt{1.5} \simeq \pm 1.1$

άρα $f'''(x) \geq 0 \quad \forall x \in [0,1]$

Επομένως η $f''(x)$ παρουσιάζει απόλυτη μέγιστη τιμή στο $x=0$ ή στα άκρα $0,1$. Δηλ.

$$\max_{0\leq x\leq 1} |f''(x)| = \max\{|f''(0)|, |f''(1)|\} = \max\{2, 2e^{-1}\} = 2$$

Άρα το ολικό σφάλμα αποκοπής είναι:

$$|E_T| = \left| -\frac{b-a}{12} h^2 f''(t) \right| \leq \frac{h^2}{12} \max_{t\in[0,1]} |f''(t)| = \frac{h^2}{6}$$

Πρέπει $|E_T| < 0.5\cdot 10^{-6} \iff \frac{h^2}{6} < 0.5\cdot 10^{-6} \iff \boxed{h < \frac{\sqrt{3}}{1000}}$

Επειδή όμως $h = \frac{b-a}{n} = \frac{1-0}{n} = \frac{1}{n}$ έχουμε $\frac{1}{n} < \frac{\sqrt{3}}{1000}$

$$\iff n > \frac{1000}{\sqrt{3}} \simeq 577{,}4$$

Άρα $n \geq 578$

β) Έχουμε: $$f^{(4)}(x) = e^{-x^2}(16x^4 - 48x^2 + 12) = 4e^{-x^2}(4x^4 - 12x^2 + 3)$$

$\Delta = 144 - 48 = 96$
$x_{1,2} = \frac{12 \pm \sqrt{96}}{8} = \frac{12 \pm 4\sqrt{6}}{8} = \frac{3 \pm \sqrt{6}}{2}$

$0 \quad \frac{3-\sqrt{6}}{2} \quad \frac{3+\sqrt{6}}{2}$

Η συνάρτηση αυτή παρουσιάζει απόλυτη μέγιστη τιμή ίση με 12 στο $x=0$.

Άρα έχουμε:

$$|E_S| = \left| -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(t) \right| \leq \frac{h^4}{180} \max_{t\in[0,1]} |f^{(4)}(t)| = \frac{h^4}{15} < 0.5\cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow h^4 < 7.5\cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow h < \frac{1}{10}\sqrt[4]{\frac{7.5}{100}}$$

Επειδή όμως $h = \frac{1}{n}$ (όπου n άρτιος) πρέπει $n \geq \frac{10}{\sqrt[4]{0.075}}$

$$\Rightarrow n \geq 20$$

Σφάλμα στην πολυωνυμική παρεμβολή

$$\varepsilon_N(x) = f(x) - P_n(x)$$

$$= (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_N)\,\frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}$$

$$= \frac{L(x)}{(N+1)!}\,f^{(N+1)}(\xi)$$

Πολυώνυμο Newton με προς τα εμπρός διαφορές

$$P_n(x) = f_0 + \binom{s}{1}\Delta f_0 + \binom{s}{2}\Delta^2 f_0 + \cdots + \binom{s}{N}\Delta^N f_0$$

Πολυώνυμο Newton με διηρημένες διαφορές

$$P_n(x) = f[x_0] + (x-x_0)f[x_0,x_1] + (x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]$$
$$+ \cdots + (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{N-1})f[x_0,x_1,\ldots,x_N]$$

Ολοκλήρωση Romberg

Η ολοκλήρωση κατά Romberg είναι μια μέθοδος με ευρεία εφαρμογή επειδή χρησιμοποιεί τον κανόνα του τραπεζίου για να δώσει αρχικές προσεγγίσεις και έπειτα εφαρμόζει τη μέθοδο επέκτασης του Richardson για την εύρεση βελτιωμένων προσεγγίσεων.

Θεώρημα

Εαν $f \in C^2[a,b]$ με $h=(b-a)/m$ και $x_j = a+jh$, $j=0(1)m$ ο κανόνας του τραπεζίου για τα m υποδιαστήματα είναι:

$$\int_a^b f(x)\,dx \cong \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\right] - \cancel{\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\mu)}$$

για κάποιο $\mu \in [a,b]$.

Το πρώτο βήμα της διαδικασίας Romberg είναι η δημιουργία των προσεγγίσεων με τον κανόνα του τραπεζίου με $m_1=1,\ m_2=2,\ m_3=4, \dots, m_n=2^{n-1}$ όπου n θετικός ακέραιος.

