Εύρεση ριζών συνάρτησης

Ας θεωρήσουμε μια συνάρτηση

$$f(x): (a, b) \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

και έστω ότι υπάρχει $x* \in (a, b)$ έτσι ώστε $f(x*) = 0$. Ως γνωστόν το $x*$ λέγεται ρίζα της συνάρτησης.

Μέχρι στιγμής η μόνη μέθοδος που μάθαμε για την προσέγγιση μιας ρίζας είναι η μέθοδος της διχοτόμησης. Αυτή χρησιμοποιεί την απλούστερη κατά το δυνατό πληροφορία που διαθέτουμε και δεν χρειάζεται καν ο υπολογισμός της $f(x)$. Αρκεί το πρόσημό της.

Τώρα όμως έχουμε στο οπλοστάσιό μας πολλά εργαλεία. Όπως το θεώρημα Taylor. Αν χρησιμοποιήσουμε την απλούστερη μορφή του, αποκόπτοντας τους όρους μετά την πρώτη παράγωγο, γράφουμε

$$0 = f(x*) = f(x) + (x* - x)f'(\xi) \quad (1)$$

για κάποιο ξ ανάμεσα στο $x*$ και το x.

Με στόχο την προσέγγιση του $x*$ μπορούμε να δημιουργήσουμε μια ακολουθία x_0, $x_1, \cdots, x_k, x_{k+1}, \cdots$ ξεκινώντας από κάποια αρχική εκτίμηση x_0. Έχοντας λοιπόν το όποιο x_k και την εξίσωση (1) ευελπιστούμε στην παραγωγή του x_{k+1} το οποίο θα βρίσκεται πλησιέστερα στο $x*$.

Έτσι η (1) μπορεί να μετασχηματιστεί στην

$$0 = f(x_k) + (x_{k+1} - x_k)u_k \quad (2)$$

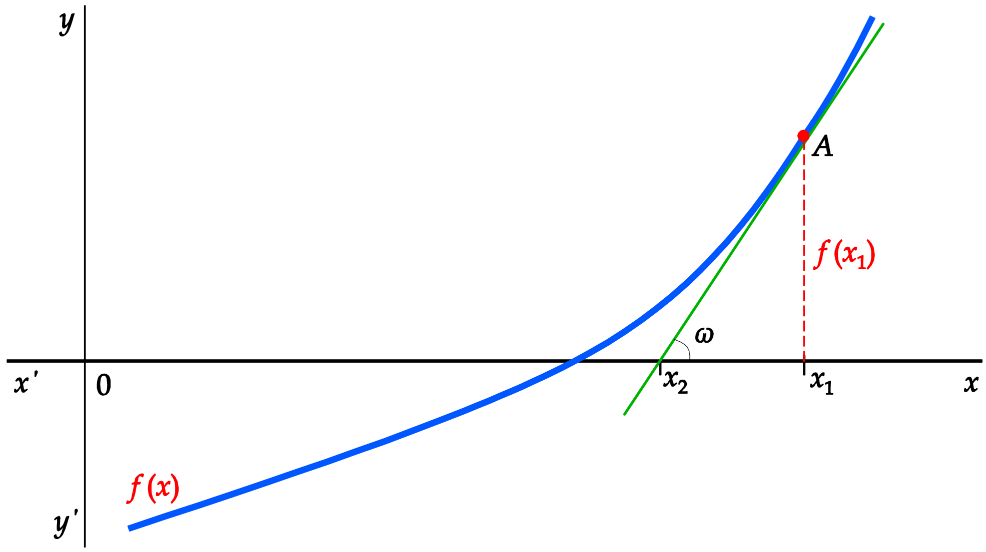
όπου u_k είναι μια προσέγγιση της $f'(\xi)$. Ανάλογα με το πώς γίνεται αυτή η προσέγγιση έχουμε διάφορες μεθόδους.

Μέθοδος Newton - Raphson

Θέτοντας στην (2) ότι πλησιέστερο στην $f'(\xi)$ έχουμε στη διάθεσή μας, συγκεκριμένα $u_k = f'(x_k)$, λαμβάνουμε την μέθοδο Newton – Raphson:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (3)$$

Η γεωμετρική ερμηνεία της μεθόδου φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί. Από το x_1 παράγουμε το x_2 φέροντας κάθετη στο σημείο x_1. Αυτή τέμνει την καμπύλη της συνάρτησης στο σημείο Α, απ' όπου φέρουμε την εφαπτομένη στην $f(x)$.



Σχήμα 6

Έτσι έχουμε $f'(x_1) = tan\,\omega = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_2}$ που είναι αντίστοιχο του τύπου (3).

Η μέθοδος αυτή ονομάστηκε *Newton - Raphson* προς τιμή του Newton και του Joseph Raphson (1648 – 1715). Ο Raphson, ο οποίος υπήρξε ένθερμος υποστηρικτής του Νεύτωνα, τη δημοσίευσε στο βιβλίο του «*Analysis aequationum universalis*» που εκδόθηκε το 1690. Λόγω της σπουδαιότητας του βιβλίου αυτού, ο Raphson έγινε μέλος την Βασιλικής Ακαδημίας του Λονδίνου ένα χρόνο μετά, το 1691. Ο Νεύτων είχε παρουσιάσει κάτι ανάλογο το 1671, αλλά σε περίπλοκη μορφή, εφαρμοσμένο σε πολυώνυμα και χωρίς άμεση αναφορά στην παράγωγο. Ο Πέρσης αστρονόμος και μαθηματικός Jamshīd al-Kāshī (1380–1429) χρησιμοποίησε μια απλουστευμένη παραλλαγή της μεθόδου για εύρεση ριζών ενός αριθμού.

Ορισμός: Μία ακολουθία $x_0,\ x_1, \cdots, x_k,\ x_{k+1}, \cdots$ που δημιουργείται από μια αριθμητική μέθοδο συγκλίνει στο $x*$ με τάξη $p \geq 1$ αν υπάρχει $M > 0$ έτσι ώστε:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x_{k+1} - x*|}{|x_k - x*|^p} \leq M \qquad (4)$$

Είναι φανερό πως αν στο k-στο βήμα της μεθόδου της διχοτόμησης έχουμε μέγιστο σφάλμα $|x_k - x*| = \varepsilon_k$ τότε στο (k+1)-στο βήμα θα έχουμε μέγιστο σφάλμα $\varepsilon_k/2$. Αν στην (4) αντικαταστήσουμε με αυτά τα σφάλματα έχουμε γραμμική σύγκλιση αφού

$$\frac{|x_{k+1} - x*|}{|x_k - x*|^p} = \frac{\varepsilon_k/2}{\varepsilon_k} \leq \frac{1}{2}$$

και συνεπώς $p = 1$ και $M = \frac{1}{2}$.

