

Matematisk modellering og numeriske metoder

Lektion 17

Morten Grud Rasmussen

11. november 2014

1 Numerisk integration og differentiation

[Bogens afsnit 19.5 side 824]

1.1 Grundlæggende om numerisk integration

Vi vil i det følgende gennemgå fem tilgange til numerisk approksimation af bestemte integraler, også kaldet numerisk integration. Numerisk integration er typisk af interesse i to tilfælde, nemlig når vi ikke kan finde en stamfunktion til integranten, eller når vi ikke kender et analytisk funktionsudtryk, men kun kender funktionsværdien i et begrænset antal punkter.

1.2 Midtpunktsreglen

Den første metode, vi vil se på, er naturligvis også den mest primitive. Antag, at vi er interesseret i en numerisk løsning af

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

Metoden går helt simpelt ud på at dele intervallet $I = [a, b]$, der integreres over, op i n delintervaller $I_i = [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \dots, n$ af længde $h = \frac{b-a}{n}$ og så approksimere integralet over de enkelte delintervaller I_i ved at gange intervalllængden $|I_i| = h$ med funktionsværdien $f(x_{i-1} + \frac{h}{2})$ af integranten midt i intervallet I_n . Her er $x_0 = a$, $x_n = b$ og $x_i = x_{i-1} + h$ for $i = 1, \dots, n$. Det samlede integral er så approksimeret af summen af approksimationerne over disse delintervaller, og vi får altså

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1} + \frac{h}{2}), \quad \text{hvor} \quad h = \frac{b-a}{n}. \quad (1)$$

Midtpunktsreglen kan tolkes på følgende måde. Funktionen $p_0 \equiv f(x_{i-1} + \frac{h}{2})$ kan opfattes som en nulgradspolynomiumsapproksimation af f . Så er $\int_{x_{i-1}}^{x_i} p_0 dx = hf(x_{i-1} + \frac{h}{2})$, og (1) er altså summen af integralerne over stykkevise nulgradspolynomiumsapproksimationer af f .

1.3 Trapezreglen

I samme ånd som ovenfor kan vi finde en førstegradspolynomiumsapproksimation p_1 af f på I_i , hvis vi i stedet for midtpunktet $f(x_{i-1} + \frac{h}{2})$ kender værdierne $f(x_{i-1})$ og $f(x_i)$ af f i endepunkterne af I_n :

$$p_1(x) = f(x_{i-1}) + \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}(x - x_{i-1})$$

(her fundet vha. Newtons divideret differens-metode med $x_0 = x_{i-1}$ og $x_1 = x_i$), som integrerer til

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} p_1(x) dx = \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)), \quad \text{hvor} \quad h = x_i - x_{i-1}.$$

Trapezreglen er altså følgende approksimation:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \sum_{i=1}^n (f(x_{i-1}) + f(x_i)) = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i), \quad (2)$$

hvor sidste omskrivning følger af en simpel omorganisering. Det kan vises, at fejlen i denne approksimation er

$$\varepsilon_n^t = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(x_I), \quad (3)$$

for et passende valg af $x_I \in I = [a, b]$, hvor vi understreger, at n 'et intet har med polynomiumsgraden at gøre, men henviser til antallet af delintervaller I_i . Som for polynomiumsinterpolationerne kan vi altså finde øvre og nedre grænser for vores fejl ved at finde maksimum og minimum af f'' på I . Er det af den ene eller anden grund ikke muligt at finde sådanne grænser, kan man, hvis n er et lige tal, benytte følgende formel til at estimere fejlen:

$$\varepsilon_n^t \approx \frac{1}{3}(J_n^t - J_{\frac{n}{2}}^t), \quad \text{hvor} \quad J_n^t = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i). \quad (4)$$

