NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
School of Mechanical Engineering
Lab. Of Thermal Turbomachines
Parallel CFD & Optimization Unit (PCOpt/NTUA)

Αριθμητική Ολοκλήρωση – Numerical Integration

Kyriakos C. GIANNAKOGLOU, Professor NTUA
kgianna@mail.ntua.gr
http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research

Αριθμητική Ολοκλήρωση – Το ζητούμενο (σενάριο 1)

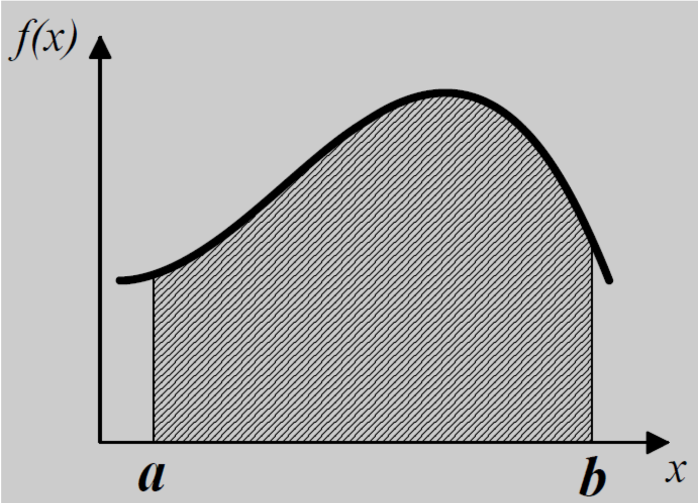
Ζητείται να προσεγγιστεί το ολοκλήρωμα:

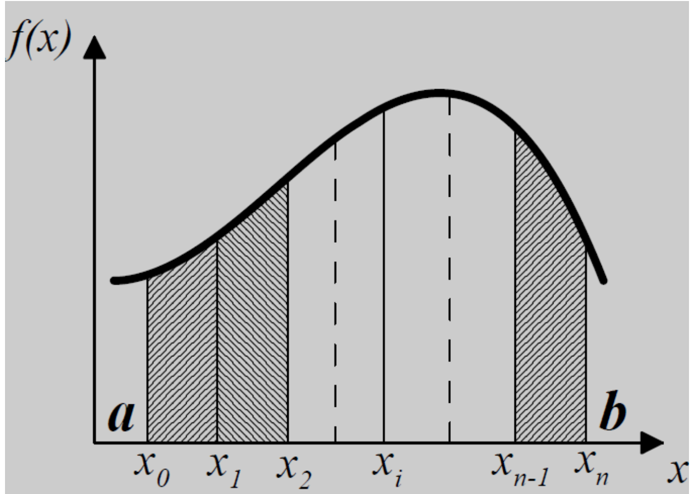
$$I = \int_a^b f(x)dx$$

Για δεδομένα α και β (α<β) και δεδομένη “πολύπλοκη” συνάρτηση f(x). Το ολοκλήρωμα προσεγγίζεται ως:

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \right)$$

Χρησιμοποιώντας N+1 σημεία (x_i,y_i).
Ισαπέχοντα ή μη-ισαπέχοντα κατά x?
Τι ακόμη χρειάζεται?



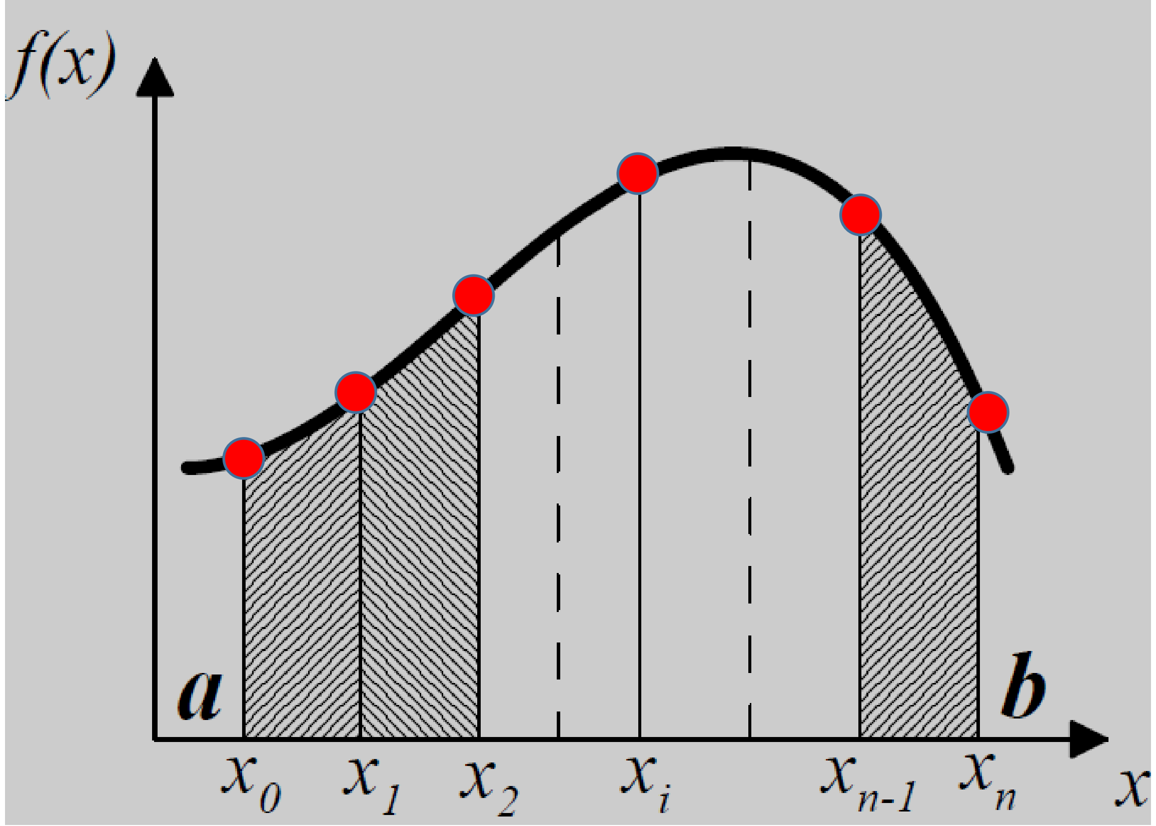


Αριθμητική Ολοκλήρωση – Το ζητούμενο (σενάριο 2)

Δίνονται οι συν/νες (x_i,y_i) N+1 σημείων επί (μη δοσμένης) καμπύλης.
Ισαπέχοντα ή μη-ισαπέχοντα κατά x?
Ζητείται να προσεγγιστεί το ολοκλήρωμα:

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

όπου α=x_0 και b=x_N.



Τι ακόμη χρειάζεται?