Στην περίπτωση της Newton – Raphson εφαρμόζοντας το θεώρημα Taylor έχουμε

$$f(x*) = f(x_k) + f'(x_k)(x* - x_k) + \frac{1}{2!}f''(\xi)(x* - x_k)^2$$

με ξ ανάμεσα στο $x*$ και το x_k. Διαιρώντας με $f'(x_k)$ λαμβάνουμε

$$\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + (x* - x_k) = x* - x_{k+1} - \frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}(x* - x_k)^2$$

ή

$$\varepsilon_{k+1} = -\frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}\varepsilon_k^2.$$

Η τελευταία σχέση μας δηλώνει ότι έχουμε τετραγωνική σύγκλιση αρκεί όμως

(i) $f'(x) \neq 0$ στην περιοχή που κινούνται τα x_kπέριξ του $x*$

(ii) $f''^{(x)}$ δεν απειρίζεται στην ίδια περιοχή

(iii) το x_0 είναι όσο χρειάζεται κοντά στο $x*$

►**Παράδειγμα:** Αν στη συνάρτηση $f(x) = x^2 - 4$ θέλουμε να προσεγγίσουμε τη ρίζα $x* = 2$ με τη Newton – Raphson τότε αν στην k-στη επανάληψη έχουμε σφάλμα $\varepsilon_k = x_k - 2$ τότε στην $(k+1)$-στη επανάληψη θα έχουμε σφάλμα $\varepsilon_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2-4}{2x_k} - 2$. Παρατηρούμε ότι $\lim_{k\to\infty} \frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k^2} = \frac{1}{2x_k} \leq M$ εφόσον το M επιλεγεί κατάλληλα και συνεπώς έχουμε τετραγωνική σύγκλιση ($p = 2$). ◄

►**Παράδειγμα:** Η συνάρτηση $f(x) = (x-1)e^{-x}$ έχει μία ρίζα την $x* = 1$. Αν θέλουμε να την προσεγγίσουμε με τη Newton – Raphson και επιλέξουμε $x_0 = 2.5$, τότε αφού υπολογίσουμε την παράγωγο $f'(x) = (x-2)e^{-x}$ και σχηματίσουμε τον σχετικό τύπο

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - 1}{x_k - 2}$$

Διαπιστώνουμε ότι:

$$x_1 = 5.5,\ \ x_2 \approx 6.78571, x_3 \approx 7.99467, x_4 \approx 9.16148 \text{ και } x_5 \approx 10.3011,$$

δηλαδή δεν έχουμε σύγκλιση στη ρίζα.

Γενικά θα πρέπει να λαμβάνουμε x_0 συγκριτικά κοντά στη ρίζα για να έχουμε σύγκλιση. Αυτή δεν είναι εξασφαλισμένη όπως στη μέθοδο της διχοτόμησης.

Αξιοσημείωτο επίσης είναι ότι

$$f(x_4) \approx 0.000857016, \quad f(x_5) \approx 0.000312,$$

Δηλαδή το $f(x)$ παίρνει πολύ μικρές τιμές αλλά είναι φανερό ότι δεν θα μηδενιστεί. ◄

►**Παράδειγμα:** Προσεγγίστε τη ρίζα της $f(x) = (x-1)e^{-x}$ με τη μέθοδο Newton – Raphson . Λάβετε $x_0 = 0$.

Υπολογίζουμε

$$x_1 = \frac{1}{2},\ x_2 = \frac{5}{6},\ x_3 = \frac{41}{42},\ x_4 = \frac{1805}{1806},\ x_5 = \frac{3263441}{3263442}.$$

Δηλαδή τώρα έχουμε σύγκλιση της ακολουθίας στη ρίζα. ◄

Ένα ερώτημα που τίθεται είναι το πότε σταματάμε. Συνήθως θέτουμε εξ' αρχής ένα κριτήριο διακοπής 1>>ε>0 και σταματάμε όταν για κάποιο k, έχουμε $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon$. Αυτό το κριτήριο είναι πιο ασφαλές από το να ζητήσουμε $|f(x_k)| < \varepsilon$ διότι όπως είδαμε στο Παράδειγμα 3.2 δεν μας εξασφαλίζει.

Ένα εξίσου ακριβές αποτέλεσμα με τη μέθοδο της διχοτόμησης θα απαιτούσε περίπου 22 διχοτομήσεις διότι $2^{-22} \approx 2.4 \times 10^{-7}$ όσο και το σφάλμα του x_5. Βέβαια αν το μήκος του αρχικού διαστήματος στη διχοτόμηση ήταν μεγαλύτερο από 1, τότε θα χρειαζόμασταν επιπλέον διχοτομήσεις.

Μέθοδος τέμνουσας

Θέτοντας στην (2)

$$u_k = \frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}} \tag{5}$$

λαμβάνουμε την μέθοδο της τέμνουσας:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)\cdot(x_k-x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}.$$

Η επιλογή (5) βασίζεται στο ότι

$$f'(x_k) = \lim_{x_k \to x_{k-1}} \frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

και κατά συνέπεια η εν λόγω μέθοδος, οριακά, "μιμείται" την Newton – Raphson.

Για να εκκινήσει η μέθοδος της τέμνουσας απαιτούνται δύο αρχικά σημεία. Η ταχύτητα σύγκλισής της είναι μικρότερη από αυτή της Newton – Raphson. Αποδεικνύεται ότι

$$p = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5}) \approx 1.618$$

στον τύπο (4). Όμως το μεγαλύτερό της πλεονέκτημα είναι ότι δεν χρειάζεται ο υπολογισμός της παραγώγου. Έτσι τις περισσότερες φορές είναι στην πράξη πιο αποτελεσματική.

►**Παράδειγμα:** Προσεγγίστε τη ρίζα της $f(x) = (x-1)e^{-x}$ με τη μέθοδο της τέμνουσας. Λάβετε $x_0 = 0$, $x_1 = 0.1$ και κριτήριο διακοπής $\varepsilon = 0.002$.

Υπολογίζουμε

$$f(x_0) = (0-1)e^0 = -1$$

και

$$f(x_1) = (0.1-1)e^{-0.1} = -0.9 \cdot 0.90483 = -0.81435$$

γράφοντας μόνο 5 δεκαδικά αφού $\varepsilon = 0.002$.