1.4 Simpsons regel

Næste naturlige skridt er at approksimere f på I_i med et andengradspolynomium p_2 gennem $f(x_{i-1})$, $f(x_{i-1} + \frac{h}{2})$ og $f(x_i)$. Den ihærdige læser kan selv finde p_2 (med en valgfri metode fra lektion 16) og integrere andengradspolynomiet. Den dovne kan ånde lettet op, læne sig tilbage, og få det hele serveret:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} p_2(x) dx = \frac{h}{6}(f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-1} + \frac{h}{2}) + f(x_i)), \quad \text{hvor} \quad h = x_i - x_{i-1}.$$

Anvendes dette på alle delintervaller, kaldes resultatet Simpsons regel og ser ud som følger:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \frac{h}{6} \sum_{i=1}^n (f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-1} + \frac{h}{2}) + f(x_i)) \\ &= \frac{h}{6}(f(x_0) + f(x_n)) + \frac{2h}{3} \sum_{i=1}^n f(x_i - \frac{h}{2}) + \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i). \end{aligned}$$

Det bemærkes, at bogen ikke er konsekvent med, om den tæller "målepunkter" (altså steder, hvor f skal kendes) eller delintervaller, og at deres formel af den grund ser lidt anderledes ud.

1.5 Præcisionsgrad

Inden vi diskuterer fejlvurderinger i forbindelse med Simpsons regel, vil vi indføre begrebet *præcisionsgrad* af en metode til numerisk integration. For at en metode kan kalde sig en numerisk integrationsmetode, skal den kunne bestemme integralet af en konstant funktion – også kendt som et nultegradspolynomium – uden fejl. Vi kan derfor for en given numerisk integrationsmetode lade N betegne det største hele tal, sådan at metoden anvendt på et vilkårligt N 'tegradspolynomium over et vilkårligt interval giver det rigtige resultat. Dette tal kaldes *præcisionsgraden*.

Det er nemt at se, at midtpunktsreglen har præcisionsgrad 0 (man kan kun være sikker på at få det rigtige resultat, hvis integranten er et nultegradspolynomium) og at trapezreglen har præcisionsgrad 1 (trapezreglen giver det rigtige integral for alle førstegradspolynomier, men ikke for alle andengradspolynomier). Det er oplagt at gætte på, at Simpsons regel har præcisionsgrad 2, og det er da også sandt, at andengradspolynomier integreres korrekt med Simpsons regel. Lad nu f være et tredjegradspolynomium. Vi kan skrive f som

$$f = p_2 + g_3,$$

hvor p_2 er andengradsinterpolationspolynomiet gennem $f(x_{i-1})$, $f(x_{i-1} + \frac{h}{2})$ og $f(x_i)$ mens g_3 er tredjegradspolynomiet gennem et vilkårligt fjerde punkt $x' \in (x_{i-1}, x_i)$, $x' \neq x_{i-1} + \frac{h}{2}$, fra Newtons divideret differens-metode,

$$g_3(x) = f[x_{i-1}, x_{i-1} + \frac{h}{2}, x_i, x'](x - x_{i-1})(x - (x_{i-1} + \frac{h}{2}))(x - x_i).$$

Det er nu nemt at vise, at $\int_{x_{i-1}}^{x_i} g_3(x) dx = 0$ uanset hvad $f[x_{i-1}, x_{i-1} + \frac{h}{2}, x_i, x']$ er – prøv evt. selv at betragte det konkrete tilfælde $x_{i-1} = -1$, $x_i = 1$ og $h = 2$. Dette betyder, at også tredjegradspolynomier altid integreres korrekt med Simpsons regel, og præcisionsgraden er derfor 3. At Simpsons regel vha. tre "målepunkter" pr. delinterval og "andengradspolynomiumsinterpolation" kan give korrekt integration af tredjegradspolynomier, hænger i høj grad på, hvor de tre "målepunkter" er placeret i delintervallet i forhold til hinanden. Vi vil om lidt se på en metode kaldet Gauss-kvadratur, som netop går ud på at optimere disse forhold. Inden da skal vi dog lige vende tilbage til et hængeparti.