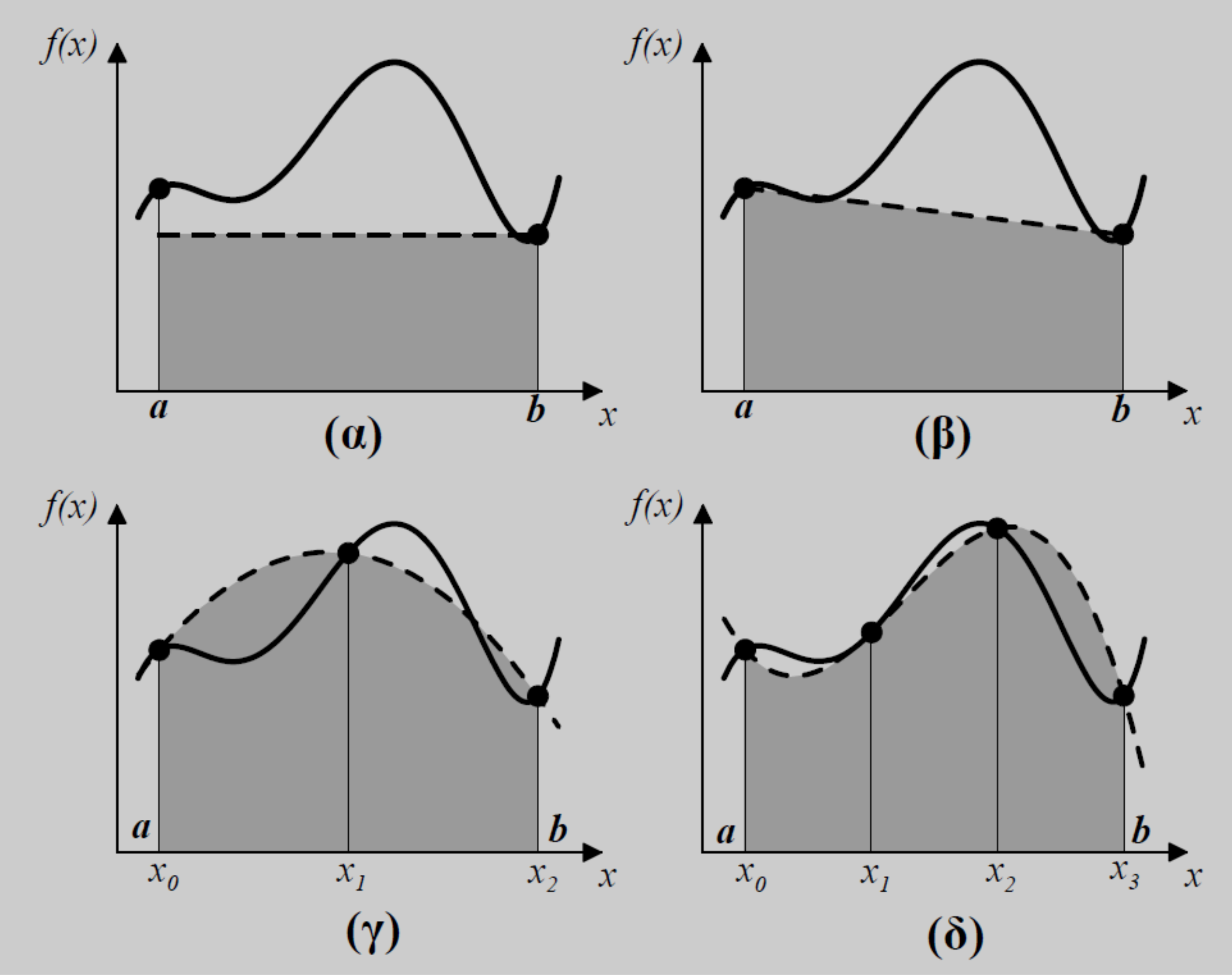
<u>ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ (CONCEPT):</u> Παρεμβολή με κάποιον από τους γνωστούς τρόπους (σφάλμα παρεμβολής/προσέγγισης) & <u>ακριβής</u> ολοκλήρωση του πολυωνύμου παρεμβολής/προσέγγισης.

Αριθμητική Ολοκλήρωση για «λίγα» διαστήματα

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b p_m(x)dx$$

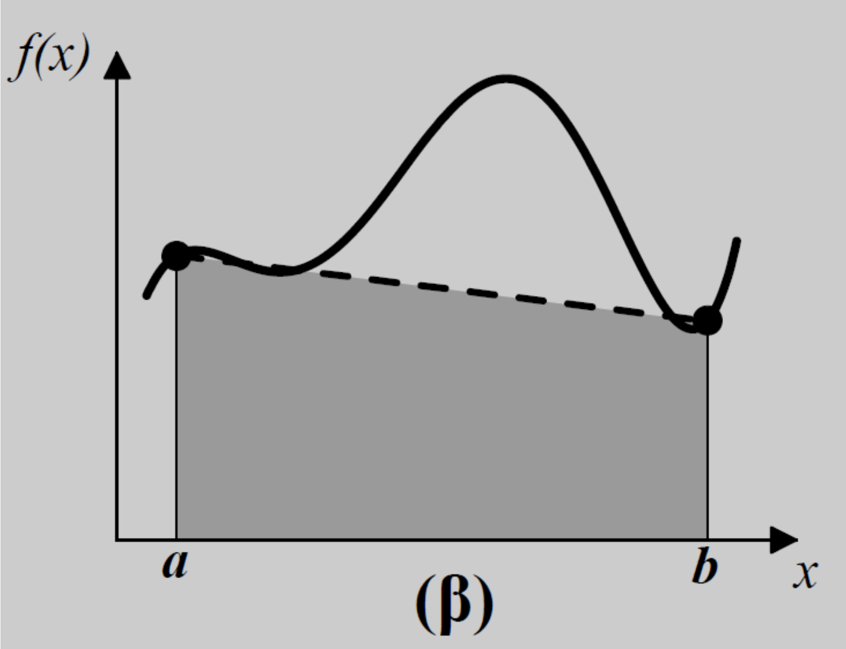
όπου pm πολυώνυμο βαθμού m.
Πόσα διαστήματα χρειάζονται;

- **Μέθοδος ορθογωνίου, m=0**
- **Μέθοδος τραπεζίου, m=1**
- **Μέθοδος Simpson 1/3, m=2**
- **Μέθοδος Simpson 3/8, m=3**
- **…..**



Μέθοδος Τραπεζίου

Γραμμικό πολυώνυμο (m=1)



$$p_1(x) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\,(x - a) + f(a)$$

$$I = (b - a)\,\frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Μέθοδος Simpson 1/3

Τετραγωνικό πολυώνυμο (m=2)

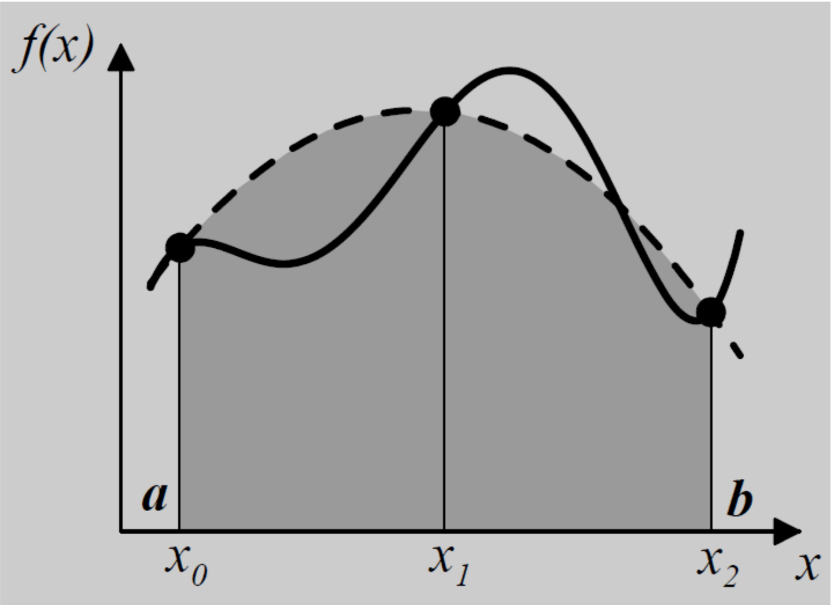
$$I=\int_a^b p_2(x)dx=\int_{x_0}^{x_2}(\alpha_2 x^2+\alpha_1 x+\alpha_0)dx=\left(\frac{1}{3}\alpha_2 x^3+\frac{1}{2}\alpha_1 x^2+\alpha_0 x\right)\Big|_{x_0}^{x_2}=$$