Οπότε

$$x_2 = 0.1 - \frac{-0.81435\cdot(0.1-0)}{-0.81435-(-1)} \approx 0.53865.$$

Συνεχίζουμε υπολογίζοντας μόνο το

$$f(0.53865) = (0.53865\text{-}1)\, e^{-0.53865} \approx \text{-}0.26921$$

και τότε

$$x_3 = 0.53865 - \frac{-0.26921\cdot(0.53865-0.1)}{-0.26921-(-0.81435)} \approx 0.75527.$$

Αφού $|x_3 - x_2| > 2 \cdot 10^{-3}$ προχωράμε υπολογίζοντας το

$$f(0.75527) = (0.75527\text{-}1)\, e^{-0.75527} \approx -0.11499$$

και τελικά

$$x_4 = 0.75527 - \frac{-0.11499 \cdot (0.75527 - 0.53865)}{-0.11499 - (-0.26921)} \approx 0.91813$$

με $f(x_4) \approx -0.03269$. Συνεχίζοντας λαμβάνουμε

$$x_5 = 0.98281,\ f(x_5) \approx -0.00643,$$

$$x_6 = 0.99866,\ f(x_6) \approx -0.00049$$

και τελικά $x_7 = 0.99997$ όπου και σταματάμε, δεχόμενοι αυτό ως ρίζα, αφού $|x_6 - x_5| < \varepsilon$.◄

►**Άσκηση:** Να προσεγγίσετε την $\sqrt{2}$ αφού κάνετε τρεις επαναλήψεις με τη μέθοδο Newton – Raphson και λάβετε αρχικό σημείο $x_0 = 2$.

Λύση. Λαμβάνουμε τη συνάρτηση $f(x) = x^2 - 2$. Υπολογίζουμε $f'(x) = 2x$ και ο σχετικός τύπος γίνεται:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - 2}{2x_n}.$$

Εύκολα λοιπόν βλέπουμε ότι:

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0^2 - 2}{2x_0} = 2 - \frac{2^2 - 2}{2 \cdot 2} = 2 - \frac{2}{4} = 1.5$$

Συνεχίζουμε

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1^2 - 2}{2x_1} = 1.5 - \frac{1.5^2 - 2}{2 \cdot 1.5} = 1.5 - \frac{0.25}{3} \approx 1.41666$$

και τέλος

$$x_3 = 1.41666 - \frac{1.41666^2 - 2}{2 \cdot 1.41666} \approx 1.41422$$

Το x_3 αποτελεί πολύ καλή προσέγγιση της ρίζας αφού :

$$\sqrt{2} \approx 1.41421356 \;◄$$

►**Άσκηση:** Να προσεγγίσετε την $\sqrt[3]{5}$ αφού κάνετε τρεις επαναλήψεις με τη μέθοδο Newton – Raphson και λάβετε αρχικό σημείο $x_0 = 2$.

Λύση. Λαμβάνουμε τη συνάρτηση $f(x) = x^3 - 5$. Υπολογίζουμε $f'(x) = 3x^2$ και ο σχετικός τύπος γίνεται:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 - 5}{3x_n^2}.$$

Εύκολα λοιπόν βλέπουμε ότι:

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0^3 - 5}{3x_0^2} = 2 - \frac{2^3 - 5}{3 \cdot 2^2} = 2 - \frac{3}{12} = 1.75$$

Συνεχίζουμε

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1^3 - 5}{3x_1^2} = 1.75 - \frac{1.75^3 - 5}{3 \cdot 1.75^2} = 1.75 - \frac{0.359375}{9.1875} \approx 1.71088435$$

και τέλος

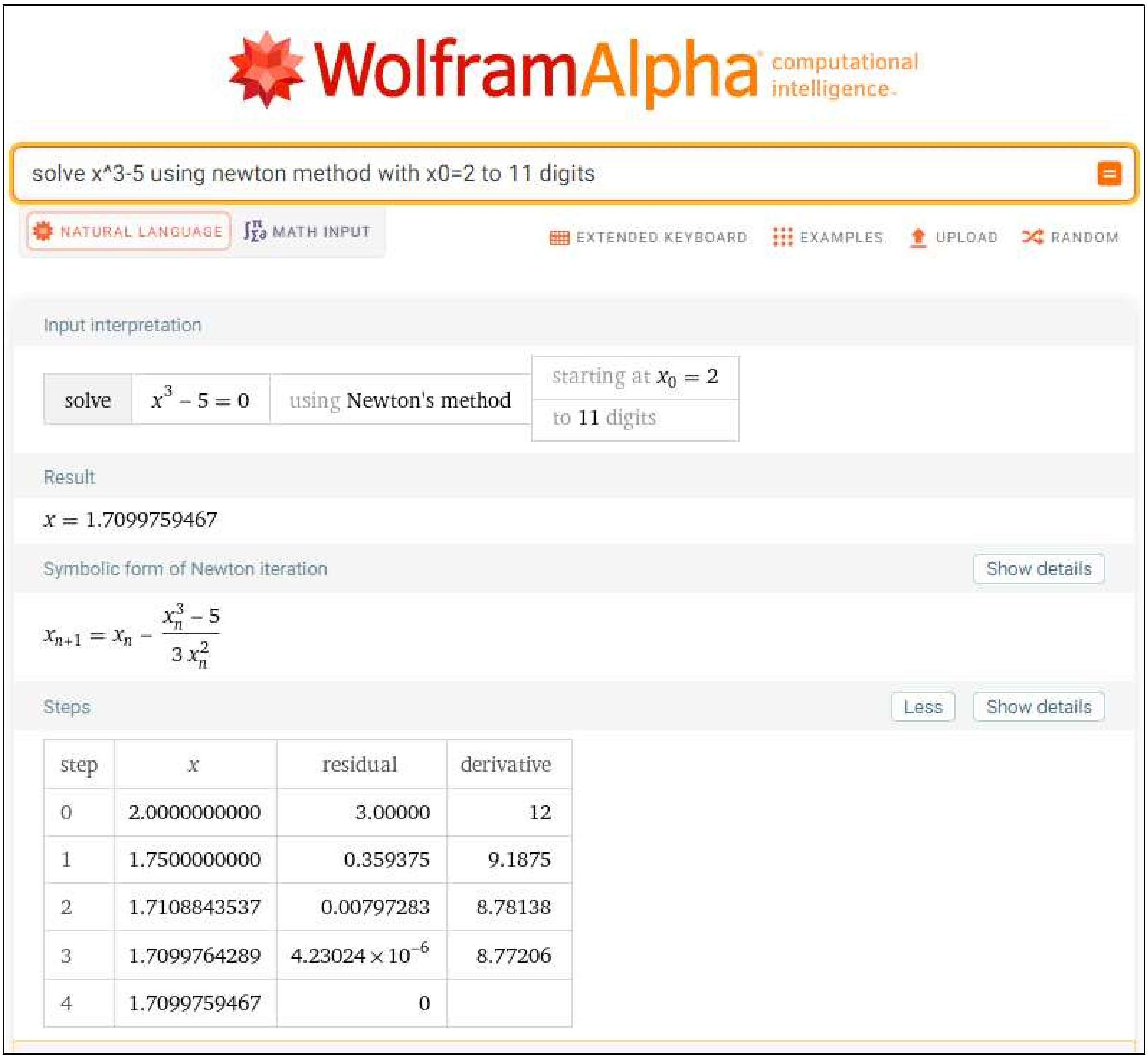
$$x_3 = x_2 - \frac{x_2^3 - 5}{3x_2^2} = 1.71088435 - \frac{1.71088435^3 \; - 5}{3 \cdot 1.71088435^2}$$

$$\approx 1.71088435 - \frac{0.007972796}{8.78137577} \approx 1.7099764$$

Το x_3 αποτελεί πολύ καλή προσέγγιση της ρίζας αφού :

$$\sqrt[3]{5} \approx 1.7099759$$

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να παραχθεί μέσω της διαδικτυακής εφαρμογής WolframAlpha, όπως φαίνεται παρακάτω.


