Κεφάλαιο 6

Τετραγωνισμός

Ο όρος *αριθμητική ολοκλήρωση* καλύπτει πολλές διαφορετικές εργασίες, στις οποίες περιλαμβάνονται ο αριθμητικός υπολογισμός ολοκληρωμάτων και η αριθμητική λύση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Έτσι, χρησιμοποιούμε τον κάπως ξεπερασμένο όρο *τετραγωνισμός* για την απλούστερη από αυτές, δηλαδή τον αριθμητικό υπολογισμό ενός ορισμένου ολοκληρώματος. Οι σύγχρονοι αλγόριθμοι τετραγωνισμού μεταβάλουν αυτόματα ένα προσαρμοστικό μέγεθος βήματος.

6.1 Προσαρμοστικός τετραγωνισμός

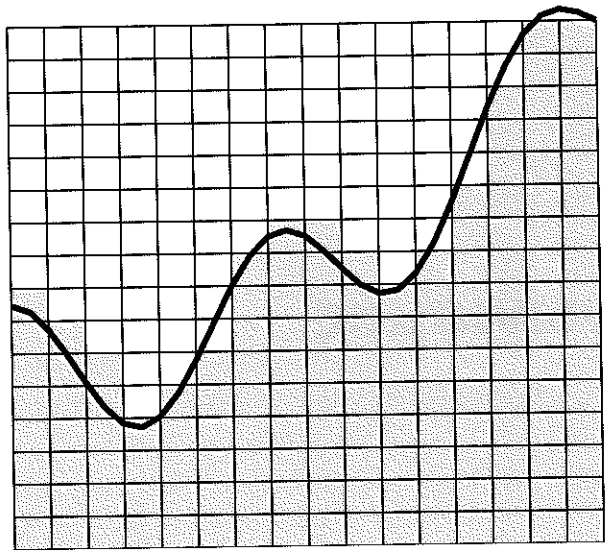
Έστω $f(x)$ η πραγματική συνάρτηση μιας πραγματικής μεταβλητής, που ορίζεται σε ένα πεπερασμένο διάστημα $a \le x \le b$. Θέλουμε να υπολογίσουμε την τιμή του ολοκληρώματος,

$$\int_a^b f(x)dx.$$

Η λέξη «τετραγωνισμός» μας θυμίζει μια στοιχειώδη τεχνική για την εύρεση του εμβαδού αυτού — σχεδιάζουμε τη συνάρτηση σε χαρτί γραφημάτων (μιλιμετρέ) και μετράμε τον αριθμό των μικρών τετραγώνων τα οποία βρίσκονται κάτω από την καμπύλη.

Στο Σχήμα 6.1, υπάρχουν 148 μικρά τετράγωνα κάτω από την καμπύλη. Αν το εμβαδόν κάθε μικρού τετραγώνου είναι $3/512$, τότε ένας χονδρικός υπολογισμός του ολοκληρώματος είναι ίσος με $148 \times 3/512 = 0.8672$.

Ο *προσαρμοστικός τετραγωνισμός* περιλαμβάνει την προσεκτική επιλογή των σημείων στα οποία παίρνουμε δείγματα της $f(x)$. Θέλουμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση σε όσο το δυνατόν λιγότερα σημεία καθώς προσεγγίζουμε το ολοκλή-



Σχήμα 6.1. *Τετραγωνισμός.*

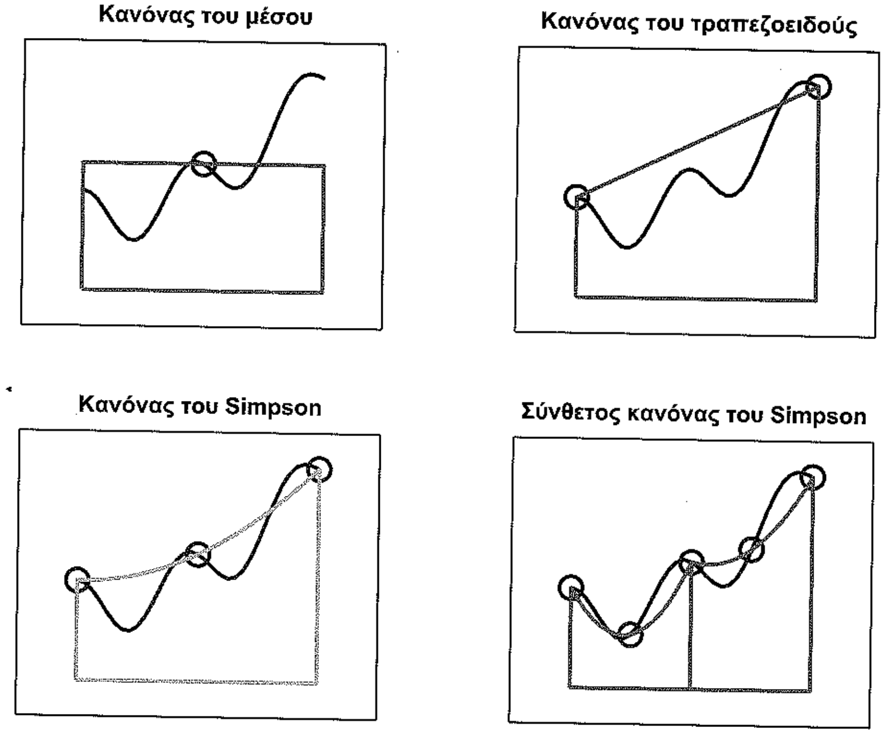
ρωμα με συγκεκριμένη ακρίβεια. Μια θεμελιώδης προσθετική ιδιότητα των ορισμένων ολοκληρωμάτων αποτελεί τη βάση του προσαρμοστικού τετραγωνισμού. Αν c είναι ένα οποιοδήποτε σημείο μεταξύ των a και b, τότε έχουμε