$$=\frac{(x_2-x_0)}{6}\left[2\alpha_2(x_2^2+x_0x_2+x_0^2)+3\alpha_1(x_2+x_0)+6a_0\right]=\frac{(b-a)}{6}\Big[(\alpha_2 x_0^2+a_1x_0+a_0)$$

$$+(a_2x_2^2+a_1x_2+a_0)+\alpha_2(x_0^2+x_2^2+2x_0x_2)+2a_1(x_0+x_2)+4a_0\Big]=$$

$$=\frac{(b-a)}{6}\left[f(x_0)+f(x_2)+4a_2\left(\frac{x_0+x_2}{2}\right)^2+4a_1\left(\frac{x_0+x_2}{2}\right)+4a_0\right]\Rightarrow$$

$$I=(b-a)\,\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}$$

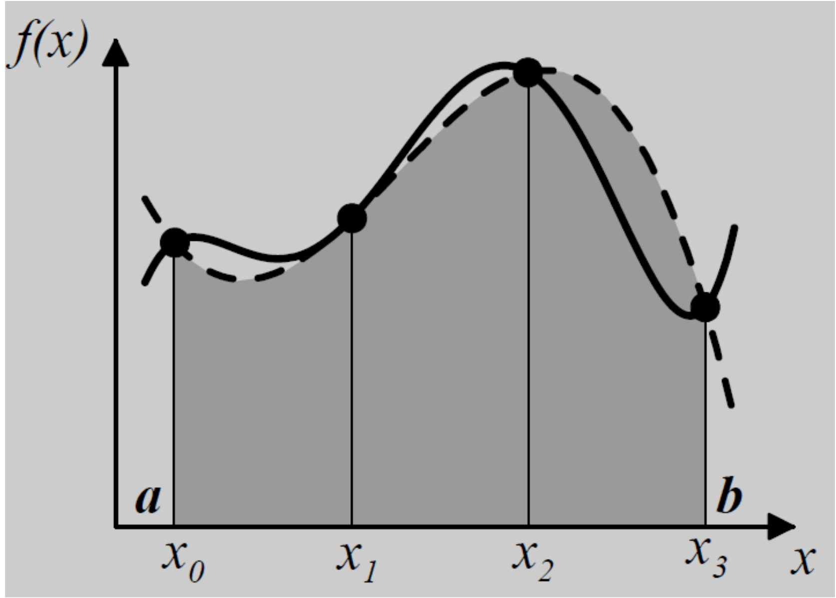


Δύο ίσα διαδοχικά διαστήματα

Μέθοδος Simpson 3/8

Κυβικό πολυώνυμο (m=3)

$$I = (b-a)\,\frac{f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)}{8}$$



Τρία ίσα διαδοχικά διαστήματα

Εκτίμηση Σφάλματος Ολοκλήρωσης (για min. Πλήθος Διαστημάτων)

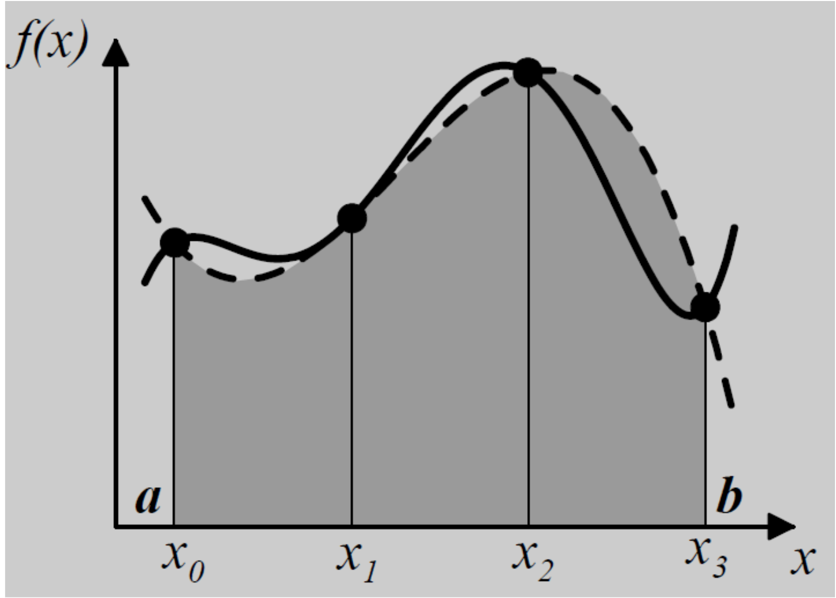
Τρόπος εκτίμησης σφάλματος:

$$E_t = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_m(x)dx$$

$$f(x) = f(x_0) + \Delta f(x_0)\cdot\delta + \frac{f''(\xi)}{2!}h^2\,\delta(\delta-1)$$

$$\Delta f(x_0) = f(x) - f(x_0), \quad \delta = (x - x_0)/h$$

Βλ. βιβλίο μαθήματος.



Ή κάποιο αντίστοιχο, ανάλογα με την τιμή του m.

Εκτίμηση Σφάλματος Ολοκλήρωσης (για min. Πλήθος Διαστημάτων)