WolframAlpha computational intelligence.

solve x^3-5 using newton method with x0=2 to 11 digits

NATURAL LANGUAGE MATH INPUT EXTENDED KEYBOARD EXAMPLES UPLOAD RANDOM

Input interpretation

solve $x^3 - 5 = 0$ using Newton's method starting at $x_0 = 2$ to 11 digits

Result

$x = 1.7099759467$

Symbolic form of Newton iteration Show details

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 - 5}{3\, x_n^2}$$

Steps Less Show details

step	x	residual	derivative
0	2.0000000000	3.00000	12
1	1.7500000000	0.359375	9.1875
2	1.7108843537	0.00797283	8.78138
3	1.7099764289	4.23024×10^{-6}	8.77206
4	1.7099759467	0	

◄

►**Άσκηση:** Να προσεγγίσετε το arcsin 0.5 με τη μέθοδο Newton – Raphson και λάβετε αρχικό σημείο $x_0 = \frac{1}{2}$ και κριτήριο διακοπής $\varepsilon = 0.001$.

Λύση. Λαμβάνουμε την αντίστροφη συνάρτηση της *arcsin*, δηλαδή την

$$f(x) = \sin x - \frac{1}{2} = 0.$$

Έχουμε $f'(x) = \cos x$ και ο τύπος της Newton – Raphson γίνεται:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\sin x_n - \frac{1}{2}}{\cos x_n}$$

και υπολογίζουμε:

$$x_1 = x_0 - \frac{\sin x_0 - \frac{1}{2}}{\cos x_0} \approx 0.5 - \frac{0.47942 - 0.5}{0.87758} \approx 0.52345$$

Δεδομένου ότι ζητείται ακρίβεια τριών δεκαδικών (ε = 0.001) γράφουμε τα αποτελέσματα με 2-3 δεκαδικά παραπάνω. Αν δουλεύουμε με υπολογιστή χεριού δεν χρειάζονται περισσότερα ψηφία διότι είναι αναξιόπιστα.

Τώρα παρατηρούμε ότι $|x_1 - x_0| > \varepsilon$ και συνεχίζουμε.

$$x_2 = x_1 - \frac{sin \quad {}_1 - \frac{1}{2}}{cos \quad {}_1} \approx 0.52345 - \frac{0.49987 \quad .5}{0.86610} \approx 0.52360,$$

και $|x_2 - x_1| < \varepsilon$ οπότε σταματάμε δεχόμενοι το x_2 σαν την προσέγγιση που αναζητάμε, δηλαδή $\arcsin 0.5 \approx 0.52360$. ◄

►**Άσκηση:** Να προσεγγίσετε τη μοναδική πραγματική ρίζα του πολυωνύμου $p(x) = x^5 + x^4 - x^3 - x^2 + x + 1$ με τη μέθοδο Newton – Raphson και λάβετε αρχικό σημείο $x_0 = 2$ και κριτήριο διακοπής ε = 0.001.

Λύση. Υπολογίζουμε την παράγωγο

$$p'(x) = 5x^4 + 4x^3 - 3x^2 - 2x + 1$$

και έχουμε τον τύπο

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^5 + x_n^4 - x_n^3 - x_n^2 + x_n + 1}{5x_n^4 + 4x_n^3 - 3x_n^2 - 2x_n + 1}. \qquad (1)$$

Πολύ σημαντικό στην περίπτωση αυτή είναι το πώς υπολογίζουμε τα πολυώνυμα. Αν ξεκινήσουμε υπολογίζοντας το x_n^5 μετά το x_n^4 κ.ο.κ. θα έχουμε κάνει 4+3+2+1=10 πολλαπλασιασμούς για τον υπολογισμό του $x_n^5 + x_n^4 - x_n^3 - x_n^2 + x_n + 1$. Για το λόγο αυτό ο υπολογισμός γίνεται με το σχήμα Horner

$$\left(\left(\left((x_n + 1)x_n - 1\right)x_n - 1\right)x_n + 1\right)x_n + 1$$

και έτσι γίνονται μόνο 4 πολλαπλασιασμοί. Δηλαδή ο τύπος (1) γράφεται

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\left(\left(\left((x_n + 1)x_n - 1\right)x_n - 1\right)x_n + 1\right)x_n + 1}{\left(\left((5x_n + 4)x_n - 3\right)x_n - 2\right)x_n + 1}$$

και δείχνει τον τρόπο που γίνονται οι υπολογισμοί.

Ξεκινώντας έχουμε

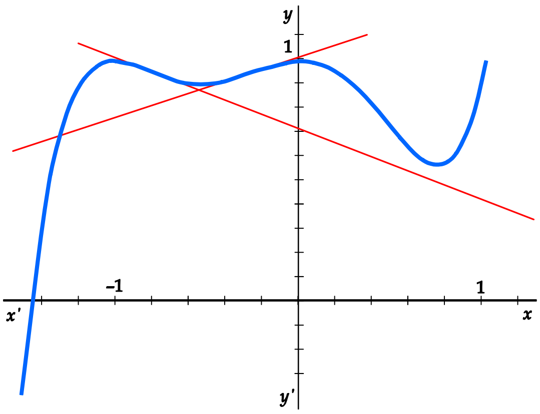
$$x_1 = 2 - \frac{\left(\left(\left((2+1)\cdot 2 - 1\right)\cdot 2 - 1\right)\cdot 2 + 1\right)\cdot 2 + 1}{\left(\left((5\cdot 2 + 4)\cdot 2 - 3\right)\cdot 2 - 2\right)\cdot 2 + 1} = 2 - \frac{39}{97} = \frac{155}{97}.$$

Διαπιστώστε στη συνέχεια ότι

$$x_2 = 1.26764, x_3 = 0.962997, x_4 = 0.523344,$$
$$x_5 = -14.7175, x_6 = -11.8216, x_7 = -9.50662,$$
$$x_8 = -7.65688, x_9 = -6.17978, x_{10} = -5.00133,$$
$$x_{11} = -4.06236, x_{12} = -3.31553, x_{13} = -2.72285,$$
$$x_{14} = -2.25367, x_{15} = -1.88308, x_{16} = -1.59071,$$
$$x_{17} = -1.36052, x_{18} = -1.18286, x_{19} = -1.06089,$$
$$x_{20} = -1.00755, x_{21} = -1.00011, x_{22} = -1.00000$$

και αφού $|x_{21} - x_{22}| < \varepsilon$ για πρώτη φορά, σταματάμε τη διαδικασία δεχόμενοι ως ρίζα το x_{22}.