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx.$$

Η ιδέα είναι ότι αν μπορούμε να προσεγγίσουμε καθένα από τα δύο ολοκληρώματα στα δεξιά με μια συγκεκριμένη ανοχή, τότε το άθροισμα μας δίνει το ζητούμενο αποτέλεσμα. Διαφορετικά, μπορούμε να εφαρμόσουμε αναδρομικά την προσθετική ιδιότητα σε καθένα από τα διαστήματα $[a, c]$ και $[c, b]$. Ο αλγόριθμος που προκύπτει θα προσαρμόζεται αυτόματα στην προς ολοκλήρωση συνάρτηση, διαμερίζοντας το διάστημα σε υποδιαστήματα με καλή διαμέριση όταν η προς ολοκλήρωση συνάρτηση μεταβάλλεται ραγδαία, και με χονδρική διαμέριση όταν η προς ολοκλήρωση συνάρτηση μεταβάλλεται αργά.

6.2 Βασικοί κανόνες τετραγωνισμού

Για να βρούμε τους κανόνες τετραγωνισμού που χρησιμοποιούνται από τη συνάρτησή μας στο MATLAB θα ξεκινήσουμε με δύο από τους βασικούς κανόνες τετραγωνισμού, οι οποίοι φαίνονται στο Σχήμα 6.2: τον *κανόνα του μέσου* και τον *κανόνα του τραπεζοειδούς*. Έστω $h = b - a$ το μήκος του διαστήματος. Ο



Σχήμα 6.2. *Τέσσερις κανόνες τετραγωνισμού.*

κανόνας του μέσου M προσεγγίζει το ολοκλήρωμα με το εμβαδόν του παραλληλογράμμου εκείνου που έχει βάση με μήκος h και ύψος ίσο με την τιμή της προς ολοκλήρωση συνάρτησης στο μέσο:

$$M = hf\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Ο κανόνας του τραπεζοειδούς T προσεγγίζει το ολοκλήρωμα με το εμβαδόν του τραπεζοειδούς με βάση h και πλευρές ίσες με τις τιμές της προς ολοκλήρωση συνάρτησης στα δύο άκρα:

$$T = h\frac{f(a) + f(b)}{2}.$$

Μπορούμε να προβλέψουμε μερικώς την ακρίβεια των κανόνων τετραγωνισμού εξετάζοντας τη συμπεριφορά τους στα πολυώνυμα. Η *τάξη* (order) ενός κανόνα τετραγωνισμού είναι ο βαθμός του πολυωνύμου ελάχιστου βαθμού το οποίο ο κανόνας δεν μπορεί να ολοκληρώσει ακριβώς. Αν ένας κανόνας τετραγωνισμού τάξης p χρησιμοποιηθεί για την ολοκλήρωση μιας ομαλής συνάρτησης σε ένα μικρό διάστημα μήκους h, τότε μια ανάλυση με σειρές Taylor μας δείχνει ότι το σφάλμα είναι ανάλογο του h^p. Ο κανόνας του μέσου και ο κανόνας του τραπεζοειδούς είναι και οι δύο ακριβείς για σταθερές και γραμμικές συναρτήσεις του x, αλλά κανείς από τους δύο δεν είναι ακριβής για δευτεροβάθμιες συναρτήσεις του x, άρα και οι δύο είναι δεύτερης τάξης. (Η τάξη ενός κανόνα παραλληλογράμμου με ύψος $f(a)$ ή $f(b)$ αντί για το μέσο είναι ίση με ένα.)

Μπορούμε να συγκρίνουμε την ακρίβεια των δύο κανόνων εξετάζοντας την συμπεριφορά τους στο απλό ολοκλήρωμα

$$\int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3}.$$

Ο κανόνας του μέσου δίνει

$$M = 1\left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}.$$

Ο κανόνας του τραπεζοειδούς δίνει

$$T = 1\left(\frac{0+1^2}{2}\right) = \frac{1}{2}.$$

Άρα το σφάλμα στον M είναι ίσο με $1/12$, ενώ το σφάλμα στον T είναι ίσο με $-1/6$. Τα σφάλματα έχουν αντίθετα πρόσημα και, ίσως αναπάντεχα, ο κανόνας του μέσου έχει διπλάσια ακρίβεια από τον κανόνα του τραπεζοειδούς.