- **Μέθοδος ορθογωνίου, m=0**

$$E = \pm\frac{1}{2}(b-a)^2 f'(\xi)$$

- **Μέθοδος τραπεζίου, m=1**

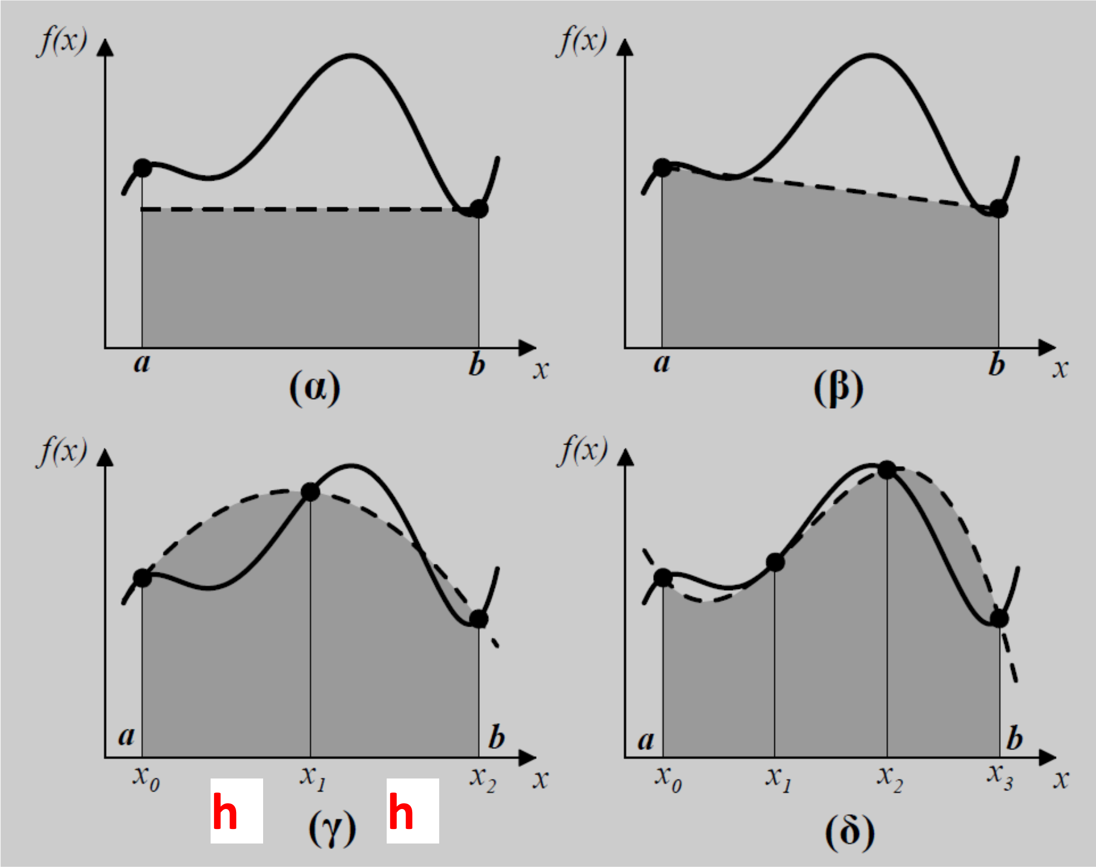
$$E = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi)$$

- **Μέθοδος Simpson 1/3, m=2**

$$E = -\frac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$$

- **Μέθοδος Simpson 3/8, m=3**

$$E = -\frac{1}{6480}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$$



όπου ξ σημείο στο [α,b]

Ξαναγράψτε τους τύπους με το διάστημα h.

Εκτίμηση Σφάλματος Ολοκλήρωσης για Πολλά Ισαπέχοντα Διαστήματα

Μέθοδος τραπεζίου, m=1. Τύπος:

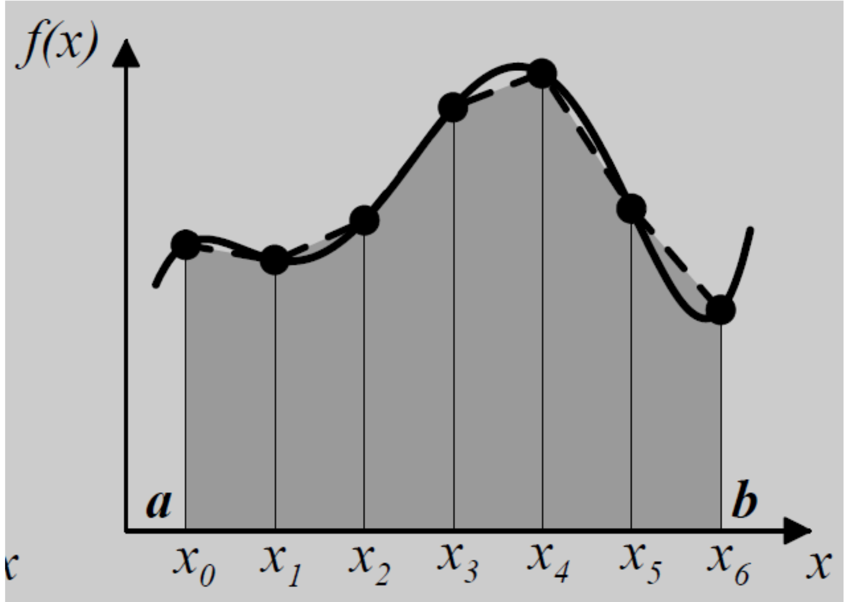
$$I \cong (b-a)\frac{f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)}{2n}$$

Συνολικό Σφάλμα:

$$E \cong -\frac{1}{12n^2}(b-a)^3\,\overline{f}'' = -\frac{h^3}{12}\,n\,\overline{f}''$$

όπου η μέση τιμή της παραγώγου:

$$\bar{f}^{(m)} \cong \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f^{(m)}(\xi_i) \qquad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$$



Ενδεικτικό παράδειγμα για τη μέθοδο του τραπεζίου με 7 ισαπέχοντα σημεία ή 6 ίσα διαστήματα.

Εκτίμηση Σφάλματος Ολοκλήρωσης για Πολλά Ισαπέχοντα Διαστήματα

Μέθοδος Simpson 1/3, m=2. Τύπος:

$$I \cong (b-a)\,\frac{f(x_0)+f(x_n)+4\sum\limits_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i)+2\sum\limits_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i)}{3n}$$

Συνολικό Σφάλμα:

$$E \cong -\frac{1}{180n^4}(b-a)^5\,\bar{f}^{(4)} = -\frac{h^5}{180}n\,\bar{f}^{(4)}$$

Πόσα πρέπει να είναι συνολικά τα (N+1) σημεία?

Ολοκλήρωση για Άνισα Διαστήματα

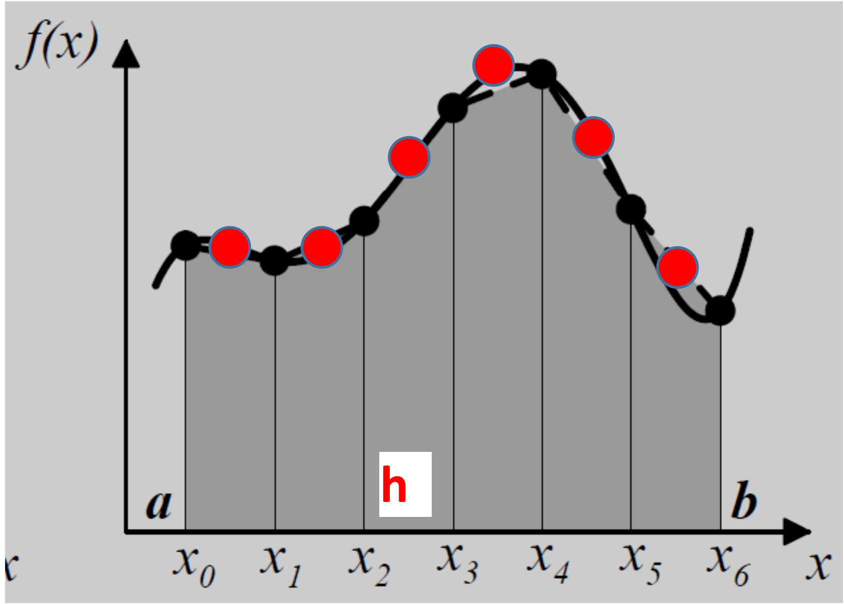
Μέθοδος τραπεζίου. Τύπος:

$$I \cong \sum_{i=0}^{n-1}\left[(x_{i+1}-x_i)\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right]=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-2}(x_{i+1}-x_i)f(x_i)+\frac{x_1-x_0}{2}f(x_0)+\frac{x_n-x_{n-1}}{2}f(x_n)$$

Καλό όμως είναι να αποφεύγεται!!!