Παρατηρήσαμε ότι χρειάστηκε ένας μεγάλος αριθμός επαναλήψεων για να προσεγγίσουμε τη ρίζα. Όπως βλέπουμε στο σχήμα οι εφαπτόμενες στην καμπύλη $f(x)$ στην περιοχή δεξιά από τη ρίζα $x* = -1$ μηδενίζονται σχεδόν σε διάφορα σημεία (η γραφική τους παράσταση είναι ευθείες σχεδόν παράλληλες με τον άξονα $x'x$). Αρχικές προσεγγίσεις (x_0) που λαμβάνονται στην περιοχή αυτή δημιουργούν πρόβλημα στη σύγκλιση.



◄

►**Άσκηση:** Να προσεγγίσετε μια πραγματική ρίζα της συνάρτησης $f(x) = e^{\sin(x-3)} - 1$ με τη μέθοδο Newton – Raphson. Λάβετε αρχικό σημείο $x_0 = -1$ και κριτήριο διακοπής $\varepsilon = 10^{-1}$.

Λύση. Υπολογίζουμε την παράγωγο

$$\boldsymbol{f'(x) = e^{sin(x-3)} cos(x-3)}$$

και φτιάχνουμε τον τύπο της N-R

$$x_{n+1} = x_n - \frac{e^{sin(x_n-3)}-1}{e^{sin(x_n-3)}\, cos(x_n-3)}.$$

Οπότε έχουμε

$$x_1 = -1 - \frac{e^{sin(-1-3)} - 1}{e^{sin(-1-3)}\, cos(-1-3)} =$$

$$= -1 - \frac{e^{0.75680249530792} - 1}{e^{0.75680249530792} \cdot (-0.653643620863612)}$$

$$= -1 - \frac{1.13144999151440}{-1.39320869014319} = -0.18788190202997$$

Προχωράμε με τον ίδιο τρόπο και υπολογίζουμε

$$x_2 = -0.14261495311711$$

και επειδή $|x_2 - x_1| > \varepsilon$ συνεχίζουμε λαμβάνοντας

$$x_3 = -0.14159317560389, \quad x_4 = -0.14159265358993,$$

και

$$x_5 = -0.14159265358979,$$

οπότε και σταματάμε διότι $|x_5 - x_4| < 10^{-1}$, δεχόμενοι το x_5 ως ρίζα. ◄

Αριθμητικές Μέθοδοι Ολοκλήρωσης

Η πιθανότητα να μπορέσουμε να βρούμε το ορισμένο ολοκλήρωμα μιας συνάρτησης, παρόλα όσα θα αναπτυχθούν σε επόμενο κεφάλαιο, είναι απειροελάχιστη. Ακόμη και απλές περιπτώσεις δεν οδηγούν σε αποτέλεσμα με αναλυτικό τύπο. Για παράδειγμα, δεν υπάρχουν αναλυτικοί τύποι για να υπολογίσετε τα

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx\,, \qquad \int_0^1 \boldsymbol{sin}\, x^2\, dx,$$

ή τα

$$\int_0^1 cos\, x^2\, dx\,, \qquad \int_0^{\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2 + sin\, x}}\, dx.$$

Δηλαδή δεν είναι δυνατόν, εμπλέκοντας απλές συναρτήσεις, να βρείτε «βολικά» αποτελέσματα της μορφής:

$$\int_0^2 e^x dx = e^2 - 1 \quad \textbf{ή} \quad \int_0^{\pi/16} \boldsymbol{sin}\, x\, dx = 1 - \boldsymbol{cos}\frac{\pi}{16}$$

Όμως και το $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ υπάρχει, αφού είναι ένα συγκεκριμένο εμβαδό, ομοίως υπάρχει το $\int_0^1 sin\, x^2\, dx$, καθώς και τα υπόλοιπα. Πώς τα υπολογίζουμε λοιπόν;

Αρχικά ενδιαφερόμαστε για μια προσέγγιση της μορφής:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i\, f(x_i)$$

όπου w_i βάρη και x_i σημεία στο διάστημα ολοκλήρωσης $[a, b]$.

Τύποι Newton - Cotes

Όμως, επειδή ο παραπάνω τύπος είναι σχετικά αόριστος, ας επικεντρωθούμε στην περίπτωση που έχουμε μια διαμέριση P, με n σημεία στο διάστημα ολοκλήρωσης, που απέχουν ίσες αποστάσεις μεταξύ τους, έστω $\Delta t = h$:

$$P = \{a = x_o, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h, \dots, b = x_n = x_0 + nh\}.$$

Τώρα μας ενδιαφέρει η προσέγγιση να έχει τη μορφή:

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} f(x)dx \approx h \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_0 + ih) \qquad (1)$$

Αναπτύσσοντας τα δύο μέλη της (1) κατά Taylor σε δυνάμεις του h, εξισώνουμε τόσους όρους όσοι είναι και συντελεστές w που έχουμε διαθέσιμους. Έτσι λαμβάνουμε διάφορους τύπους ολοκλήρωσης.