1.6 Fejlvurderinger i Simpsons regel

Ligesom præcisionsgraden i Simpsons regel ikke er 2 men 3, er fejlen ved brug af Simpsons regel ikke proportional med $f'''(x_I)$ for et passende valg af $x_I \in [a, b]$, men derimod

$$\varepsilon_n^S = -\frac{(b-a)}{2880} h^4 f^{(4)}(x_I), \quad (5)$$

hvor n 'et indikerer antallet af delintervaller, som på højresiden er indkodet i værdien af h (husk igen bogens lidt anderledes notation). Vi kan igen finde øvre og nedre grænser for fejlen ved at finde maksimum og minimum af $f^{(4)}$ på $I = [a, b]$.

Skulle $f^{(4)}$ af en eller anden grund være en problematisk størrelse, kan man, hvis n er et lige tal, benytte sig af følgende estimat:

$$\varepsilon_n^S \approx \frac{1}{15} (J_n^S - J_{\frac{n}{2}}^S),$$

hvor

$$J_n^S = \frac{h}{6}(f(x_0) + f(x_n)) + \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{2h}{3} \sum_{i=1}^n f(x_i - \frac{h}{2})$$

er approksimationen af integralet fra Simpsons regel med n delintervaller.

Simpsons regel er endvidere *numerisk stabil* med hensyn til afrunding i den forstand, at afrundingsfejl i værdierne $f(x_0)$, $f(x_i)$ og $f(x_i - \frac{h}{2})$, $i = 1, \dots, n$ er begrænset af $(b - a)u$, hvor u er afrundingsenheden, og fuldstændig uafhængig af n .

1.7 Gauss-kvadratur

Gauss-kvadratur er som nævnt en metode, som går ud på at udnytte at præcisionsgraden afhænger af placeringen af "målepunkterne." Mere specifikt foretages approksimationen ved

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{b-a}{2} z_i + \frac{a+b}{2}\right),$$

for nogle særlige vægte w_i og punkter z_i . For n mellem 2 og 5 kan vægtene og punkterne aflæses i følgende tabel.

Antal målepunkter n	punkter z_i	vægte w_i	præcisionsgrad N
2	$\pm \frac{\sqrt{3}}{3}$	1	3
3	0 $\pm \sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{8}{9}$ $\frac{5}{9}$	5
4	$\pm \sqrt{\frac{3-2\sqrt{\frac{6}{5}}}{7}}$ $\pm \sqrt{\frac{3+2\sqrt{\frac{6}{5}}}{7}}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$	7
5	0 $\pm \frac{1}{3} \sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$ $\pm \frac{1}{3} \sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{128}{225}$ $\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$ $\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$	9

Det ses, at præcisionsgraden i ovenstående tabel er $2n - 1$. Dette gælder også for $n > 5$ og det kan vises, at det er den højst opnåelige præcisionsgrad. Det er klart, at vi kun kan vente, at Gauss-kvadratur giver gode resultater, såfremt den pågældende integrant "ligner" et polynomium.

1.8 Adaptiv numerisk integration

En metode, som tager mere hensyn til den konkrete funktion, er adaptiv numerisk integration, som er en slags overbygning på metoder, der som trapezreglen og Simpsons regel baserer sig på

inddeling i delintervaller og som tillader estimation af fejlen. Kernen i metoden er altså eksempelvis Simpsons regel. Antag, at vi vil integrere en funktion f på intervallet $I = [a, b]$ og at vi accepterer én eller anden grad af fejl, f.eks. at *tolerancen* $T > 0$ skal være større end den absolutte fejl $|\varepsilon|$. Vi lader $J_n([c, d])$ og $\varepsilon_n([c, d])$ betegne hhv. approksimationen af integralet og fejlen på approksimationen over $[c, d]$ når $[c, d]$ er inddelt i n delintervaller. Hvis vi eksempelvis anvender Simpsons regel på f over intervallet $[c, d]$ med $n = 1$ og $n = 2$, så kan vi estimere $\varepsilon_2([c, d]) = \varepsilon_2^S([c, d])$. Hvis den samlede absolutte fejl skal være mindre end T , så er det tilstrækkeligt, at fejlen på hvert delinterval opfylder