Άλλες Ιδέες;;

Richardson Extrapolation



Εδώ, βασισμένη στη μέθοδο τραπεζίου:

$$E_n \cong -\frac{1}{12 n^2}(b-a)^3 \overline{f''}$$

Εφαρμογή για n_1 και $n_2=2n_1$ διαστήματα:

$$I = I_{n1} + E_{n1} = I_{n2} + E_{n2}$$

Υπόθεση (γιατί είναι υπόθεση;):

$$E_{n1} \cong E_{n2}\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \qquad (=4E_{n2})$$

Οπότε:

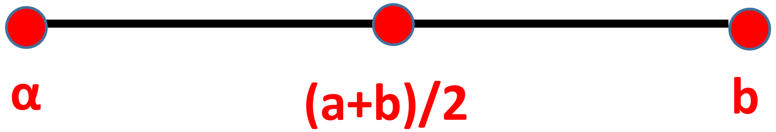
$$I = I_{n2} + E_{n2} \cong I_{n2} + \frac{I_{n2} - I_{n1}}{(n_2/n_1)^2 - 1} \quad \Rightarrow \quad I \cong \frac{4}{3} I_{n2} - \frac{1}{3} I_{n1}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

Εδώ, βασισμένη στη μέθοδο τραπεζίου:

$$I_{0,1} = \frac{(b-a)}{1}\left\{\frac{1}{2}\left[f(a)+f(b)\right]\right\}$$

Μηδενικό halving **Πρώτος «γύρος»**



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

$$= \frac{1}{2}\left\{I_{0,1} + (b-a)\, f\left(a+\frac{(b-a)}{2}\right)\right\}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

$$I_{2,1} = \frac{(b-a)}{4}\left\{\frac{1}{2}\left[f(a)+f(b)\right] + \sum_{i=1}^{3} f\left(a+\frac{(b-a)}{4}i\right)\right\} =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{I_{1,1} + \frac{(b-a)}{2}\sum_{\substack{i=1\\ \Delta i=2}}^{3} f\left(a+\frac{(b-a)}{4}i\right)\right\}$$

$$I_{3,1} = \cdots = \frac{1}{2}\left\{I_{2,1} + \frac{(b-a)}{4}\sum_{\substack{i=1\\ \Delta i=2}}^{7} f\left(a+\frac{(b-a)}{8}i\right)\right\}$$

$$I_{4,1} = \cdots = \frac{1}{2}\left\{I_{3,1} + \frac{(b-a)}{8}\sum_{\substack{i=1\\ \Delta i=2}}^{15} f\left(a+\frac{(b-a)}{16}i\right)\right\}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

Αναδρομικός Τύπος:

Ολοκλήρωση με τραπέζιο γιά τήν 1η στήλη:

$$I_{N,1} = \frac{1}{2}\left[I_{N-1,1} + \frac{b-a}{2^{N-1}} \sum_{\substack{i=1 \\ \Delta i=2}}^{2^N-1} f\left(a + \frac{b-a}{2^N}\, i\right)\right]$$

οπου το $I_{N,1}$ υπολογίζεται διαμερίζοντας το $[a,b]$ σέ 2^N ίσα διαστήματα

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

Τρόπος Εργασίας:

ΓΙΑ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΟΥ

$$\int_a^b f(x)\,dx = I$$

$$\begin{array}{llll}
I_{0,1} & I_{0,2} & I_{0,3} & I_{0,4} \;\cdots \\
I_{1,1} & I_{1,2} & I_{1,3} & \\
I_{2,1} & I_{2,2} & \vdots & \\
I_{3,1} & \vdots & & \\
\vdots & & &
\end{array}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

Χρήση Richardson Extrapolation:

- Τύπος γιά την "προς τα δεξιά" κίνηση (RICHARDSON)

$$\left.\begin{array}{l} I_{i,j-1} \\ I_{i+1,j-1} \end{array}\right\} \rightarrow I_{i,j}$$

$$I_{i,j} = \frac{4^{j-1} I_{i+1,j-1} - I_{i,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Repeated Interval Halving

Κριτήριο Σύγκλισης:

$$\begin{array}{llll} I_{0,1} & I_{0,2} & I_{0,3} & I_{0,4} \ \cdots \\ I_{1,1} & I_{1,2} & I_{1,3} & \\ I_{2,1} & I_{2,2} & \vdots & \\ I_{3,1} & \vdots & & \\ \vdots & & & \end{array}$$

Stop if $\left| I_{0,j} - I_{0,j-1} \right| < \varepsilon$

ε = μικρή ποσότητα

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Άσκηση Κατανόησης 1

$$I = \int_1^3 (x^3 - 2x^2 + 7x - 5)\,dx \qquad \left(= \frac{62}{3}\right)$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Άσκηση Κατανόησης 2

$$I = \frac{4}{3} I_{n_2} - \frac{1}{3} I_{n_1} \Rightarrow I = \frac{16}{15} I_{n_2} - \frac{1}{15} I_{n_1}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Άσκηση Κατανόησης 3

$$\left.\begin{matrix} I_{0,1} \\ I_{1,1} \end{matrix}\right\} \rightarrow I_{0,2}$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Άσκηση Κατανόησης 4

$$\ln 137{,}2 = \int_1^{137{,}2} \frac{1}{x}\,dx \ (= 4{,}921440)$$

Ολοκλήρωση κατά Romberg / Άσκηση Κατανόησης 4

N	$j=$ 1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	68.5964	24.1795	12.7845	8.05264	6.02881	5.24048	4.98842	4.93035	4.92208	4.92146
1	35.2837	13.4967	8.12658	6.03672	5.24125	4.98848	4.93035	4.92208	4.92146	4.92144
2	18.9434	8.46221	6.06937	5.24436	4.98873	4.93037	4.92208	4.92146	4.92144	4.92144
3	11.0825	6.21893	5.25725	4.98973	4.93042	4.92209	4.92146	4.92144	4.92144	4.92143
4	7.43482	5.31736	4.99391	4.93065	4.92209	4.92146	4.92144	4.92144	4.92143	4.92143
5	5.84672	5.01412	4.93164	4.92213	4.92146	4.92144	4.92144	4.92143	4.92143	
6	5.22227	4.93680	4.92228	4.92146	4.92144	4.92144	4.92143	4.92143		
7	5.00817	4.92318	4.92148	4.92144	4.92144	4.92143	4.92143			
8	4.94443	4.92158	4.92144	4.92144	4.92143	4.92143				
9	4.92730	4.92145	4.92144	4.92143	4.92143					
10	4.92291	4.92144	4.92143	4.92143						
11	4.92181	4.92144	4.92143							
12	4.92153	4.92143								
13	4.92145									

Προεργασία για την Ολοκλήρωση κατά Gauss - Gauss Quadrature

Μέχρι τώρα, το:

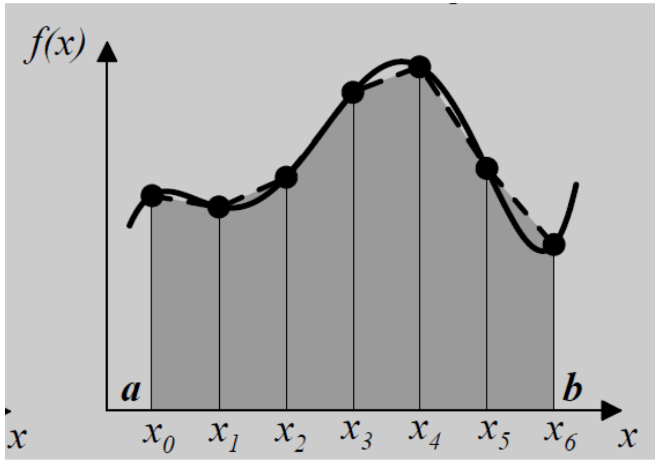
$$I = \int_a^b f(x)\,dx = ?$$

υπολογιζόταν έχοντας N+1 σημεία (x_i,y_i), όπου y_i=f(x_i). <u>**Πιθανά βήματα προσέγγισης του I:**</u>

1. **Εύρεση πολυωνύμου παρεμβολής**
2.