Για $n = 0$ η (1) γίνεται:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx hf(x_0)}$$

Αυτός είναι ο τύπος του **ορθογωνίου** και η διαδοχική εφαρμογή του μας δίνει τον **σύνθετο τύπο του ορθογωνίου**:

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} f(x)dx \approx h\begin{pmatrix} f(x_0)+f(x_0+h)+f(x_0+2h)+ \\ \cdots+f(x_0+(n-2)h)+f(x_0+(n-1)h) \end{pmatrix}$$

Έστω ότι $n=1$, τότε η (1) γίνεται:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx h\big(w_1 f(x_0)+w_2 f(x_0+h)\big).$$

Αναπτύσσουμε. Στο αριστερό μέλος, αφού θέσουμε για την ολοκλήρωση $u=x-x_0$, οπότε $du=dx$, λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned} i_1 &= \int_{x=x_0}^{x_0+h} f(x)dx = \int_{u=0}^{u=h} f(x_0+u)\,du \\ &\approx \int_{u=0}^{u=h} \left(f(x_0)+uf'(x_0)+\frac{1}{2}u^2 f''(x_0)\right)du = \\ &= \left(hf(x_0)+\frac{1}{2}h^2 f'(x_0)+\frac{1}{6}h^3 f''(x_0)\right), \end{aligned}$$

Στο δεξιό μέλος έχουμε:

$$\begin{aligned} i_2 &= h\big(w_1 f(x_0)+w_2 f(x_0+h)\big) \\ &\approx hw_1 f(x_0)+hw_2\left(f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{1}{2}hf''(x_0)\right) = \\ &= hf(x_0)(w_1+w_2)+h^2 w_2 f'(x_0)+\frac{1}{2}h^3 w_2 f''(x_0). \end{aligned}$$

Αφού διαθέτουμε δύο άγνωστους (τα λεγόμενα και βάρη w_1, w_2), εξισώνοντας τους συντελεστές των δυνάμεων h και h^2, των πολυωνύμων i_1 και i_2, έχουμε:

$$w_1+w_2=1, \quad w_2=\tfrac{1}{2},$$

δηλαδή $w_1=\frac{1}{2}$ και $w_2=\frac{1}{2}$. Οπότε η (1) γίνεται:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\big(f(x_0)+f(x_0+h)\big)$$

Αυτός είναι ο τύπος του **τραπεζίου** για διαμέριση δύο σημείων. Είναι φανερό ότι διαδοχική εφαρμογή του μας δίνει τον **σύνθετο τύπο του τραπεζίου**:

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\begin{pmatrix} f(x_0)+2f(x_0+h)+2f(x_0+2h)+ \\ \cdots+2f(x_0+(n-1)h)+f(x_0+nh) \end{pmatrix}$$

Αντικαθιστώντας στη διαφορά i_1-i_2 τις τιμές των βαρών w_1, w_2 που βρήκαμε, προκύπτει μια σειρά ως προς h που είναι το σφάλμα της προσέγγισης. Ο κυρίαρχος όρος στη σειρά αυτή είναι ο h^3. Επειδή το $0 < h << 1$ το h^3 είναι μεγαλύτερο από τα h^4, h^5και τους υπόλοιπους όρους του σφάλματος. Έχουμε λοιπόν

$$i_1 - i_2 = h^3 \frac{f''(x_0)}{12} + h^4 \frac{f'''(x_0)}{24} + h^4 \frac{f^{(4)}(x_0)}{80} + \cdots.$$

Εφαρμόζοντας και επεκτείνοντας τα αποτελέσματα του θεωρήματος Taylor και του ολοκληρωτικού λογισμού αποδεικνύεται ότι το σφάλμα στον απλό τύπο του τραπεζίου είναι τελικά

$$h^3 \frac{f''(\xi)}{12}$$

για κάποιο $\xi \in [x_0, x_1]$.

Έστω τώρα ότι $n = 2$, τότε η (1) γίνεται:

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x)dx \approx h\big(w_1 f(x_0) + w_2 f(x_0 + h) + w_3 f(x_0 + 2h)\big).$$

Αναπτύσσουμε. Θέτοντας για την ολοκλήρωση, $u = x - x_0$, οπότε $du = dx$, λαμβάνουμε από αριστερά:

$$\begin{aligned} i_1 &= \int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx \\ &= \int_{u=0}^{2h} \left(f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) + \frac{1}{6}h^3 f'''(x_0) \right) du = \\ &= \left(2hf(x_0) + 2h^2 f'(x_0) + \frac{4}{3}h^3 f''(x_0) + \frac{2}{3}h^4 f'''(x_0) \right) \end{aligned}$$

Επίσης από δεξιά έχουμε:

$$\begin{aligned} i_2 &= h\big(w_1 f(x_0) + w_2 f(x_0 + h) + w_3 f(x_0 + 2h)\big) \approx \\ &\approx hf(x_0)(w_1 + w_2 + w_3) + h^2(w_2 + 2w_3)f'(x_0) + \\ &\quad + \frac{1}{2}h^3(w_2 + 4w_3)f''(x_0) + \frac{1}{6}h^4(w_2 + 8w_3)f'''(x_0) \end{aligned}$$

Εξισώνοντας τώρα τους συντελεστές των αντίστοιχων δυνάμεων h, h^2 και h^3 των δύο πολυωνύμων i_1, i_2, έχουμε:

$$\begin{aligned} &w_1 + w_2 + w_3 = 2, \\ &w_2 + 2w_3 = 2, \\ &\frac{1}{2}(w_2 + 4w_3) = \frac{4}{3} \end{aligned}$$

δηλαδή $w_1 = \frac{1}{3}$, $w_2 = \frac{4}{3}$, $w_3 = \frac{1}{3}$. Οπότε η (1) γίνεται:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\big(f(x_0) + 4f(x_0 + h) + f(x_0 + 2h)\big)}$$

Αυτός είναι ο **τύπος του Simpson** που ονομάστηκε προς τιμή του Βρετανού μαθηματικού Thomas Simpson (1710-1761). Ο τύπος αυτός είναι από τους πιο διαδεδομένους και ένας από τους λόγους αναλύεται αμέσως παρακάτω.

Αφαιρώντας από τις παραπάνω αναπτύξεις τους συντελεστές των δυνάμεων του h^4, βρίσκουμε το συντελεστή του κυρίαρχου όρου του σφάλματος που είναι μηδέν! Αυτό σημαίνει ότι το σφάλμα είναι μεγαλύτερης τάξης ως προς το h. Και αφού το h είναι, σχεδόν πάντα, ένας αριθμός μικρότερος από το 1, το σφάλμα μικραίνει όσο μεγαλώνουν οι δυνάμεις του h. Πράγματι εργαζόμενοι όπως πριν βρίσκουμε ότι το σφάλμα της μεθόδου είναι

$$h^5 \frac{f^{(4)}(\xi)}{12}$$

για κάποιο $\xi \in [x_0, x_2]$. Βέβαια υπονοείται ότι οι συναρτήσεις είναι συνεχώς παραγωγίσιμες μέχρι την τάξη που απαιτείται. Είναι φανερό ότι μια απλή ασυνέχεια μέσα στο $[x_0, x_2]$ είναι αρκετή για να καταστρέψει κάθε είδους προσέγγιση.

Διαδοχική εφαρμογή του απλού τύπου μας δίνει τον **σύνθετο τύπο του Simpson**:

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\begin{pmatrix} f(x_0) + 4f(x_0+h) + 2f(x_0+2h) + \\ +4f(x_0+3h) + 2f(x_0+4h) + \\ \cdots + \cdots \\ \cdots + 4f(x_0+(n-1)h) + f(x_0+nh) \end{pmatrix}$$

Πρέπει να δοθεί προσοχή στο ότι ο τύπος αυτός εφαρμόζεται για **άρτιο *n***, ενθυμούμενοι ότι ξεκινάμε από το x_0.