$$|\varepsilon_2([c, d])| \frac{b-a}{d-c} < T \quad \text{eller} \quad |\varepsilon_2([c, d])| < \frac{d-c}{b-a} T.$$

Hvis et estimat af $|\varepsilon_2([c, d])|$ er større end $\frac{d-c}{b-a} T$, kan vi forbedre vores approksimation af integralet på dette delinterval ved at udregne $J_4([c, d]) = J_2([c, \frac{c+d}{2}]) + J_2([\frac{c+d}{2}, d])$. Det skulle være klart, at denne process kan fortsættes.

Når vi skal udregne et integral, begynder vi altså med $c = a$ og $d = b$, udregner $J_1([c, d])$ og $J_2([c, d])$, estimerer $\varepsilon_2([c, d])$, og erstatter efter behov (dvs. hvis $\varepsilon_2([c, d]) \geq \frac{d-c}{b-a} T$) hhv. c og d med $\frac{c+d}{2}$ og gentager processen med disse valg af c og d . Forhåbentlig opnås efter et endeligt antal skridt med passende halveringer af delintervallerne en tilpas fin inddeling, til at $|\varepsilon_2([c, d])| < \frac{d-c}{b-a} T$ for alle relevante par af c og d , og approksimationen af integralet med en tolerance mindre end T er så summen af $J_2([c, d])$ 'erne for disse par.

1.9 Eksempler

Midtpunktsreglen skulle gerne være ligetil, og da den samtidig generelt er noget mindre præcis end trapezreglen, som kun kræver 1 ekstra målepunkt for samme inddeling, vil vi ikke se nærmere på midtpunktsreglen. I stedet vil vi gennemgå et eksempel på anvendelsen af trapezreglen, Simpsons regel og Gauss-kvadratur.

Eksempel 1.1 (Example 1, 2, 3, 4 og 7 i bogen side 825, 827, 830, 831 og 834). Vi vil numerisk beregne integralet $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ og vurdere fejlen. Vi begynder med trapezreglen. Skriv $f(x) = e^{-x^2}$ og antag, at vi kender $f(x_i) = e^{-x_i^2}$ for $x_i = \frac{i}{10}, i = 0, \dots, 10$. Vi kan da anvende trapezreglen med $n = 10$ hvilket svarer til $h = 0.1$ og inddelingen $[0, 1] = \cup_{i=1}^{10} [x_{i-1}, x_i]$. Vi får da vha. (2)

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx J_{10}^t = \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_n)) + h \sum_{i=1}^9 f(x_i) = \frac{0.1}{2} 1.367879 + 0.1 \cdot 6.778167 = 0.746211,$$

hvor J_{10}^t indikerer, at det er trapezreglen med $n = 10$. Hvis vi i samme ånd skriver ε_{10}^t for fejlen, så kan vi finde øvre og nedre grænser for fejlen vha. (3):

$$\varepsilon_{10}^t = -\frac{1-0}{12} 0.1^2 f''(x_I) \quad \text{hvor} \quad x_I \in [0, 1],$$

så

$$\frac{-1}{1200} \max_{x \in [0,1]} f''(x) \leq \varepsilon_{10}^t \leq \frac{-1}{1200} \min_{x \in [0,1]} f''(x).$$