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{N} f(x_i) L_i(x)$$

3. **Αναλυτική ολοκλήρωση του πολυωνύμου παρεμβολής**



$$I = \int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{N} f(x_i) L_i(x)\right) dx = \sum_{i=0}^{N} f(x_i) \cdot \left\{ \int_a^b L_i(x)\,dx \right\} = \sum_{i=0}^{N} C_i f(x_i)$$

Προεργασία για την Ολοκλήρωση κατά Gauss - Gauss Quadrature

Προσοχή, τα σημεία δεν χρειάζεται να είναι από άκρου σε άκρο. Ένα παράδειγμα:

$$\int_{-2}^{2} f(x)\,dx = ?$$

Έστω με 3 σημεία, τα: $(-1, y_0),\ (\emptyset, y_1),\ (1, y_2)$

$$L_0 = \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} = \frac{1}{2}x(x-1)$$

$$L_1 = \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)} = -(x+1)(x-1)$$

$$L_2 = \frac{(x+1)(x-0)}{(1+1)(1-0)} = \frac{1}{2}x(x+1)$$

$$C_0 = \int_{-2}^{2} L_0(x)\,dx = \frac{8}{3}$$

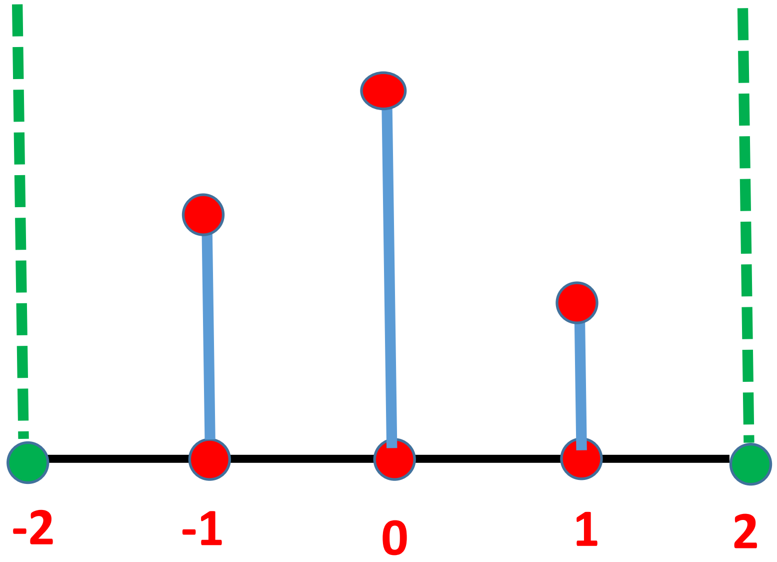
$$C_1 = -4/3$$

$$C_2 = \frac{8}{3}$$

Προεργασία για την Ολοκλήρωση κατά Gauss - Gauss Quadrature

Τελικός τύπος ολοκλήρωσης:

$$\boxed{\int_{-2}^{2} f(x)\,dx \cong \frac{8}{3} f(-1) - \frac{4}{3} f(0) + \frac{8}{3} f(1)}$$



Ολοκλήρωση κατά Gauss - Gauss Quadrature - Το Concept

Να μην γνωρίζω τις τιμές του x για τα N+1 σημεία στα οποία θα εφαρμοστούν τα προηγούμενα αλλά να προκύπτουν με κριτήριο το ελάχιστο σφάλμα ολοκλήρωσης.
Τελική υλοποίηση με σχέση της μορφής:

$$I \simeq \sum_{i=0}^{N} C_i f(x_i)$$

με 2N+2 αγνώστους: (N+1) θέσεις x_i και (N+1) συντελεστές C_i.

Οι σχέσεις της Gauss Quadrature (GQ) προκύπτουν για ολοκλήρωση στο [-1,+1] και εύκολα χρησιμοποιούνται (με έναν μετασχηματισμό) για ολοκλήρωση ανάμεσα σε δύο οποιαδήποτε όρια, [α,b]

Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ – Επίδειξη με ένα Παράδειγμα

Ζητείται τρόπος υπολογισμού του ολοκληρώματος

$$I = \int_{-1}^{1} f(t)\,dt = \sum_{i=0}^{N} C_i f(t_i)$$

χρησιμοποιώντας N+1=2 σημεία (κόμβους Gauss – Gauss nodes), άρα ως

$$I \cong C_0 f(t_0) + C_1 f(t_1)$$

4 άγνωστοι προς υπολογισμό: C_0, C_1, t_0, t_1.

Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ – Επίδειξη με ένα Παράδειγμα

Απαίτηση ακριβούς υπολογισμού των ολοκληρωμάτων με f(t)=1, t, t_2 και t_3. Γιατί;

$f(t)=1 \qquad I=\int_{-1}^{1} dt = 2 = c_0 f(t_0) + c_1 f(t_1) =$

$= c_0 + c_1$

$f(t)=t \qquad I=\int_{-1}^{1} t\,dt = \emptyset = c_0 t_0 + c_1 t_1$

$f(t)=t^2 \qquad I=\int_{-1}^{1} t^2 dt = \frac{2}{3} = c_0 t_0^2 + c_1 t_1^2$

$f(t)=t^3 \qquad I=\int_{-1}^{1} t^3 dt = \emptyset = c_0 t_0^3 + c_1 t_1^3$

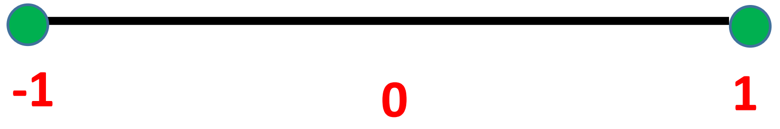
Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ – Επίδειξη με ένα Παράδειγμα

Με λύσεις:

$$C_0 = C_1 = 1 \qquad t_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \qquad t_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Άρα, τελικός τύπος ολοκλήρωσης οποιασδήποτε συνάρτησης f(t) στο [0,1]:

$$\boxed{I \cong f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)}$$



Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ – Χρήσιμοι Τύποι

- **N=1 ή 2 κόμβοι Gauss:**

$$C_0 = 1 \,,\; C_1 = 1$$
$$t_0 = -1/\sqrt{3} \,,\; t_1 = 1/\sqrt{3}$$

- **N=2 ή 3 κόμβοι Gauss:**

$$C_0 = C_2 = \frac{5}{9} \,,\; C_1 = \frac{8}{9}$$
$$t_0 = -\sqrt{0{,}6} \,,\; t_1 = \emptyset \,,\; t_2 = \sqrt{0{,}6}$$