Αποδεικνύεται ότι αυτό ισχύει γενικότερα. Για την ολοκλήρωση ομαλών συναρτήσεων σε μικρά διαστήματα, ο κανόνας M έχει περίπου διπλάσια ακρίβεια από τον T και τα σφάλματα έχουν αντίθετα πρόσημα. Η γνώση αυτών των εκτιμήσεων για τα σφάλματα μας επιτρέπει να συνδυάσουμε τους δύο κανόνες και να κατασκευάσουμε έναν καινούριο, ο οποίος έχει συνήθως μεγαλύτερη ακρίβεια από οποιονδήποτε από τους δύο κανόνες χωριστά. Αν το σφάλμα στον T ήταν ακριβώς -2 φορές το σφάλμα στον M, τότε η επίλυση της

$$S - T = -2(S - M)$$

ως προς S θα έδινε την ακριβή τιμή του ολοκληρώματος. Σε κάθε περίπτωση, η λύση

$$S = \frac{2}{3}M + \frac{1}{3}T$$

είναι συνήθως μια πιο ακριβής προσέγγιση από ότι ο M ή ο T χωριστά. Ο κανόνας αυτός είναι γνωστός ως *κανόνας του Simpson*. Μπορεί επίσης να προκύψει από

την ολοκλήρωση της δευτεροβάθμιας συνάρτησης που παρεμβάλλει την προς ολοκλήρωση συνάρτηση στα δύο άκρα της a και b, και στο μέσο της $c = (a+b)/2$:

$$S = \frac{h}{6}(f(a) + 4f(c) + f(b)).$$

Όπως προκύπτει, ο κανόνας S ολοκληρώνει ακριβώς και τις κυβικές συναρτήσεις, αλλά όχι τις συναρτήσεις τέταρτου βαθμού, άρα η τάξη του είναι ίση με τέσσερα.

Μπορούμε να συνεχίσουμε την παραπάνω διαδικασία για ένα βήμα ακόμη χρησιμοποιώντας τα δύο μισά του διαστήματος, δηλαδή τα $[a, c]$ και $[c, b]$. Έστω d και e τα μέσα των δύο αυτών υποδιαστημάτων: $d = (a+c)/2$ και $e = (c+b)/2$. Εφαρμόζουμε τον κανόνα του Simpson σε κάθε υποδιάστημα για να πάρουμε έναν κανόνα τετραγωνισμού στο $[a, b]$:

$$S_2 = \frac{h}{12}(f(a) + 4f(d) + 2f(c) + 4f(e) + f(b)).$$

Αυτό είναι ένα παράδειγμα *σύνθετου* κανόνα τετραγωνισμού. Δείτε το Σχήμα 6.2.

Οι S και S_2 προσεγγίζουν το ίδιο ολοκλήρωμα, άρα η διαφορά τους μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση του σφάλματος:

$$E = (S_2 - S).$$

Επιπλέον, οι δύο κανόνες μπορούν να συνδυαστούν ώστε να πάρουμε μια ακόμη πιο ακριβή προσέγγιση, τον κανόνα Q. Και οι δύο κανόνες είναι τέταρτης τάξης, αλλά το μέγεθος βήματος του S_2 είναι το μισό του μεγέθους βήματος του S, άρα ο S_2 είναι περίπου 2^4 φορές πιο ακριβής. Επομένως, ο Q προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης

$$Q - S = 16(Q - S_2).$$

Το αποτέλεσμα είναι

$$Q = S_2 + (S_2 - S)/15.$$

Στην Άσκηση 6.2 σας ζητείται να εκφράσετε τον Q ως σταθμισμένο συνδυασμό των πέντε τιμών συνάρτησης $f(a)$ έως $f(e)$ και να δείξετε ότι είναι έκτης τάξης. Ο κανόνας αυτός είναι γνωστός ως *κανόνας του Weddle*, *κανόνας Newton-Cotes* έκτης τάξης, καθώς επίσης και ως το πρώτο βήμα της *ολοκλήρωσης του Romberg*. Εμείς θα τον αποκαλούμε απλώς *κανόνα του Simpson με προβολή* επειδή χρησιμοποιεί τον κανόνα του Simpson για δύο διαφορετικές τιμές του h, και στη συνέχεια προβάλλει προς το $h = 0$.

6.3 quadtx, quadgui

Η συνάρτηση quad του MATLAB χρησιμοποιεί τον κανόνα του Simpson με προβολή σε ένα προσαρμοστικό αναδρομικό αλγόριθμο. Η συνάρτηση quadtx του βιβλίου είναι μια απλοποιημένη παραλλαγή της quad.

Η συνάρτηση quadgui παρέχει μια γραφική επίδειξη της συμπεριφοράς των quad και quadtx. Παράγει ένα δυναμικό γράφημα των τιμών της συνάρτησης που επιλέγονται από τον προσαρμοστικό αλγόριθμο. Ο αριθμός των σημείων στα οποία υπολογίζεται η συνάρτηση φαίνεται στη θέση του τίτλου στο γράφημα.