Τότε $h_k = \dfrac{b-a}{m_k} = \dfrac{b-a}{2^{k-1}}$ και με τον συμβολισμό αυτό ο κανόνας του τραπεζίου γίνεται:

$$\int_a^b f(x)\,dx \cong \frac{h_k}{2}\left[f(a)+f(b)+2\left(\sum_{i=1}^{2^{k-1}-1} f(a+ih_k)\right)\right] - \cancel{\frac{b-a}{12}h_k^2 f''(\mu_k)}$$

όπου $\mu_k \in [a,b]$

Αν με $R_{k,1}$ συμβολίσουμε την προσέγγιση με τον κανόνα του τραπεζίου για $m=m_k$ τότε:

$$R_{1,1} = \frac{h_1}{2}\left[f(a)+f(b)\right] = \frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$$

$$R_{2,1} = \frac{h_2}{2}\left\{f(a)+f(b)+2\cdot f(a+h_2)\right\} =$$

$$= \frac{b-a}{4}\left[f(a)+f(b)+2f\left(a+\frac{b-a}{2}\right)\right] = \frac{1}{2}\left[R_{1,1}+h_1 f\left(a+\frac{1}{2}h_1\right)\right]$$

$$R_{3,1} = \frac{h_3}{2}\left\{f(a)+f(b)+2\left[f\left(a+\frac{b-a}{4}\right)+f\left(a+\frac{b-a}{2}\right)+f\left(a+\frac{3(b-a)}{4}\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{b-a}{8}\left\{f(a)+f(b)+2\left[f(a+h_3)+f(a+2h_3)+f(a+3h_3)\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{R_{2,1}+h_2\left[f\left(a+\frac{h_2}{2}\right)+f\left(a+\frac{3h_2}{2}\right)\right]\right\}.$$

Γενικά: $$\boxed{R_{k,1} = \frac{1}{2}\left[R_{k-1,1} + h_{k-1}\sum_{i=1}^{2} f\left(a+\left(i-\tfrac{1}{2}\right)h_{k-1}\right)\right] \qquad k=2,3,\ldots,n}$$

Ορίζουμε $$R_{k,2} := \frac{4R_{k,1} - R_{k-1,1}}{3} \qquad k=2,3,\ldots,n$$

και εφαρμόζουμε τη μέθοδο (επέκταση του) Richardson για αυτές τις τιμές.

Τότε προκύπτει (βλ. Ralston and Rabinowitz [67]).

$$R_{ij} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1}-1} \qquad i=2,3,4,\ldots,n \quad j=2,3,\ldots,i$$

όπου οι τιμές με μεγάλο δείκτη j αντιστοιχούν σε διαδοχικούς υψηλής-τάξεως τύπους Newton-Cotes.

Οι προσεγγίσεις αυτές περιγράφονται σε ένα πίνακα της μορφής:

R_{11}				
R_{21}	R_{22}			
R_{31}	R_{32}	R_{33}		
R_{41}	R_{42}	R_{43}	R_{44}	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\ddots$
R_{n1}	R_{n2}	R_{n3}	$\ldots$	R_{nn}

Αποδεικνύεται ότι τα διαγώνια στοιχεία συγκλίνουν προς τη τιμή του ολοκληρώματος υπό τον όρο ότι οι τιμές R_{n1} συγκλίνουν σ' αυτόν τον αριθμό.

Γενικά η διαγώνια ακολουθία $\{R_{m,m}\}_{m=1}^{\infty}$ συγκλίνει πολύ πιο γρήγορα από την ακολουθία $\{R_{n,1}\}_{n=1}^{\infty}$.

Η τεχνική Romberg έχει την επιπλέον επιθυμητή ιδιότητα ότι μιά ολόκληρη γραμμή του πίνακα υπολογίζεται με μιά απλή εφαρμογή του κανόνα του τραπεζίου και έπειτα χρησιμοποιεί τις προηγούμενες υπολογισθείσες τιμές για να πετύχει τις διαδοχικές εισόδους στη γραμμή.

Η μέθοδος υπολογίζει τους όρους γραμμή, γραμμή δηλ. $R_{11}, R_{21}, R_{22}, R_{31}, R_{32}, R_{33}$ κτλ.