- **N=3 ή 4 κόμβοι Gauss:**

$$C_0 = C_3 = 0{,}3478548 \,,\; C_1 = C_2 = 0{,}652145$$
$$t_0 = -t_3 = -0{,}861136 \quad t_1 = -t_2 = -0{,}339981$$

Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ - Ολοκλήρωση με άλλα όρια (α,b)

$$I = \int_a^b f(x)dx \qquad x = \left(\frac{b-a}{2}\right)t + \left(\frac{b+a}{2}\right) = \mu t + \lambda$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} f(x(t))\,\mu dt = \int_{-1}^{1} \underbrace{f(\mu t + \lambda)}_{F(t)}\,\mu dt$$

$$I = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} F(t)\,dt.$$

Ολοκλήρωση κατά Gauss - GQ – Εφαρμογή 1

$$\int_{3.1}^{3.9} f(x)\,dx = \int_{3.1}^{3.9} \frac{1}{x}\,dx =$$

Gauss Quadrature Theorem – Ανακεφαλαίωση

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \cong \sum_{i=0}^{N} C_i f(x_i)}$$

Πραγματοποιώντας την ολοκλήρωση με N+1 τυχαία σημεία x_i, (όχι τους κόμβους Gauss), μια τέτοια σχέση θα ήταν **ακριβής** για κάθε πολυώνυμο βαθμού **ως <u>και</u> N**. Τα x_i τα ορίσαμε εμείς, τα C_i θα βρεθούν ολοκληρώνοντας τα αντίστοιχα πολυώνυμα Lagrange, υπολογίζοντας δηλαδή:

$$\int_a^b L_i(x)\,dx$$

Αν, όμως, τα x_i επιλεγούν αν είναι οι κόμβοι Gauss, τότε μια τέτοια σχέση θα ήταν **ακριβής** για κάθε πολυώνυμο βαθμού **ως <u>και</u> 2N+1**. Με τις μέχρι τώρα γνώσεις, τα x_i και τα C_i θα βρεθούν ταυτόχρονα ικανοποιώντας ο τύπος GQ να υπολογίζει με απόλυτη ακρίβεια τα ολοκληρώματα των πρώτων 2N+2 μονωνύμων (2N+2 εξισώσεις για N+1 άγνωστα x_i και N+1 άγνωστα C_i).

Οι σχέσεις ολοκλήρωσης είναι διαθέσιμες για ολοκληρώματα στο [-1:1] και κάθε άλλο ολοκλήρωμα προκύπτει εύκολα με έναν γραμμικό μετασχηματισμό από το t∈[-1:1] στο x∈[α,β] (α,β άλλα όρια)!

Ολοκλήρωση κατά Gauss - 2ος τρόπος εύρεσης των t_i (ή x_i) (& C_i)

Ο προηγούμενος τρόπος εύρεσης των t_i (ή x_i) έχει εξαιρετικά απλή φυσική σημασία (ποιά;).

Ένας δεύτερος τρόπος είναι τα t_i (ή x_i) μπορούν να υπολογιστούν με απευθείας χρήση του θεωρήματος GQ (Gauss Quadrature Theorem).

Πλεονέκτημα: αυτοματοποίηση της διαδικασίας ειδικά για σχήματα με πολλούς κόμβους Gauss.

Gauss Quadrature Theorem

Το ολοκλήρωμα $\int_a^b f(x)\,dx$ προσεγγίζεται ως $\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{N} C_i f(x_i)$ με

$C_i = \int_a^b L_i(x)\,dx$ όπου $L_i(x)$ είναι τα πολυώνυμα Lagrange που αντιστοιχούν στα x_i στο [α,b].

Αν τα $(x_0, x_1, \dots, x_N) \in [a,b]$ είναι οι ρίζες πολυωνύμου βαθμού N+1 (του q(x)), τέτοιου ώστε:

$$\int_a^b x^k q(x)\,dx = 0 \qquad k=0,1,\dots,N$$

τότε το ολοκλήρωμα αυτό είναι ακριβές αν το f(x) είναι πολυώνυμο βαθμού $\leq 2N+1$.

Gauss Quadrature Theorem – Επίδειξη χρησιμότητας

Να (ξανα)βρεθεί ο τύπος της GQ ολοκλήρωσης με τρεις (N+1=3, ή N=2) κόμβους Gauss.

$$q(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

Απαιτώ να ισχύουν οι τρεις εξισώσεις, και από το σύστημά τους θα υπολογισθούν οι 4 άγνωστοι συντελεστές του q(x):

$$\left\{ \begin{aligned} &\int_{-1}^{1} (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3)\,dx = 0 \\ &\int_{-1}^{1} (a_0 x + a_1 x^2 + a_2 x^3 + a_3 x^4)\,dx = 0 \\ &\int_{-1}^{1} (a_0 x^2 + a_1 x^3 + a_2 x^4 + a_3 x^5)\,dx = 0. \end{aligned} \right.$$

Gauss Quadrature Theorem – Επίδειξη χρησιμότητας

$$\int_{-1}^{1}(a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3)\,dx=\emptyset$$

$$\int_{-1}^{1}(a_0x+a_1x^2+a_2x^3+a_3x^4)\,dx=\emptyset$$

$$\int_{-1}^{1}(a_0x^2+a_1x^3+a_2x^4+a_3x^5)\,dx=\emptyset.$$

Memo: Το ολοκλήρωμα κάθε περιττής συνάρτησης σε συμμετρικό διάστημα είναι μηδέν:

$$\int_{-1}^{1}x^{2\lambda+1}\,dx\equiv\emptyset$$

Άρα:

$$\int_{-1}^{1}(a_0+a_2x^2)\,dx=\emptyset \Rightarrow a_0+\frac{a_2}{3}=\emptyset$$

$$\int_{-1}^{1}(a_1x^2+a_3x^4)\,dx=\emptyset \Rightarrow \frac{a_1}{3}+\frac{a_3}{5}=\emptyset$$

$$\int_{-1}^{1}(a_0x^2+a_2x^4)\,dx=\emptyset \Rightarrow \frac{a_0}{3}+\frac{a_2}{5}=\emptyset$$

Ρίζες:

$\alpha_0=\alpha_2=0$

$\alpha_1=-3,\ \ \alpha_3=5$

$q(x)=5x^3-3x$

Gauss Quadrature Theorem – Επίδειξη χρησιμότητας

Οι ρίζες του: $q(x)=5x^3-3x$

είναι οι (θυμηθείτε τον ήδη τύπο GQ για 3 κόμβους Gauss – δείτε προηγουμένως):

$$c_0=c_2=\frac{8}{9}\ ,\quad c_1=\frac{5}{9}$$

$$t_0=-\sqrt{0{,}6}\ ,\quad t_1=0\ ,\quad t_2=\sqrt{0{,}6}$$

Gauss Quadrature Theorem – Πως βρέθηκαν τα C_i

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \cong C_0 f\left(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right) + C_1 f(0) + C_2 f\left(\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right)$$

$$\int_{-1}^{1} dx = 2 \Rightarrow C_0 + C_1 + C_2 = 2$$

$$\int_{-1}^{1} x\,dx = 0 \Rightarrow -\sqrt{\tfrac{3}{5}}C_0 + \sqrt{\tfrac{3}{5}}C_2 = 0$$

$$\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3} \Rightarrow \frac{3}{5}C_0 + \frac{3}{5}C_2 = \frac{2}{3}$$

Έχοντας τους κόμβους Gauss (x_i ή t_i), αρκεί να απαιτήσω ο τύπος GQ να υπολογίζει με απόλυτη ακρίβεια τα ολοκληρώματα των πρώτων N+1 μονωνύμων (N+1 εξισώσεις για N+1 άγνωστα C_i).