Το αρχικό κομμάτι της quadtx υπολογίζει την προς ολοκλήρωση συνάρτηση $f(x)$ τρεις φορές για να δώσει την πρώτη, χωρίς προβολή, εκτίμηση του κανόνα του Simpson. Η αναδρομική υποσυνάρτηση quadtxstep καλείται στη συνέχεια για να ολοκληρωθεί ο υπολογισμός.

```
function [Q,fcount] = quadtx(F,a,b,tol,varargin)
% QUADTX  Αριθμητικός υπολογισμός ορισμένων ολοκληρωμάτων.
% H Q = QUADTX(F,A,B) προσεγγίζει το ολοκλήρωμα της F(x)
% από το A στο B με ανοχή 1.e-6.
%
% H Q = QUADTX(F,A,B,tol) χρησιμοποιεί την παράμετρο tol
% αντί του 1.e-6.
%
% Το πρώτο όρισμα, F, είναι ένα χειριστήριο συνάρτησης, ένα
% εμβόλιμο αντικείμενο στο MATLAB6, ή μια ανώνυμη συνάρτηση
% στο MATLAB7, το οποίο ορίζει την F(x).
%
% Τα ορίσματα μετά από τα πρώτα τέσσερα,
% Q = QUADTX(F,a,b,tol,p1,p2,...), μεταβιβάζονται στην
% προς ολοκλήρωση συνάρτηση F(x,p1,p2,..).
%
% H {[Q,fcount] = QUADTX(F,...) μετράει επίσης τον αριθμό των
% υπολογισμών της F(x).
%
% Δείτε επίσης τις QUAD, QUADL, DBLQUAD, QUADGUI.

% Αρχική ανοχή
if nargin < 4 | isempty(tol)
   tol = 1.e-6;
end
```



```
% Αρχικοποίηση
c = (a + b)/2;
fa = feval(F,a,varargin{:});
fc = feval(F,c,varargin{:});
fb = feval(F,b,varargin{:});

% Αναδρομική κλήση
[Q,k] = quadtxstep(F, a, b, tol, fa, fc, fb, varargin{:});
fcount = k + 3;
```

Κάθε αναδρομική κλήση της quadtxstep συνδυάζει τρεις τιμές της συνάρτησης που έχουν υπολογιστεί προηγουμένως με δύο ακόμη για να προκύψουν οι δύο προσεγγίσεις Simpson για ένα συγκεκριμένο διάστημα. Αν η διαφορά τους είναι αρκετά μικρή, συνδυάζονται για να επιστρέψουν την προσέγγιση με προβολή για το συγκεκριμένο διάστημα. Αν η διαφορά τους είναι μεγαλύτερη από την ανοχή, η αναδρομή συνεχίζεται σε καθένα από τα δύο μισά διαστήματα.

```
function [Q,fcount] = quadtxstep(F,a,b,tol,fa,fc,fb,varargin)

% Αναδρομική υποσυνάρτηση που χρησιμοποιείται από την quadtx.

h = b - a;
c = (a + b)/2;
fd = feval(F,(a+c)/2,varargin{:});
fe = feval(F,(c+b)/2,varargin{:});
Q1 = h/6 * (fa + 4*fc + fb);
Q2 = h/12 * (fa + 4*fd + 2*fc + 4*fe + fb);
if abs(Q2 - Q1) <= tol
   Q  = Q2 + (Q2 - Q1)/15;
   fcount = 2;
else
   [Qa,ka] = quadtxstep(F, a, c, tol, fa, fd, fc, varargin{:});
   [Qb,kb] = quadtxstep(F, c, b, tol, fc, fe, fb, varargin{:});
   Q  = Qa + Qb;
   fcount = ka + kb + 2;
end
```

Η επιλογή της ανοχής για τη σύγκριση με τις εκτιμήσεις των σφαλμάτων είναι σημαντική, αλλά λίγο περίπλοκη. Αν δεν ορίσουμε την ανοχή ως το τέταρτο όρισμα της συνάρτησης, τότε το 10^{-6} χρησιμοποιείται ως προεπιλογή.

Το περίπλοκο κομμάτι είναι ο τρόπος ορισμού της ανοχής στις αναδρομικές κλήσεις. Πόσο μικρή πρέπει να είναι η ανοχή σε κάθε αναδρομική κλήση ώστε το τελικό αποτέλεσμα να έχει τη ζητούμενη ακρίβεια; Μια μέθοδος θα ήταν να μειώνουμε την ανοχή στο μισό σε κάθε επίπεδο της αναδρομής. Η ιδέα είναι ότι αν τα `Qa` και `Qb` έχουν σφάλματα μικρότερα από `tol/2`, τότε το άθροισμά τους έχει σίγουρα σφάλμα μικρότερο από `tol`. Με αυτό τον τρόπο, οι δύο προτάσεις

```
[Qa,ka] = quadtxstep(F, a, c, tol, fa, fd, fc, varargin{:});
[Qb,kb] = quadtxstep(F, c, b, tol, fc, fe, fb, varargin{:});
```

θα έχουν το `tol/2` στη θέση του `tol`.

Όμως, η συγκεκριμένη μέθοδος είναι πολύ συντηρητική. Κάνουμε εκτίμηση του σφάλματος στους δύο ξεχωριστούς κανόνες Simpson, όχι στο συνδυασμό τους με προβολή. Άρα, το πραγματικό σφάλμα είναι σχεδόν πάντα πολύ μικρότερο από την εκτίμηση. Το πιο σημαντικό είναι ότι τα υποδιαστήματα όπου το πραγματικό σφάλμα είναι κοντά στην εκτίμηση, είναι συνήθως αρκετά σπάνια. Μπορούμε να επιτρέψουμε σε μία από τις δύο αναδρομικές κλήσεις να έχει σφάλμα κοντά στην ανοχή, επειδή το άλλο υποδιάστημα θα έχει πιθανότατα πολύ μικρότερο σφάλμα. Για τους λόγους αυτούς, η ίδια τιμή της παραμέτρου `tol` χρησιμοποιείται σε κάθε αναδρομική κλήση.