Ο παρακάτω αλγόριθμος περιγράφει αναλυτικά αυτή τη τεχνική:

Αλγόριθμος Romberg

Βήμα 1 Διάβασε $\alpha, b, \varepsilon, N$, ($f(x)$ υποπρόγραμμα)

Βήμα 2 Θέσε $h = b - \alpha$

$$R_{1,1} = \frac{h}{2}\left[f(\alpha) + f(b)\right]$$

Βήμα 3 Για $i = 2\,(1)\,N$ εκτέλεσε τα Βήματα 3.1 – 3.4

Βήμα 3.1 Θέσε $R_{i,1} = \frac{1}{2}\left[R_{i-1,1} + h\sum_{k=1}^{2^{i-2}} f\left(\alpha + \left(k - \frac{1}{2}\right)h\right)\right]$ (Προσέγγιση με το Κανόνα του Τραπεζίου)

Βήμα 3.2 Για $j = 2\,(1)\,i$

Θέσε $$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

Βήμα 3.3 $h = \frac{h}{2}$

Βήμα 3.4 Αν $|R_{ii} - R_{i-1,i-1}| < \varepsilon$ τότε

Τύπωσε i, R_{ii}. Τέλος

Βήμα 4 Τύπωσε ('μη επίτευξη της επιθυμητής ακρίβειας')

Τέλος.

Συνήθως όταν δεν γνωρίζουμε εκ των προτέρων τον αριθμό n χρησιμοποιούμε το κριτήριο διακοπής $|R_{n,n} - R_{n-1,n-1}| < \varepsilon$ (ε δοσ

Αριθμητική Ολοκλήρωση με άπειρα όρια ή ιδιαιτερότητες (singularities)

Στην παράγραφο αυτή θα εξετάσουμε τους ακόλουθους τύπους ολοκληρωμάτων που χρειάζονται ιδιαίτερη προσοχή

$$I=\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}dx \qquad \text{άπειρα όρια}$$

$$I=\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}\,(e^x+1)}dx \qquad \lim_{x\to 0}\frac{1}{\sqrt{x}(e^x+1)}=+\infty$$

$$I=\int_0^1 x^{0.7}\cos x\,dx \qquad \text{όχι προφανής ιδιαιτερότητα (singularity)}$$

Μελετώνται οι μέθοδοι που στηρίζονται στον κανόνα Τραπεζίου και τον διπλό εκθετικό μετασχηματισμό που είναι ισχυρές και εφαρμόζονται με λιγότερη φροντίδα σε μια ευρεία περιοχή προβλημάτων.

Μια συνάρτηση που είναι ολοκληρώσιμη σε μια άπειρη ή ημιάπειρη περιοχή είναι περίπου 0 εκτός από κάποιο τμήμα της περιοχής. Η κύρια συνεισφορά στο ολοκλήρωμα γίνεται από μια σχετικά μικρή περιοχή όπου η συνάρτηση είναι σημαντικά διάφορη του μηδενός.

Έχει αποδειχθεί [Takahashi/Mori; Mori/Piessens] ότι αν η $f(x)$ είναι αναλυτική στο $[-\infty,+\infty]$ τότε η πλέον αποδοτική μέθοδος για αριθμητική ολοκλήρωση του $I=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx$ είναι ο επεκτεινόμενος κανόνας του Τραπεζίου:

$$I=h\sum_{i=-M}^{M} f(x_i)$$

όπου $x_i=ih$ και M αρκετά μεγάλος ακέραιος.

Παράδειγμα $$I = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\, dx \qquad (\text{ακριβής τιμή } I = 1)$$

Αριθμητική εκτίμηση με την επέκταση του κανόνα του Τραπεζίου με $h = 0.5$, 0.1 και $0,01$

Για $M = 10$, $I = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-10}^{10} e^{-x^2}\, dx$

N	I
20	1.000104
40	1.000001
80	1.000000

όπου N αριθμός διαστημάτων

Στη συνέχεια εξετάζουμε την ολοκλήρωση μιας συνάρτησης σε μια ορισμένη περιοχή, αλλά η συνάρτηση είναι ιδιάζουσα στο ένα ή στα δύο όρια. Το ορισμένο διάστημα ολοκλήρωσης $[\alpha, b]$ μπορεί να μετασχηματισθεί στο $[-\infty, +\infty]$ με ένα μετασχηματισμό. Έτσι αναγόμαστε στην πρώτη μορφή ολοκληρώματος, οπότε εφαρμόζεται ο επεκτεταμένος κανόνας του Τραπεζίου.

Έστω $$I = \int_{\alpha}^{b} f(x)\, dx, \qquad \alpha, b \text{ ορισμένα}$$

και $z = z(x)$ ή ισοδύναμα $x = x(z)$

όπου z μια συνάρτηση τέτοια ώστε:

$$z(\alpha) = -\infty$$
$$z(b) = +\infty$$

Τότε έχουμε $$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f[x(z)] \left(\frac{dx}{dz}\right) dz \qquad (1)$$

Ένα παράδειγμα τέτοιου μετασχηματισμού είναι ο εκθετικός μετασχηματισμός

$$x = \frac{1}{2}\left[\alpha + b + (b-\alpha)\tanh(z)\right] \qquad (2)$$

ή $$z = \tanh^{-1}\left(\frac{2x - \alpha - b}{b - \alpha}\right) \qquad (3)$$

Η ακρίβεια του αριθμ. ολοκλήρωσης, οπωσδήποτε, εξαρτάται από την επιλογή του μετασχηματισμού.