Da $f''(x) = 2(2x^2 - 1)e^{-x^2}$ og $f'''(x) \geq 0$ for $x \in [0, 1]$ er

$$\max_{x \in [0,1]} f''(x) = f''(1) = 0.735759 \quad \text{og} \quad \min_{x \in [0,1]} f''(x) = f''(0) = -2,$$

så

$$-0.000614 \leq \varepsilon_{10}^t \leq 0.001667.$$

Vi kan også estimere ε_{10}^t vha. (4):

$$J_5^t = \frac{0.2}{2} 1.367879 + 0.2 \cdot 3.037902 = 0.744368$$

så

$$\varepsilon_{10}^t \approx \frac{1}{3}(J_{10}^t - J_5^t) = 0.0006141521.$$

Denne fejl kan vises at være korrekt med to betydende cifre: $\varepsilon_{10}^t = 0.000613 \dots$

Dette var trapezreglen. Men hvad med Simpsons regel? Med de samme kendte målepunkter x_i kan vi kun klare $n = 5$, idet Simpsons regel også bruger et målepunkt midtvejs i delintervallerne. Vi får derfor $h = 0.2$ og:

$$\frac{0.2}{6} 1.367879 + \frac{2 \cdot 0.2}{3} 3.740266 + \frac{0.2}{3} 3.037901 = 0.746825.$$

Ud fra ovenstående er det klart, at fejlen her er mindre, selvom vi tog udgangspunkt i præcis de samme tal. Benytter vi (5) til at vurdere fejlen ε_5^S fås

$$-0.000007 = -\frac{1-0}{2880} 0.2^4 \max_{x \in [0,1]} f^{(4)}(x) \leq \varepsilon_5^S \leq -\frac{1-0}{2880} 0.2^4 \min_{x \in [0,1]} f^{(4)}(x) = 0.000005.$$

Da $n = 5$ er ulige, kan vi ikke benytte $\varepsilon_n^S \approx \frac{1}{15}(J_n - J_{\frac{n}{2}})$ til at estimere fejlen. Til gengæld kunne vi bruge (5) til at finde n , så vi eksempelvis har 6 rigtige cifre efter kommaet ved at indsætte $h = \frac{b-a}{n}$:

$$|\varepsilon_n^S| \leq \frac{b-a}{2880} \left(\frac{b-a}{n}\right)^4 \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)| = \frac{12}{2880n^4} \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-6},$$

og dermed $n = 10$, idet vi bliver nødt til at runde op. Hvis $f^{(4)}$ varierer meget på intervallet $[a, b]$ kan denne vurdering dog være alt for streng, forstået på den måde, at man kunne klare sig med et mindre n .

Til sidst vil vi approksimere integralet vha. Gauss-kvadratur. Dette er dog ikke problemfrit, da vi nu ikke længere kan bruge vores allerede kendte x_i 'er som målepunkter. Vi dispenserer for antagelsen om, at vi kun kender disse, og antager i stedet, at vi selv må bestemme, hvor vi evaluerer funktionen. Hvis vi vælger $n = 3$, så skal vi altså kende $f(\frac{1}{2})$, $f(\frac{1}{2}(1 - \sqrt{3/5}))$ og $f(\frac{1}{2}(1 + \sqrt{3/5}))$:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{2} \left(\frac{5}{9} f\left(\frac{1}{2}(1 - \sqrt{\frac{3}{5}})\right) + \frac{8}{9} f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{9} f\left(\frac{1}{2}(1 + \sqrt{\frac{3}{5}})\right) \right) = 0.746815.$$

De få målepunkter taget i betragtning, er der her tale om en ret imponerende præcision: fejlen er 0.000010. Havde vi i Simpsons regel forsøgt os med $n = 3$, havde vi fået $J_3^S = 0.747180$, og trapezreglen ville have været endnu værre.