Η συνάρτηση που δείχνουμε εδώ έχει ένα σοβαρό μειονέκτημα: δεν λαμβάνει υπόψη της την αποτυχία. Υπάρχει η πιθανότητα να προσπαθήσουμε να υπολογίσουμε ολοκληρώματα τα οποία δεν υπάρχουν. Για παράδειγμα, το

$$\int_0^1 \frac{1}{3x-1}dx$$

έχει μια μη ολοκληρώσιμη ιδιομορφία. Η προσπάθειά μας να υπολογίσουμε ένα τέτοιο ολοκλήρωμα με την `quadtx` έχει ως αποτέλεσμα έναν υπολογισμό ο οποίος τρέχει για πολύ ώρα και τελικά τερματίζει με ένα μήνυμα σφάλματος για το μέγιστο όριο αναδρομής. Θα ήταν καλύτερα να έχουμε διαγνωστικές πληροφορίες για την ιδιομορφία.

6.4 Ορισμός συναρτήσεων προς ολοκλήρωση

Το MATLAB έχει διάφορους τρόπους για τον ορισμό της συνάρτησης που πρόκειται να ολοκληρωθεί από μια ρουτίνα τετραγωνισμού. Η λειτουργία `inline` είναι βολική για έναν απλό τύπο μίας γραμμής. Για παράδειγμα, το

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1+x^4}}dx$$

μπορεί να υπολογιστεί με τις προτάσεις

```
f = inline('1/sqrt(1+x^4)')
Q = quadtx(f,0,1)
```

Από την Έκδοση 7 του MATLAB και έπειτα, τα εμβόλιμα αντικείμενα έχουν αντικατασταθεί με μια πιο ισχυρή δομή γνωστή ως *ανώνυμες συναρτήσεις*. Τα εμβόλιμα αντικείμενα εξακολουθούν να επιτρέπονται στο MATLAB 7, αλλά οι ανώνυμες συναρτήσεις προτιμούνται επειδή παράγουν πιο αποδοτικό κώδικα. Το παράδειγμά μας γίνεται

```
f = @(x) 1/sqrt(1+x^4)
Q = quadtx(f,0,1)
```

Αν θέλουμε να υπολογίσουμε το

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

μπορούμε να δοκιμάσουμε τις

```
f = inline('sin(x)/x')
Q = quadtx(f,0,pi)
```

Δυστυχώς, αυτό οδηγεί σε ένα μήνυμα διαίρεσης με το μηδέν όταν υπολογίζεται η `f(0)`, και τελικά σε ένα σφάλμα του ορίου αναδρομής. Μια λύση είναι να αλλάξουμε το κάτω όριο του ολοκληρώματος από 0 στο μικρότερο θετικό αριθμό κινητής υποδιαστολής `realmin`.

```
Q = quadtx(f,realmin,pi)
```

Το σφάλμα που προκαλείται από την αλλαγή του κάτω ορίου είναι πολύ μικρότερης τάξης μεγέθους από το σφάλμα στρογγυλοποίησης, επειδή η προς ολοκλήρωση συνάρτηση είναι φραγμένη από τη μονάδα, και το μήκος του διαστήματος που παραλείπουμε είναι μικρότερο από 10^{-300}.

Μια άλλη λύση είναι να χρησιμοποιήσουμε το M-αρχείο στη θέση της εμβόλιμης συνάρτησης. Δημιουργούμε το αρχείο `sinc.m` με το κείμενο

```
function f = sinc(x)
if x == 0
   f = 1;
else
   f = sin(x)/x;
end
```

Στη συνέχεια, η πρόταση

```
Q = quadtx(@sinc,0,pi)
```

χρησιμοποιεί ένα χειριστήριο συνάρτησης και υπολογίζει το ολοκλήρωμα χωρίς δυσκολία.

Αρκετά συχνά, θα συναντήσετε ολοκληρώματα που εξαρτώνται από παραμέτρους. Ένα παράδειγμα είναι η συνάρτηση *βήτα*, που ορίζεται ως

$$\beta(z, w) = \int_0^1 t^{z-1}(1-t)^{w-1}dt.$$

Το MATLAB διαθέτει ήδη μια συνάρτηση beta, αλλά μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το παράδειγμα αυτό για να δείξουμε πώς πρέπει να χειριζόμαστε τις παραμέτρους. Δημιουργούμε μια εμβόλιμη συνάρτηση με τρία ορίσματα.

```
F = inline('t^(z-1)*(1-t)^(w-1)','t','z','w')
```

Ή μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα M-αρχείο με όνομα όπως το betaf.m.

```
function f = betaf(t,z,w)
f = t^(z-1)*(1-t)^(w-1)
```