Ο διπλός εκθετικός μετασχηματισμός δίνεται από τον τύπο

$$x = \frac{1}{2}\left[\alpha + b + (b-\alpha)\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(z)\right)\right] \quad (4)$$

που προτείνεται ως η βέλτιστη επιλογή.

Με την επιλογή αυτή προκύπτει:

$$\frac{dx}{dz} = \frac{(b-\alpha)\frac{\pi}{4}\cosh(z)}{\cosh^2\left[\frac{\pi}{2}\sinh(z)\right]} \quad (5)$$

Εισάγοντας τις (4) και (5) στην (1) και εφαρμόζοντας τον επεκτεταμένο κανόνα του Τραπεζίου προκύπτει

$$I = h\sum_{k=-N}^{N} f(x_k)\left(\frac{dx}{dz}\right)_k \quad (6)$$

όπου N αρκετά μεγάλος ακέραιος και

$z_k = kh$.

$$x_k = \frac{1}{2}\left[\alpha + b + (b-\alpha)\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(z_k)\right)\right] \quad (7)$$

$$\left(\frac{dx}{dz}\right)_k = \frac{(b-\alpha)\frac{\pi}{4}\cosh(z_k)}{\cosh^2\left[\frac{\pi}{2}\sinh(z_k)\right]} \quad (8)$$

Το ερώτημα που γεννάται στην (6) είναι πιο N είναι αρκετά μεγάλο που αναφέρεται με την εξίσωση του παρονομαστή στην (8).

Όταν το z_k αυξάνει τότε

$$\cosh^2\left[\frac{\pi}{2}\sinh(z_k)\right] \xrightarrow{**} \frac{1}{4}\exp\left[\frac{\pi}{2}\exp(z_k)\right] \quad (9)$$

που αυξάνει διπλά εκθετικά και προκαλεί υπερχείλιση (overflow).

Με απλή ακρίβεια σε ένα υπολογιστή IBM PC και σε ένα VAX συμβαίνει όταν $\frac{1}{4}\exp\left(\frac{\pi}{2}\exp(z_k)\right) = 2\cdot 10^{38}$ ή ισοδύναμα $z_k > 4.0$ περίπου

Στον IBM PC είναι $Nh < 4$ (10)

Σε ένα IBM mainframe (μεγάλο υπολογιστικό σύστημα), η υψηλότερη τιμή floating point στην FORTRAN-77 είναι 7.5×10^{75} οπότε το κριτήριο για το N είναι $Nh < 4.7$ (11)

Ένα άλλο πρόβλημα είναι το σφάλμα στρογγύλευσης στην (7) που προκύπτει όταν ο όρος της υπερβολικής εφαπτομένης τείνει πολύ κοντά στο -1 ή 1. Για να αποφύγουμε αυτό, αναγνωρίζουμε πρώτα ότι ο όρος υπερβολικής εφαπτομένης μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\tanh(p)^{*} = \left(s - \frac{1}{s}\right) \Big/ \left(s + \frac{1}{s}\right) \qquad (12)$$

όπου $s = \exp(p)$

Η (7) βάσει της (12) γράφεται:

$$x_k = \left(bs + \frac{a}{s}\right) \Big/ \left(s + \frac{1}{s}\right) \qquad (13)$$

όπου $s = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh(z_k)\right)$

Παρατηρήσεις

(a) Ο επεκτεταμένος κανόνας του τραπεζίου είναι ο βέλτιστος για την ολοκλήρωση μιας αναλυτικής συνάρτησης στο $(-\infty, +\infty)$.