Με ανάλογο τρόπο προκύπτουν τύποι για $n = 3,4, \ldots$

Αν η διαμέριση περιέχει σημεία που δεν ισαπέχουν και στη θέση του (1) επιλέγουμε την μορφή

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx h\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_0 + c_i h) \tag{2}$$

όπου για τα σημεία $x_i = x_0 + c_i h$ έχουμε $0 \le c_i \le 1$, τότε εργαζόμενοι όπως πριν προκύπτουν οι τύποι του Gauss.

Έστω ότι $n = 1$, τότε η (2) γίνεται τελικά:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx hf\left(x_0 + \frac{1}{2}h\right)$$

Το σφάλμα είναι $\frac{1}{24}h^3 f''(\xi)$ για κάποιο $\xi \in [x_0, x_0 + h]$.

Για $n = 2$, λαμβάνουμε:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx h\begin{pmatrix} \frac{1}{2}f\left(x_0 + \frac{1}{6}(3-\sqrt{3})h\right) \\ +\frac{1}{2}f\left(x_0 + \frac{1}{6}(3+\sqrt{3})h\right) \end{pmatrix}$$

με σφάλμα $\frac{1}{4320}h^5 f^{(4)}(\xi)$ για κάποιο $\xi \in [x_0, x_0 + h]$.

Υπάρχουν πολλές παραλλαγές των μεθόδων Gauss. Π.χ. οι μέθοδοι Gauss – Lobatto, όπου απαιτείται η παρουσία των ακραίων σημείων (δηλ. $c_1 = 0, \;\; c_n = 1$στον τύπο (2)).

►**Άσκηση:** Να προσεγγισθεί η τιμή του ολοκληρώματος

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin x \, dx,$$

με τους κανόνες ορθογωνίου, τραπεζίου και Simpson, χωρίζοντας το διάστημα ολοκλήρωσης σε n=6 υποδιαστήματα. Γράψτε τα αποτελέσματα με 6 ψηφία ακρίβεια.

Λύση. Τα σημεία της διαμέρισης είναι τα:

$$t_0 = 0, t_1 = \frac{\pi}{12}, t_2 = \frac{\pi}{6}, t_3 = \frac{\pi}{4}, t_4 = \frac{\pi}{3}, t_5 = \frac{5\pi}{12}, t_6 = \frac{\pi}{2}$$

αφού $h = \Delta t = \frac{\pi}{12}$. Οι τιμές της συνάρτησης στα σημεία αυτά είναι

$$f_0 = \sin 0 = 0 \qquad f_1 = \sin\frac{\pi}{12} \approx 0.258819 \qquad f_2 = \sin\frac{\pi}{6} = 0.5$$

$$f_3 = \sin\frac{\pi}{4} \approx 0.707107 \qquad f_4 = \sin\frac{\pi}{3} \approx 0.866025 \qquad f_5 = \sin\frac{5\pi}{12} \approx 0.965926$$

$$f_6 = \sin\frac{\pi}{2} = 1$$

Με τον κανόνα του ορθογωνίου έχουμε:

$$\int_0^{\pi/2} f(x)dx \approx \frac{\pi}{12}\left(f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_5\right) =$$

$$= 0.261799\begin{pmatrix} 0 + 0.258819 + 0.5 + 0.707107 \\ +0.866025 + 0.965926 \end{pmatrix} \approx 0.863382$$

Με τον κανόνα του τραπεζίου έχουμε:

$$\int_0^{\pi/2} f(x)dx \approx \frac{\pi}{12}\left(f_1 + f_2 + \cdots + f_5\right) + \frac{\pi}{24}\left(f_0 + f_6\right) =$$

$$= 0.261799\begin{pmatrix} 0.258819 + 0.5 + 0.707107 \\ +0.866025 + 0.965926 \end{pmatrix} + 0.130900(0 + 1) \approx 0.994282$$

Ο σύνθετος τύπος Simpson είναι

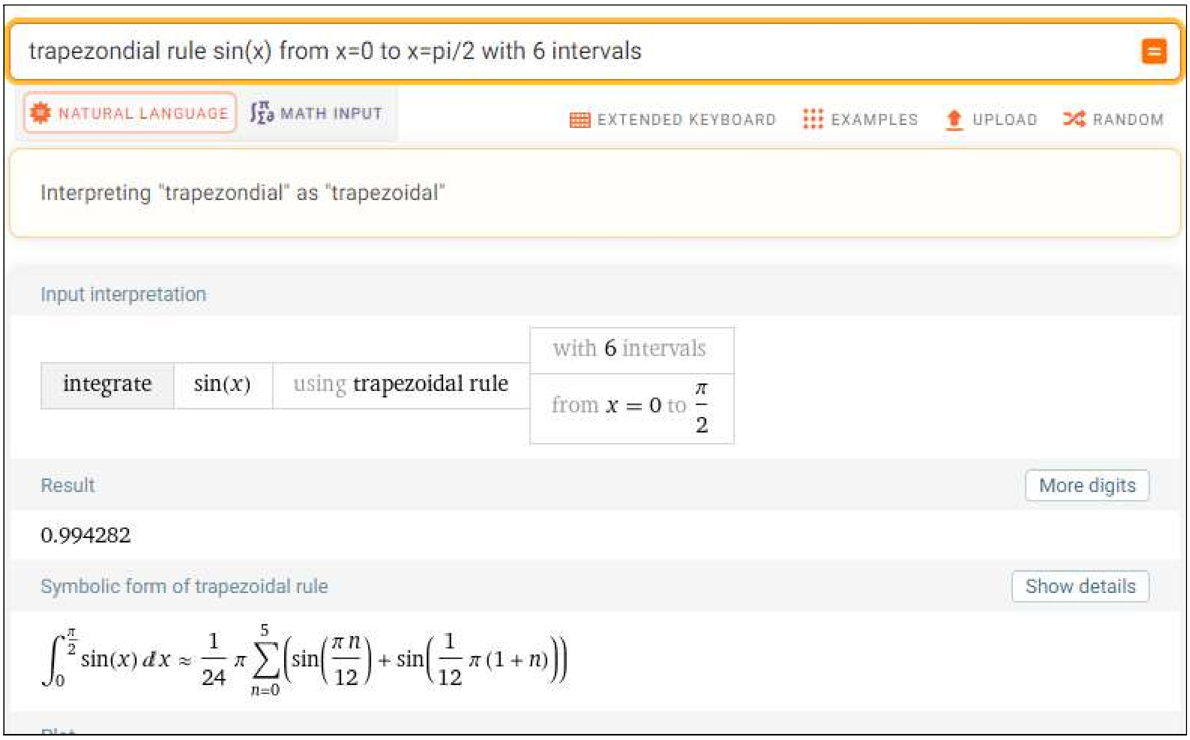
$$\int_a^\beta f(x)\, dx \approx \frac{\pi}{36}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + f_6) =$$

$$= 0.174533\begin{pmatrix} 0 + 4 \cdot 0.258819 + 2 \cdot 0.5 + 4 \cdot 0.707107 \\ +2 \cdot 0.866025 + 4 \cdot 0.965926 + 1 \end{pmatrix} \approx 1.000026$$