Όπως συμβαίνει με όλες τις συναρτήσεις, η σειρά των ορισμάτων είναι σημαντική. Οι συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται με τις ρουτίνες τετραγωνισμού πρέπει να έχουν τη μεταβλητή της ολοκλήρωσης ως πρώτο όρισμα. Έπειτα, οι τιμές για τις παραμέτρους δίνονται ως επιπλέον ορίσματα της quadtx. Για να υπολογίσετε τη $\beta(8/3, 10/3)$, θα πρέπει να ορίσετε

```
z = 8/3;
w = 10/3;
tol = 1.e-6;
```

και μετά να χρησιμοποιήσετε την

```
Q = quadtx(F,0,1,tol,z,w);
```

ή την

```
Q = quadtx(@betaf,0,1,tol,z,w);
```

Οι συναρτήσεις συναρτήσεων του MATLAB θεωρούν συνήθως ότι η πρώτη μεταβλητή θα έχει *διανυσματική* μορφή. Αυτό σημαίνει, για παράδειγμα, ότι η μαθηματική παράσταση

$$\frac{\sin x}{1 + x^2}$$

θα πρέπει να οριστεί με το συμβολισμό πινάκων του MATLAB

```
sin(x)./(1 + x.^2)
```


Χωρίς τις δύο τελείες, η

```
sin(x)/(1 + x^2)
```

απαιτεί εδώ ακατάλληλες γραμμικές αλγεβρικές πράξεις μεταξύ διανυσμάτων. Η συνάρτηση vectorize του MATLAB μετατρέπει μια αριθμητική παράσταση σε κάτι το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως όρισμα σε μια συνάρτηση συναρτήσεων.

Πολλές από τις συναρτήσεις συναρτήσεων του MATLAB απαιτούν τον ορισμό ενός διαστήματος του άξονα των x. Μαθηματικά, έχουμε τους δύο πιθανούς συμβολισμούς $a \le x \le b$ ή $[a, b]$. Με το MATLAB, έχουμε επίσης δύο δυνατότητες. Τα άκρα μπορούν να δοθούν ως δύο ξεχωριστά ορίσματα, a και b, ή μπορούν να συνδυαστούν στο διανυσματικό όρισμα [a,b]. Οι συναρτήσεις τετραγωνισμού quad και quadl χρησιμοποιούν δύο χωριστά ορίσματα. Η συνάρτηση εύρεσης σημείων μηδενισμού fzero κάνει χρήση ενός μόνο ορίσματος, επειδή το διάστημα μπορεί να προσδιοριστεί είτε από ένα αρχικό σημείο είτε από ένα διάνυσμα δύο στοιχείων. Θα συναντήσουμε συναρτήσεις που επιλύουν συνήθεις διαφορικές εξισώσεις στο επόμενο κεφάλαιο. Και αυτές χρησιμοποιούν ένα μόνο όρισμα, επειδή ένα διάνυσμα πολλών στοιχείων μπορεί να ορίσει ένα σύνολο σημείων στα οποία υπολογίζεται η λύση. Η συνάρτηση εύκολης σχεδίασης ezplot δέχεται ένα ή δύο ορίσματα.

6.5 Απόδοση

Ο κατάλογος demos του MATLAB περιλαμβάνει μια συνάρτηση με το όνομα humps, η οποία επιδιώκει να δείξει τη συμπεριφορά που έχουν οι ρουτίνες γραφικών, οι ρουτίνες τετραγωνισμού, και οι ρουτίνες εύρεσης σημείων μηδενισμού. Η συνάρτηση είναι

$$h(x) = \frac{1}{(x-0.3)^2 + 0.01} + \frac{1}{(x-0.9)^2 + 0.04}.$$

Η εντολή

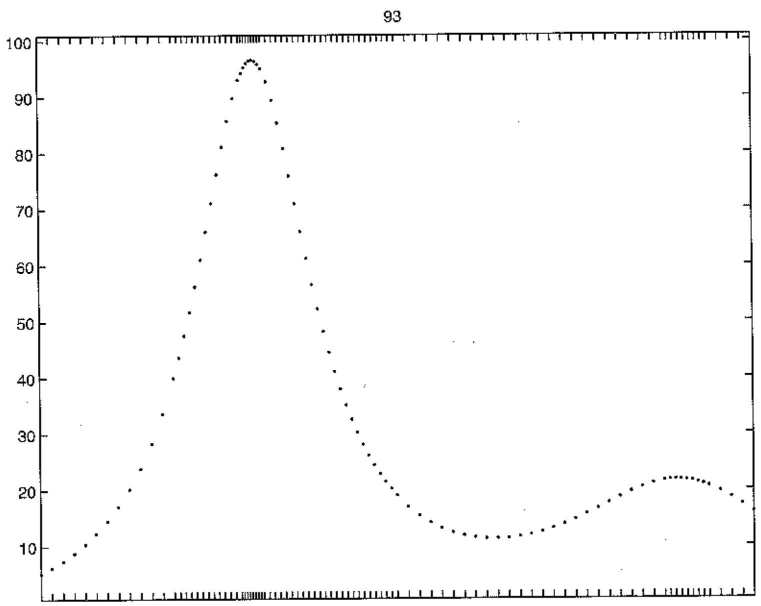
```
ezplot(@humps,0,1)
```

παράγει ένα γράφημα της $h(x)$ για $0 \le x \le 1$. Υπάρχει μια σχετικά μεγάλη κορυφή κοντά στο $x = 0.3$ και μια λίγο μικρότερη κοντά στο $x = 0.9$.