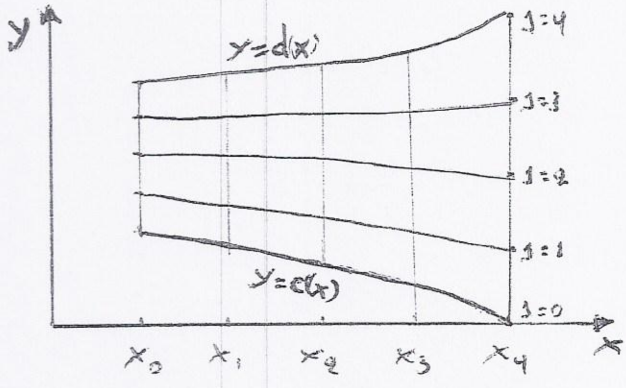
(b) Η ολοκλήρωση μιας συνάρτησης με ιδιαιτερότητα μπορεί να εκτελεστεί με τον επεκτεταμένο κανόνα του τραπεζίου με τον διπλό εκθετικό μετασχηματισμό.

$$* \quad \sinh x := \frac{e^{x} - e^{-x}}{2} \qquad \tanh x := \frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}} = \frac{e^{x} - \frac{1}{e^{x}}}{e^{x} + \frac{1}{e^{x}}} \quad ** $$

$$\cosh x := \frac{e^{x} + e^{-x}}{2}$$

Αριθμητική Ολοκλήρωση σε μια διδιάστατη περιοχή

Έστω μια διδιάστατη περιοχή (σχήμα 1) όπου το αριστερό και δεξιό σύνορο είναι κατακόρυφες γραμμές και το πάνω και κάτω είναι αντίστοιχα οι καμπύλες $y=d(x)$ και $y=c(x)$.



Ένα διπλό ολοκλήρωμα στην παραπάνω περιοχή γράφεται

$$I=\int_a^b\left[\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)\,dy\right]dx \qquad (1)$$

Τα προβλήματα διπλών ολοκληρωμάτων συνήθως γράφονται ως εξής:

$$I=\int_a^b\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)\,dy\,dx \qquad (2)$$

ή

$$I=\int_a^b dx\int_{c(x)}^{d(x)} dy\, f(x,y) \qquad (3)$$

ή

$$I=\iint_A f(x,y)\,dx\,dy$$ όπου A είναι μια περιοχή. (4)

Η καθεμιά από τις μορφές (2), (3) και (4) γράφεται στη μορφή (1) πριν προχωρήσουμε με τις αριθμητικές ολοκληρώσεις.
Αν χρειάζεται εναλλάσσουμε τα x και y.

Η γενική αρχή της αριθμ. ολοκλήρωσης της ανωτέρω μορφής είναι η αναγωγή σε ένα συνδυασμό προβλημάτων μιας διάστασης.

Αν ορίσουμε
$$G(x)=\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)\,dy \qquad (5)$$

τότε η (4) γίνεται:
$$I=\int_{\alpha}^{b} G(x)\,dx \qquad (6)$$

που για κάποιο τύπο αριθμητικής ολοκλήρωσης γράφεται
$$I=\sum_{i=0}^{N} w_i G(x_i) \qquad (7)$$

όπου w_i είναι τα βάρη και x_i τα σημεία της διαμέρισης.

Οι αριθμητικές τιμές των $G(x_i)$ υπολογίζονται επίσης αριθμητικά.

Αν θέσουμε $x=x_i$ τότε η (5) γίνεται:
$$G(x_i)=\int_{c(x_i)}^{d(x_i)} f(x_i,y)\,dy \qquad (8)$$

που είναι ένα πρόβλημα της μιας διάστασης y.

Η εξίσωση (8) μπορεί να υπολογιστεί με τη χρήση ενός αριθμητικής ολοκλήρωσης.

Για παράδειγμα εφαρμόζουμε τον επεκτεταμένο Κανόνα του Τραπεζίου για το πρόβλημα της διπλής ολοκλήρωσης:
$$I=\int_{\alpha}^{b}\left[\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)\,dy\right]dx$$

Η περιοχή ολοκλήρωσης $[\alpha,b]$ διαιρείται σε N ίσα διαστήματα πλάτους $h_x=(b-\alpha)/N$ (π.χ $N=4$).

Τα σημεία στο x άξονα συμβολίζονται με $x_0, x_1, \ldots, x_N$

Με εφαρμογή του Κανόνα του Τραπεζίου στον x άξονα έχουμε:

$$I = \frac{h_x}{2}\Big[\int_{c(x_0)}^{d(x_0)} f(x_0,y)\,dy + 2\int_{c(x_1)}^{d(x_1)} f(x_1,y)\,dy + 2\int_{c(x_2)}^{d(x_2)} f(x_2,y)\,dy$$

$$+ \cdots + \int_{c(x_N)}^{d(x_N)} f(x_N,y)\,dy\Big] \qquad (9)$$

Η εξίσωση (9) μπορεί να γραφεί πιο συνοπτικά ως εξής:

$$I = \frac{h_x}{2}\left[G(x_0) + 2G(x_1) + 2G(x_2) + \cdots + G(x_N)\right] \qquad (10)$$

όπου

$$G(x_i) = \int_{c(x_i)}^{d(x_i)} f(x_i,y)\,dy \qquad (11)$$

Για την εκτίμηση της (11) η περιοχή ολοκλήρωσης $[c(x_i), d(x_i)]$ διαμερίζεται σε N διαστήματα πλάτους $h_y = \frac{1}{N}[d(x_i) - c(x_i)]$. Οι τιμές y των σημείων του πλέγματος συμβολίζονται με

$y_{i0}, y_{i1}, y_{i2}, \ldots, y_{iN}$.