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \cong \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right)$$

√

Ολοκλήρωση κατά Gauss - 3ος τρόπος εύρεσης των t_i (ή x_i) (& C_i)

Ο τρίτος τρόπος εύρεσης των t_i (ή x_i) είναι με χρήση κατάλληλων ορθογώνιων πολυωνύμων.

Προσέξτε:

- **Πως ορίζονται τα ορθογώνια πολυώνυμα.**
- **Γιατί υπάρχουν πολλές οικογένειες ορθογωνίων πολυωνύμων. Γιατί δεν αρκούν τα προηγούμενα;**
- **Εύρος ολοκλήρωσης και συνάρτηση βάρους (νέα έννοια!!!!). Μέχρι τώρα η συνάρτηση βάρους ήταν η μονάδα (πρακτικά δεν υπήρχε).**
- **Η διαδικασία αυτή και πάλι δίνει τους κόμβους Gauss (x_i ή t_i), και εκκρεμεί μετά ο υπολογισμός των άγνωστων C_i.**

Ορθογώνια Πολυώνυμα

Τα πολυώνυμα $p_n(x)$ και $p_m(x)$, με τον κάτω δείκτη να εκφράζει το βαθμό τους, είναι ορθογώνια ως προς μια συνάρτηση βάρους w(x), στο διάστημα [a,b] αν και μόνο αν:

$$\int_a^b w(x)\,P_n(x)\,P_m(x)\,dx = 0 \qquad \text{για } n \neq m$$

$$\int_a^b w(x)\left[P_n(x)\right]^2 dx = c(n) \neq 0$$

Σημαντικό: Σε πολλές οικογένειες ορθογώνιων πολυωνύμων ισχύει ότι c(n)=1 (τότε λέγονται και ορθοκανονικά / orthonormal), αλλά αυτό δεν ισχύει για όλες τις οικογένειες.

Ορθογώνια Πολυώνυμα Legendre – Ολοκλήρωση Gauss-Legendre

Αν η συνάρτηση βάρους w(x)=1, και [a,b]=[-1,1]

$$\int_{-1}^{+1} P_m(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_m^n$$

$$P_0(x) = 1$$
$$P_1(x) = x$$
$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$
$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$
$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$
$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$
$$P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$$
$$\dots$$

Που τα έχετε δει ξανά;

Ορθογώνια Πολυώνυμα Legendre – Ολοκλήρωση Gauss-Legendre

$$P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x)$$

Αναδρομικός Τύπος

$$P_{n+1}(x)(n+1) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k}^2 \left(\frac{1+x}{2}\right)^{n-k} \left(\frac{1-x}{2}\right)^k$$

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}, \quad 0 \leq k \leq n \ (= 0, \ \text{αλλιώς})$$

Άρα, πλέον αυτό που μέχρι τώρα αναφέρονταν γενικά ως GQ, πλέον μπορεί να ονομάζεται ειδικά Ολοκλήρωση Gauss-Legendre!

Ορθογώνια Πολυώνυμα Laguerre – Ολοκλήρωση Gauss-Laguerre

Αν η συνάρτηση βάρους $w(x)=e^{-x}$, και $[a,b]=[0,\infty]$

$$\int_0^\infty f(x)e^{-x}dx$$

$$\int_0^\infty \mathcal{L}_n(x)\mathcal{L}_m(x)e^{-x}dx = 0, \text{ αν } n \neq m$$

$$\int_0^\infty [\mathcal{L}_n(x)]^2 e^{-x}dx = c(n) \neq 0, \; c(n) = \frac{\Gamma(n+1)}{n!}$$

Ορθογώνια Πολυώνυμα Laguerre – Ολοκλήρωση Gauss-Laguerre

$$\mathcal{L}_0(x) = 1$$

$$\mathcal{L}_1(x) = -x + 1$$

$$\mathcal{L}_2(x) = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$$

$$\mathcal{L}_3(x) = \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$$

$$\mathcal{L}_4(x) = \frac{1}{24}(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24)$$

$$\mathcal{L}_5(x) = \frac{1}{120}(-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120)$$

$$\mathcal{L}_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1}\left[(2n+1-x)\mathcal{L}_n(x) - n\mathcal{L}_{n-1}(x)\right]$$

Αναδρομικός Τύπος

Ορθογώνια Πολυώνυμα Laguerre – Ολοκλήρωση Gauss-Laguerre

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

$n=1$	$x_0 = 0.585786$ $x_1 = 3.41421$	$w_0 = 0.853553$ $w_1 = 0.146447$
$n=2$	$x_0 = 0.415775$ $x_1 = 2.29428$ $x_2 = 6.28995$	$w_0 = 0.711093$ $w_1 = 0.278518$ $w_2 = 0.0103893$
$n=3$	$x_0 = 0.322548$ $x_1 = 1.74576$ $x_2 = 4.53662$ $x_3 = 9.39507$	$w_0 = 0.603154$ $w_1 = 0.357419$ $w_2 = 0.0388879$ $w_3 = 0.000539295$

Ορθογώνια Πολυώνυμα Hermite – Ολοκλήρωση Gauss-Hermite

Αν η συνάρτηση βάρους w(x)=e^{-x*x}, και [a,b]=[- ∞,∞]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_m^n$$

$$H_0(x) = 1$$
$$H_1(x) = 2x$$
$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$
$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$
$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$
$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$
$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

Αναδρομικός Τύπος

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H_n'(x)$$
$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

Ορθογώνια Πολυώνυμα Hermite – Ολοκλήρωση Gauss-Hermite

ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΜΕΝΑ (PROBABILISTIC) ΠΟΛΥΩΝΥΜΑ HERMITE

$$He_n(x) = 2^{-n/2} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$

$$He_1(x) = x$$
$$He_2(x) = x^2 - 1$$
$$He_3(x) = x^3 - 3x$$
$$He_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$$
$$He_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} He_m(x) He_n(x) e^{-x^2/2} dx = \sqrt{2\pi} n! \delta_n^m$$

Ορθογώνια Πολυώνυμα Hermite – Ολοκλήρωση Gauss-Hermite

ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΜΕΝΑ (PROBABILISTIC) ΠΟΛΥΩΝΥΜΑ HERMITE

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

$n=1$	$x_0=-0.70710678$ $x_1=+0.70710678$	$w_0=0.88622692$ $w_1=0.88622692$
$n=2$	$x_0=-1.22474487$ $x_1=0.00$ $x_2=+1.22474487$	$w_0=0.29540897$ $w_1=1.1816359$ $w_2=0.29540897$
$n=3$	$x_0=-1.6506801$ $x_1=-0.52464762$ $x_2=+0.52464762$ $x_3=+1.6506801$	$w_0=0.0813128$ $w_1=0.80491409$ $w_2=0.80491409$ $w_3=0.0813128$

Ολοκλήρωση GQ - Ασκήσεις