Το προεπιλεγμένο πρόβλημα της quadgui είναι

```
quadgui(@humps,0,1,1.e-4)
```

Μπορείτε να δείτε στο Σχήμα 6.3 ότι με την ανοχή αυτή, ο προσαρμοστικός αλγόριθμος έχει υπολογίσει την προς ολοκλήρωση συνάρτηση 93 φορές σε σημεία που είναι συγκεντρωμένα κοντά στις δύο κορυφές.



Σχήμα 6.3. *Προσαρμοστικός τετραγωνισμός.*

Με το Symbolic Toolbox, είναι δυνατόν να ολοκληρώσουμε αναλυτικά την $h(x)$. Οι προτάσεις

```
syms x
h = 1/((x-.3)^2+.01) + 1/((x-.9)^2+.04) - 6
I = int(h)
```

παράγουν το αόριστο ολοκλήρωμα

```
I = 10*atan(10*x-3)+5*atan(5*x-9/2)-6*x
```

Οι προτάσεις

```
D = simple(int(h,0,1))
Qexact = double(D)
```

παράγουν ένα ορισμένο ολοκλήρωμα

```
D = 5*atan(16/13)+10*pi-6
```

και την αριθμητική τιμή κινητής υποδιαστολής του ολοκληρώματος

```
Qexact = 29.85832539549867
```

Μπορούμε να προσδιορίσουμε την προσπάθεια που απαιτείται από μια ρουτίνα τετραγωνισμού για την προσέγγιση ενός ολοκληρώματος με συγκεκριμένη ακρίβεια, μετρώντας τον αριθμό των φορών που υπολογίζεται η προς ολοκλήρωση συνάρτηση. Ακολουθεί ένα παράδειγμα που περιλαμβάνει τις humps και quadtx.


```
for k = 1:12
   tol = 10^(-k);
   [Q,fcount] = quadtx(@humps,0,1,tol);
   err = Q - Qexact;
   ratio = err/tol;
   fprintf('%8.0e %21.14f %7d %13.3e %9.3f\n', ...
     tol,Q,fcount,err,ratio)
end
```

Τα αποτελέσματα είναι

tol	Q	fcount	err	err/tol
1.e-01	29.83328444174863	25	-2.504e-02	-0.250
1.e-02	29.85791444629948	41	-4.109e-04	-0.041
1.e-03	29.85834299237636	69	1.760e-05	0.018
1.e-04	29.85832444437543	93	-9.511e-07	-0.010
1.e-05	29.85832551548643	149	1.200e-07	0.012
1.e-06	29.85832540194041	265	6.442e-09	0.006
1.e-07	29.85832539499819	369	-5.005e-10	-0.005
1.e-08	29.85832539552631	605	2.763e-11	0.003
1.e-09	29.85832539549603	1061	-2.640e-12	-0.003
1.e-10	29.85832539549890	1469	2.274e-13	0.002
1.e-11	29.85832539549866	2429	-7.105e-15	-0.001
1.e-12	29.85832539549867	4245	0.000e+00	0.000

Βλέπουμε ότι καθώς μειώνεται η ανοχή, το αριθμός των σημείων υπολογισμού της συνάρτησης αυξάνεται και το σφάλμα μειώνεται. Το σφάλμα είναι πάντα μικρότερο από την ανοχή, συνήθως κατά ένα μεγάλο παράγοντα.

6.6 Ολοκλήρωση διακριτών δεδομένων

Μέχρι τώρα, έχουμε ασχοληθεί στο κεφάλαιο αυτό με τον υπολογισμό μιας προσέγγισης για το ορισμένο ολοκλήρωμα μιας συγκεκριμένης συνάρτησης. Έχουμε υποθέσει επίσης ότι υπάρχει κάποιο πρόγραμμα σε MATLAB, το οποίο μπορεί να υπολογίσει την προς ολοκλήρωση συνάρτηση σε οποιοδήποτε σημείο ενός δεδομένου διαστήματος. Ωστόσο, σε πολλές περιπτώσεις, η συνάρτηση είναι γνωστή μόνο σε ένα πεπερασμένο σύνολο σημείων, έστω (x_k, y_k), $k = 1, \dots, n$. Υποθέτουμε ότι τα x είναι ταξινομημένα κατά αύξουσα σειρά, με

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b.$$

Πώς μπορούμε να προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα

$$\int_a^b f(x)dx;$$

Αφού δεν είναι δυνατόν να υπολογίσουμε το $y = f(x)$ σε άλλα σημεία, οι προσαρμοστικές μέθοδοι που περιγράψαμε δεν μπορούν να εφαρμοστούν.

Η πιο προφανής μέθοδος είναι να ολοκληρώσουμε την τμηματικά γραμμική συνάρτηση με την οποία παρεμβάλλονται τα δεδομένα. Αυτό οδηγεί στο *σύνθετο κανόνα του τραπεζοειδούς*

$$T = \sum_{k=1}^{n-1} h_k \frac{y_{k+1} + y_k}{2},$$

όπου $h_k = x_{k+1} - x_k$. Ο κανόνας του τραπεζοειδούς μπορεί να υλοποιηθεί με *συνάρτηση μίας γραμμής*.

```
T = sum(diff(x).*(y(1:end-1)+y(2:end))/2)
```

Επίσης, η συνάρτηση `trapz` του MATLAB παρέχει μια υλοποίηση του συγκεκριμένου κανόνα.