Τότε ο επαναληπτικός κανόνας ολοκλήρωσης του Τραπεζίου γίνεται:

$$G(x_i) = \int_{c(x_i)}^{d(x_i)} f(x_i,y)\,dy$$

$$= \frac{h_y}{2}\left[f(x_i,y_{i0}) + 2f(x_i,y_{i1}) + 2f(x_i,y_{i2}) + \cdots + f(x_i,y_{iN})\right]$$

Ο κανόνας του Τραπεζίου μπορεί να αντικατασταθεί με την άλλη μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης που να περιέχει Τύπους του Gauss και κανόνες Simpson.

Παράδειγμα

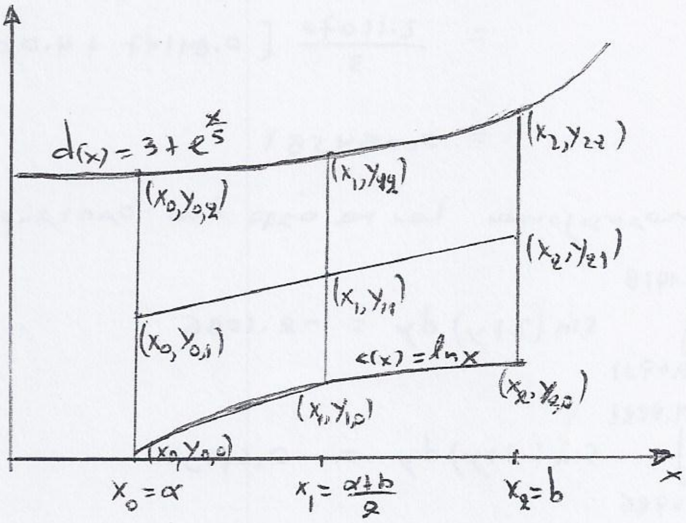
Να υπολογιστεί το διπλό ολοκλήρωμα

$$I=\int_{\alpha}^{b}\left[\int_{c(x)}^{d(x)}\sin(x+y)\,dy\right]dx$$

με τον κανόνα αριθμ. ολοκλήρωσης του Simpson.

Τα όρια της ολοκλήρωσης είναι $\alpha=1$, $b=3$ και τα σύνορα $c(x)=\ln x$ και $d(x)=3+\exp\frac{x}{5}$

Για τον κανόνα του Simpson τα σημεία του πλέγματος στον x-άξονα είναι τα $x_0=1$, $x_1=2$, $x_2=3$



Με την εφαρμογή του κανόνα του Simpson στο πρώτο ολοκλήρωμα προκύπτει

$$I=\frac{h_x}{3}\left[G(x_0)+4G(x_1)+G(x_2)\right]$$

όπου $h_x=\frac{b-\alpha}{2}=\frac{3-1}{2}=1$

και $G(x_i)=\int_{\ln(x_i)}^{3+e^{\frac{x_i}{5}}}\sin(x_i+y)\,dy$

ή πιο συγκεκριμένα

$$I = \int_a^b \left[\int_{c(x)}^{d(x)} \sin(x+y)\, dy \right] dx$$

$$= \frac{h_x}{3} \left[\int_{\ln 1}^{3+e^{\frac{1}{5}}} \sin(1+y)\, dx + 4 \int_{\ln 2}^{3+e^{\frac{2}{5}}} \sin(2+y)\, dy + \int_{\ln 3}^{3+e^{\frac{3}{5}}} \sin(3+y)\, dy \right.$$

$$= \frac{h_x}{3} \left[\int_{0}^{4.2214} \sin(1+y)\, dy + 4 \int_{0.6931}^{4.4918} \sin(2+y)\, dy + \int_{1.0986}^{4.8221} \sin(3+y)\, dy \right] \qquad (1)$$