Eksempel 1.2 (Example 6 i bogen side 833). Vi vil nu numerisk integrere $f(x) = \frac{1}{4}\pi x^4 \cos(\frac{1}{4}\pi x)$ fra 0 til 2 vha. adaptiv integration og Simpsons regel og en tolerance på $T = 0.0005$. Først udregnes $J_1([0, 2]) = 0.740480$ og $J_2([0, 2]) = J_1([0, 1]) + J_1([1, 2]) = 0.122794 + 1.10695 = 1.22974$. Vi kan så estimere fejlen

$$\varepsilon_2([0, 2]) \approx \frac{1}{15}(1.22974 - 0.740480) = 0.0326173 \geq \frac{2-0}{2-0}0.00005.$$

Altså skal vi splitte $[0, 2]$ i $[0, \frac{2-1}{2}] = [0, 1]$ og $[\frac{2-0}{2}, 2] = [1, 2]$. Vi har så $J_1([0, 1]) = 0.122794$ og $J_1([1, 2]) = 1.10695$ og finder $J_2([0, 1]) = J_1([0, \frac{1}{2}]) + J_1([\frac{1}{2}, 1]) = 0.123716$ og

$$J_2([1, 2]) = J_1([1, \frac{3}{2}]) + J_1([\frac{3}{2}, 2]) = 0.528176 + 0.605821 = 1.13300.$$

Vi kan nu estimere $\varepsilon_2([0, 1]) \approx \frac{1}{15}(J_2([0, 1]) - J_1([0, 1])) = 0.000061 < \frac{1-0}{2-0}0.0005$, så $[0, 1]$ mener vi altså at have approksimeret tilstrækkeligt godt, mens

$$\varepsilon_2([1, 2]) \approx \frac{1}{15}(J_2([1, 2]) - J_1([1, 2])) = 0.001803 \geq \frac{2-1}{2-0}0.0005.$$

Vi splitter derfor $[1, 2]$ i $[1, \frac{3}{2}]$ og $[\frac{3}{2}, 2]$. Så beregnes $J_2([1, \frac{3}{2}]) = 0.528895$ og $J_2([\frac{3}{2}, 2]) = 0.606692$ samt $\varepsilon_2([1, \frac{3}{2}]) = 0.000048 < \frac{\frac{3}{2}-1}{2-0}0.0005$ og $\varepsilon_2([\frac{3}{2}, 2]) = 0.000058 < \frac{2-\frac{3}{2}}{2-0}0.0005$ og vi er altså tilfredse med alle delintervaller. Vi lægger sammen og får

$$\int_0^2 \frac{1}{4}\pi x^4 \cos(\frac{1}{4}\pi x) dx \approx J_2([0, 1]) + J_2([1, \frac{3}{2}]) + J_2([\frac{3}{2}, 2]) = 0.123716 + 0.528895 + 0.606692 = 1.2593.$$

1.10 Numerisk differentiation

Vi har allerede i forbindelse med finite difference-metoden set på forskellige numeriske approksimationer af differentialkvotienter vha. differenskvotienter. Problemet med differentialkvotienter er, at de er defineret som en grænseværdi af en differenskvotient, hvor både tæller og nævner går mod 0. De er derfor ret følsomme overfor upræcisheder, idet deres værdi er forholdet mellem hastigheden, hvormed tæller og nævner går mod nul.

Alternativt til differenskvotienterne kan differentialkvotienten approksimeres ved at approksimere den pågældende funktion f med et polynomium p_n vha. metoderne fra sidste lektion og bruge følgende:

$$f'(x) \approx p'_n(x).$$

Hvis $n = 2$ og under antagelsen $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = h$ giver dette:

$$\begin{aligned} f'_0 &\approx \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2), \\ f'_1 &\approx \frac{1}{2h}(-f_0 + f_2) \\ f'_2 &\approx \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) \end{aligned}$$

hvor $f'_i = f'(x_i)$ og $f_i = f(x_i)$. Med flere målepunkter stiger graden af polynomiet, og eksempelvis fås

$$f'_2 = \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4),$$

igen under antagelsen $x_i - x_{i-1} = h$, $f_i = f(x_i)$ og $f'_i = f'(x_i)$.