Ένα παράδειγμα με ισαπέχουσες τιμές του x φαίνεται στο Σχήμα 6.4.

```
x = 1:6
y = [6  8  11  7  5  2]
```

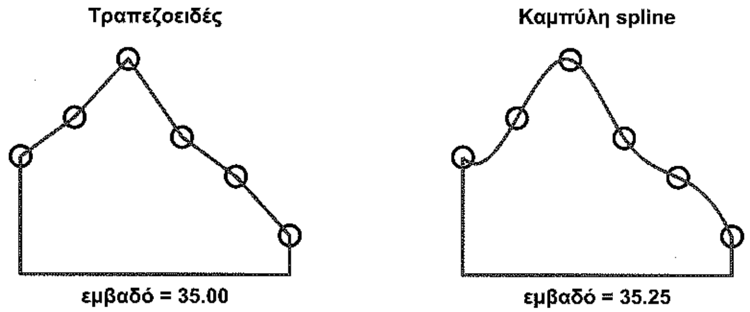
Για τα δεδομένα αυτά, ο κανόνας του τραπεζοειδούς δίνει

```
T = 35
```

Ο κανόνας του τραπεζοειδούς είναι συχνά ικανοποιητικός στην πράξη, και είναι πιθανό να μην απαιτούνται πιο σύνθετες μέθοδοι. Παρόλα αυτά, οι μέθοδοι που βασίζονται σε παρεμβολή υψηλότερης τάξης μπορούν να δώσουν άλλες εκτιμήσεις για το ολοκλήρωμα. Δεν είναι δυνατόν να αποφασίσουμε αν αυτές είναι «πιο ακριβείς» ή όχι χωρίς να κάνουμε επιπλέον υποθέσεις για την προέλευση των δεδομένων.

Θυμηθείτε ότι οι παρεμβάλλουσες `spline` και `pchip` είναι βασισμένες στον τύπο της παρεμβολής Hermite:

$$P(x) = \frac{3hs^2 - 2s^3}{h^3} y_{k+1} + \frac{h^3 - 3hs^2 + 2s^3}{h^3} y_k + \frac{s^2(s-h)}{h^2} d_{k+1} + \frac{s(s-h)^2}{h^2} d_k,$$



Σχήμα 6.4. *Ολοκλήρωση διακριτών δεδομένων.*

όπου $x_k \le x \le x_{k+1}$, $s = x - x_k$, και $h = h_k$. Αυτό είναι ένα κυβικό πολυώνυμο ως προς s, και άρα ως προς x, το οποίο ικανοποιεί τέσσερις συνθήκες παρεμβολής, δύο που αφορούν τις τιμές της συνάρτησης και δύο που αφορούν τις τιμές των παραγώγων:

$$P(x_k) = y_k, \; P(x_{k+1}) = y_{k+1},$$
$$P'(x_k) = d_k, \; P'(x_{k+1}) = d_{k+1}.$$

Οι κλίσεις d_k υπολογίζονται από τη `splinetx` ή την `pchiptx`.

Στην Άσκηση 6.20 σας ζητείται να δείξετε ότι

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} P(x)dx = h_k \frac{y_{k+1} + y_k}{2} - h_k^2 \frac{d_{k+1} - d_k}{12}.$$

Συνεπώς, έχουμε

$$\int_a^b P(x)dx = T - D,$$

όπου T είναι ο κανόνας του τραπεζοειδούς και

$$D = \sum_{k=1}^{n-1} h_k^2 \frac{d_{k+1} - d_k}{12}.$$

Η ποσότητα D είναι μια διόρθωση υψηλότερης τάξης στον κανόνα του τραπεζοειδούς, η οποία κάνει χρήση των κλίσεων που υπολογίζονται από τη `splinetx` ή την `pchiptx`.

Αν τα x ισαπέχουν μεταξύ τους, οι περισσότεροι από τους όρους του αθροίσματος αλληλοαναιρούνται. Έτσι, το D γίνεται μια απλή *πλευρική διόρθωση* που περιλαμβάνει μόνο την πρώτη και την τελευταία κλίση:

$$D = h^2 \frac{d_n - d_1}{12}.$$

Για το δείγμα των δεδομένων που φαίνεται στο Σχήμα 6.4, το εμβαδόν που προκύπτει από τη γραμμική παρεμβολή και την παρεμβολή spline είναι ίσο με 35.00 και 35.25, αντίστοιχα. Δεν έχουμε δείξει την παρεμβολή Hermite που διατηρεί το σχήμα, αλλά το εμβαδόν της είναι ίσο με 35.41667. Η διαδικασία της ολοκλήρωσης υπολογίζει το μέσο όρο των αποκλίσεων στις παρεμβάλλουσες, άρα παρόλο που τα τρία γραφήματα ενδέχεται να έχουν αρκετά διαφορετικά σχήματα, οι προσεγγίσεις του ολοκληρώματος που προκύπτουν βρίσκονται συχνά αρκετά κοντά μεταξύ τους.