Με εφαρμογή του κανόνα του Simpson το πρώτο ολοκλήρωμα στην (1) είναι:

$$\int_0^{4.2214} \sin(1+y)\, dy = \frac{2.11070}{3} \left[\sin(1+0) + 4 \sin(1+2.11070) + \sin(1+4.2214) \right]$$

$$= \frac{2.11070}{3} \left[0.84147 + 4 \cdot 0.03088 + (-0.87322) \right]$$

$$= 0.064581$$

Παρόμοια υπολογίζονται και τα άλλα δύο ολοκληρώματα:

$$\int_{0.6931}^{4.4918} \sin(2+y)\, dy = -2.1086$$

$$\int_{1.0986}^{4.8221} \sin(3+y)\, dy = -0.67454$$

Έτσι λοιπόν η τελική τιμή του διπλού ολοκληρώματος προκύπτει:

$$I = \frac{1}{3} \left[0.064581 + 4\,(-2.1086) - 0.67454 \right] = -3.0148$$

Ασκήσεις

1. Δίνεται το πρόβλημα αρχικών τιμών (Π.Α.Τ)

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x-y}{x+y}$$

$$y(0)=1$$

Να εφαρμοστεί η μέθοδος του Euler για την επίλυσή του στο $[0, 0.1]$ λαμβάνοντας $h=0.02$.

Λύση

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$$

Για $n=0$: $y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0)$ $\qquad f(x_0,y_0) = \frac{x_0-y_0}{x_0+y_0} = \frac{0-1}{0+1} = -1$

$= 1 + 0.02 \cdot (-1)$

$= 0.98$

$x_1 = x_0 + h = 0 + 0.02 = 0.02$

Για $n=1$: $y_2 = y_1 + h f(x_1, y_1)$ $\qquad f(x_1,y_1) = \frac{x_1-y_1}{x_1+y_1} = \frac{0.02-0.98}{0.02+0.98} = -0.96$

$= 0.98 + 0.02(-0.96)$

$= 0.9608$

$x_2 = x_1 + h = 0.02 + 0.02 = 0.04$

Συνεχίζοντας την παραπάνω διαδικασία προκύπτει ο παρακάτω πίνακας αποτελεσμάτων:

i	x_i	y_i
0	0	1.0000
1	0.02	0.9800
2	0.04	0.9608
3	0.06	0.9425
4	0.08	0.9249
5	0.10	0.9080

2. Δίνεται το πρόβλημα αρχικών τιμών (Π.Α.Τ)

$$\frac{dy}{dx} = x+y$$

$$y(0) = 1$$

Να εφαρμοστεί η μέθοδος Runge-Kutta 4ης τάξης για την επίλυση του στο $[0, 0.2]$ λαμβάνοντας $h=0.1$

Λύση

1ο βήμα $\quad x_0 = 0.0 \quad y_0 = 1.0 \quad h = 0.1 \quad f(x,y) = x+y$

Εκτελείται η παρακάτω σειρά υπολογισμών:

$$k_1 = h f(x_0, y_0) = h(x_0 + y_0) = 0.1(0.0 + 1.0) = 0.1$$

$$k_2 = h f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}\right) = h f\left(0 + \frac{0.1}{2}, 1 + \frac{0.1}{2}\right)$$
$$= 0.1 f(0.05, 1.05)$$
$$= 0.1(0.05 + 1.05) = 0.11$$

$$k_3 = h f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}\right) = 0.1 f\left(0.05, 1 + \frac{0.11}{2}\right)$$
$$= 0.1(0.05 + 1.055) = 0.1105$$

$$k_4 = h f(x_0 + h, y_0 + k_3) = h f(0 + 0.1, 1.1105)$$
$$= 0.1(0.1 + 1.1105) = 0.12105$$

Συνεπώς: $\quad y_1 = y_0 + \frac{1}{6}[k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4] = 1.110341$

Άρα $\quad (x_1, y_1) = (0.1, 1.110341)$

2ο βήμα $\quad$ Παράγονται

$k_1 = 0.1210341$

$k_2 = 0.1320858$

$k_3 = 0.132638461$

$k_4 = 0.144303013$

Συνεπώς: $\quad y_2 = y_1 + 1/6 [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 1.2428054$

Άρα $\quad (x_2, y_2) = (0.2, 1.2428054)$

Runge-Kutta μέθοδοι για υψηλότερης τάξης διαφορικές εξισώσεις.

Δίνεται η διαφορική εξίσωση 2ης τάξης:

$$y'' = f(x, y, y')$$

Θέτουμε $y' = z$ οπότε προκύπτει το παρακάτω σύστημα δ.ε. 1ης τάξης.

$$\left\{\begin{array}{l} y' = z \\ z' = f(x, y, z) \end{array}\right\} \quad \text{ή} \quad \left\{\begin{array}{l} y' = f_1(x, y, z) \\ z' = f_2(x, y, z) \end{array}\right.$$

οι οποίες λύνονται όπως έχουμε ήδη περιγράψει.