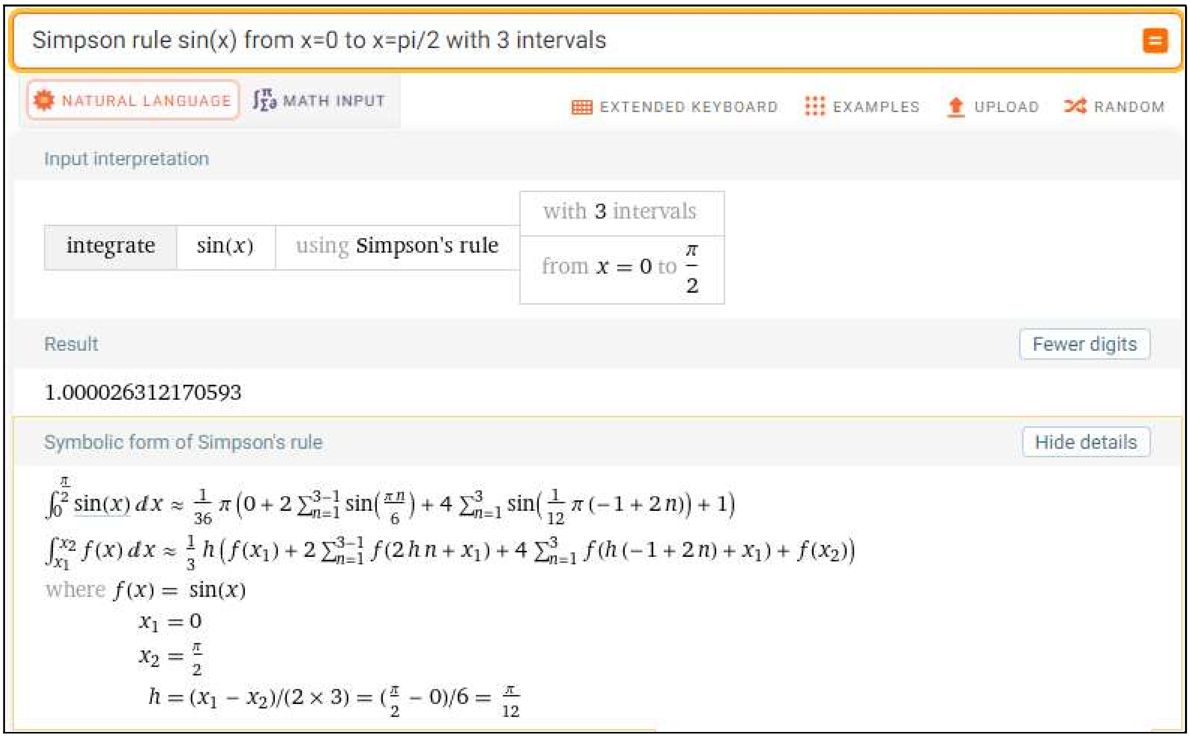
Παρατηρούμε ότι το σφάλμα είναι $2.6 \cdot 10^{-5}$ ενώ για τον τύπο του τραπεζίου είχαμε σφάλμα στο 3ο δεκαδικό ψηφίο.

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να παραχθεί μέσω της διαδικτυακής εφαρμογής WolframAlpha, όπως φαίνεται παρακάτω. Προσοχή! Στην Simpson ζητάμε 3 διαστήματα.

Κανόνας τραπεζίου με 6 υποδιαστήματα.



Κανόνας Simpson με 3 υποδιαστήματα.



Για τον κανόνα του ορθογωνίου γράφουμε "left endpoint rule".

►**Άσκηση:** Να προσεγγισθεί η τιμή του ολοκληρώματος

$$\int_0^1 x^3\,dx$$

με τον κανόνα Simpson χωρίζοντας το διάστημα ολοκλήρωσης σε n=2 υποδιαστήματα. Γράψτε τα αποτελέσματα με απόλυτη ακρίβεια.

Λύση. Τα σημεία της διαμέρισης είναι $t_0 = 0,\ \ t_1 = 0.5,\ \ t_2 = 1$ και η συνάρτηση παίρνει τιμές $f_0 = 0,\ f_1 = 0.5^3 = 0.125,\ \ t_2 = 1^3$.

Εφαρμόζοντας τον απλό τύπο του Simpson έχουμε:

$$\int_0^1 x^3 dx \approx \frac{0.5}{3}(0 + 4 \cdot 0.125 + 1) = 0.25$$

Όμως εδώ δεν βρήκαμε απλά μια προσέγγιση, αλλά την ακριβή τιμή του ολοκληρώματος. Αυτό συμβαίνει διότι ο κανόνας Simpson ολοκληρώνει ακριβώς τα πολυώνυμα 3ου βαθμού αφού από κατασκευής έχουν μηδενιστεί οι σχετικοί συντελεστές στα αναπτύγματα Taylor. ◄

►**Άσκηση:** Να προσεγγισθεί η τιμή του ολοκληρώματος

$$I = \int_0^{1/4} \frac{1}{\sqrt{x}} dx$$

με τον κανόνα Gauss 2 σημείων.

Λύση. Αφού $h = \frac{1}{4}$, τα σημεία που θα υπολογίσουμε την συνάρτηση είναι τα

$$t_1 = \tfrac{1}{6}(3 - \sqrt{3}) \cdot \tfrac{1}{4},\quad t_2 = \tfrac{1}{6}(3 + \sqrt{3}) \cdot \tfrac{1}{4}.$$

Η συνάρτηση στα σημεία αυτά έχει τιμή

$$f_1 \approx 4.35066,\ f_2 \approx 2.25207$$

και με βάση τον σχετικό τύπο έχουμε

$$I = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}f_2\right) \approx 0.82534$$

Το σημαντικό εδώ είναι ότι δεν ορίζεται η συνάρτηση στο αριστερό άκρο αλλά το δοσμένο ολοκλήρωμα υπάρχει. Με τον τύπο του Gauss αποφύγαμε τον υπολογισμό στο μηδέν κάτι αναπόφευκτο στους κλειστούς τύπους Newton – Cotes. ◄