Παράδειγμα Με εφαρμογή της μεθόδου Runge-Kutta να λυθεί η διαφορική εξίσωση:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = x\frac{dy}{dx} + y^2$$

$$y(0) = 1$$

$$y'(0) = 2$$

$$h = 0.2$$

Λύση

θέτουμε $y' = z$ οπότε $y'' = \dfrac{dz}{dx} = xz + y^2$

Έτσι έχουμε το σύστημα των εξισώσεων:

$$\frac{dy}{dx} = f_1(x, y, z) = z$$

$$\frac{dz}{dx} = f_2(x, y, z) = xz + y^2$$

με αρχικές συνθήκες:

$$x_{10} = 0$$

$$y_{10} = 1$$

$$z_{10} = \left(\frac{dy}{dx}\right)_{10} = 2$$

Ξεκινάμε με $(x_{10}, y_{10}, z_{10}) = (0, 1, 2)$ και υπολογίζουμε το (x_{11}, y_{11}, z_{11}) με βήμα $h=0.2$ χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις:

$$x_{11} = x_{10} + h$$

$$y_{11} = y_{10} + \Delta y$$

$$z_{11} = z_{10} + \Delta z$$

όπου $\Delta y = \frac{1}{6}\left[k_1 + 2(k_2+k_3)+k_4\right]$

και $\Delta z = \frac{1}{6}\left[l_1 + 2(l_2+l_3)+l_4\right]$

με

$$k_1 = h f_1(x_{10}, y_{10}, z_{10}) \qquad l_1 = h f_2(x_{10}, y_{10}, z_{10})$$

$$k_2 = h f_1\left(x_{10}+\frac{h}{2}, y_{10}+\frac{k_1}{2}, z_{10}+\frac{l_1}{2}\right) \qquad l_2 = h f_2\left(x_{10}+\frac{h}{2}, y_{10}+\frac{k_1}{2}, z_{10}+\frac{l_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h f_1\left(x_{10}+\frac{h}{2}, y_{10}+\frac{k_2}{2}, z_{10}+\frac{l_2}{2}\right) \qquad l_3 = h f_2\left(x_{10}+\frac{h}{2}, y_{10}+\frac{k_2}{2}, z_{10}+\frac{l_1}{2}\right)$$

$$k_4 = h f(x_{10}+h, y_{10}+k_3, z_{10}+\frac{l_2}{2}) \qquad l_4 = h f_2(x_{10}+h, y_{10}+k_3, z_{10}+l_3)$$

Επιτυγχάνουμε: $k_1 = 0.0$ $\quad l_1 = 0.2$ $\quad k_2 = 0.02$ $\quad l_2 = 0.202$

$k_3 = 0.0202$ $\quad l_3 = 0.24402$ $\quad k_4 = 0.0488404$ $\quad l_4 = 0.2179224$

Επομένως:

$$y_1 = y_{10} + \Delta y = 1.0 + 0.021534$$

$$z_1 = z_{10} + \Delta z = 2.0 + 0.218327$$

άρα $(x_{11}, y_{11}, z_{11}) = (0.2, 1.021534, 2.218327)$

Συνεχίζουμε τη διαδικασία παρόμοια.

Χρήσιμοι Τύποι

Ανάπτυγμα Taylor μιας συνάρτησης f δύο μεταβλητών x, y

$$f(x_0+h, y_0+k) = f(x_0,y_0) + \left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right) f(x_0,y_0)$$
$$+ \frac{1}{2!}\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f(x_0,y_0)$$
$$\vdots$$
$$+ \frac{1}{n!}\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^k f(x_0,y_0)$$
$$+ R_n$$

όπου $R_n = \frac{1}{(n+1)!}\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^{n+1} f\left(x_0+\theta h, y_0+\theta k\right)$, $0<\theta<1$.

Π.Α.Τ
$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

$$y(x_0+h) = y(x_0) + h\underset{\downarrow\ y'}{y'(x_0)} + \frac{h^2}{2!}\underset{\downarrow\ y''}{y''(x_0)} + \cdots$$

$$y' = f$$

$$y'' = f_x + f_y \cdot y' = f_x + f_y f = f'$$

$$y''' = f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f = f''$$

$$y^{(4)} = f_{xxx} + 3f_{xyy}f^2 + f_{yyy}f^3 + 3f_{xyx}f + 3f_{yy}f_x f + 4f_{yy}f_y f^2$$
$$+ 3f_{xy}f_x + 5f_{xy}f_y f + f_{xx}f_y + f_y^2 f_x + f_y^3 f.$$

. . . .