

Integration

- Trapetsmetoden. Feluppskattning.
- Simpsonsformel, Gausskvadratur.

Extrapolation

- Uppskattning av trunckeringsfel.
- Adaptiva metoder.

Exempel Vi vill beräkna en integral

$$I = \int_{x=0}^1 f(x) dx,$$

där en tabell med funktionsvärden är tillgänglig

| | | | | | |
|--------|------|------|------|------|------|
| x | 0.00 | 0.20 | 0.40 | 0.60 | 1.00 |
| $f(x)$ | 1.31 | 1.93 | 1.82 | 1.56 | 0.87 |

Hur skall vi göra?

Exempel Vissa funktioner som $f(x) = e^{-x^2}$ har ingen primitiv funktion. Vi vill trots det beräkna

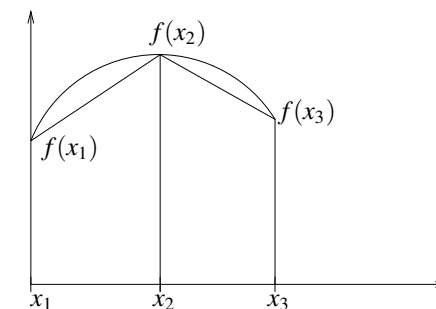
$$I = \int_{-1}^1 e^{-x^2} dx.$$

Finns det en primitiv funktion kan den ofta vara olämplig att använda. Vi vet att

$$I = \int_{999}^{1000} \frac{1}{1+x^2} dx = \arctan(1000) - \arctan(999),$$

men får dålig noggrannhet på grund av *cancellation*.

Numerisk metod Approximera $f(x)$ med en styckvis linjär funktion



Vi får

$$I \approx T = h \left(\frac{f(x_1)}{2} + f(x_2) + \frac{f(x_3)}{2} \right), \quad h = x_2 - x_1.$$

Detta kallas *trapetsmetoden*. Vilka felkällor finns?

Resultatet blir

$$I \approx T = 0.2 \left(\frac{1.31}{2} + 1.93 + 1.82 + 1.56 + \frac{0.87}{2} \right) = 1.28 \approx 1.3.$$

Följande felkällor kan indentifieras

- Funktionen $f(x)$ approximeras med räta linjer. Detta ger ett *trunkeringsfel*,

$$|R_T(h)| = |I - T(h)|.$$

Felet beror på både $f(x)$ och steglängden h .

- Fel i använda funktionsvärden $\{f(x_k)\}$ ger ett fel R_{XF} .
- Slutavrundning av svaret ger R_B .

Hur skall alla dessa fel uppskattas?

Exempel Antag att vi kan beräkna en funktion med ett absolut fel $|\Delta f| \leq \varepsilon$. Hur stort fel orsakar detta då integralen beräknas med trapetsmetoden?

Trapetsmetoden

Definition Låt $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ vara ekvidistanta punkter. Med *Trapetsmetoden* approximerar vi

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

där $h = x_1 - x_0$ är *steglängden* och

$$T(h) = h \left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2} \right),$$

Kommentar Kräver att funktionen är *integrerbar* och dessutom *begränsad*. Mindre h bör ge noggrannare approximation.

Sats Antag att $f(x)$ är kontinuerlig på intervallet $[a, b]$ och att approximationen $\bar{f}(x) \approx f(x)$ har ett absolut fel högst ε . Då gäller att

$$|R_{XF}| \leq \left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b \bar{f}(x) dx \right| \leq (b - a)\varepsilon.$$

Kommentar Integralens värde är inte särskilt känsligt med avseende på fel i funktionen $f(x)$. Vad händer om vi istället känner $f(x)$ med ett litet *relativt fel*?

Vi kommer att behöva *medelvärdessatsen* för integraler.

Sats Antag att $f(x)$ och $g(x)$ är kontinuerliga på intervallet $[a, b]$ samt att $g(x) \geq 0$. Då finns ett $a < \xi < b$ sådant att

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx.$$

Vi behöver även satsen om mellanliggande värde.

Sats Om $f(x)$ är kontinuerlig på intervallet $[a, b]$ och $c \in [f(a), f(b)]$ då finns det ett $x \in [a, b]$ sådant att $f(x) = c$.

Exempel Beräkna

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx,$$

med hjälp av Trapetsmetoden.

| h | $T(h)$ | $ T(h) - \frac{\pi}{4} $ |
|-------|----------|--------------------------|
| 1.000 | 0.750000 | $3.5 \cdot 10^{-2}$ |
| 0.500 | 0.775000 | $1.0 \cdot 10^{-2}$ |
| 0.250 | 0.782794 | $2.6 \cdot 10^{-3}$ |
| 0.125 | 0.784747 | $6.5 \cdot 10^{-4}$ |

Vi ser tydligt att felet beter sig som $R_T \approx Ch^2$.

Hur skall trunckeringsfelet uppskattas?

Sats Trapetsmetoden beräknar en approximation $T(h)$ sådan att

$$I = \int_a^b f(x)dx = T(h) + R_T,$$

där

$$R_T(h) = \frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta),$$

för något $a \leq \eta \leq b$.

Det gäller alltså att trunckeringsfelet då en integral approximeras med Trapetsmetoden uppfyller

$$|R_T| = |T(h) - I| \approx Ch^2,$$

där h är steglängden.

Simpsonsformel

Definition Låt x_1, x_2 och x_3 vara tre ekvidistanta gridpunkter. Simpsons formel approximerar

$$I = \int_{x_1}^{x_3} f(x)dx = \frac{h}{3}(f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)) + R_T,$$

där $h = x_2 - x_1$, och

$$R_T(h) = Ch^5.$$

Härleds genom interpolation med andragsgradspolynom. Trunckeringsfel $\mathcal{O}(h^5)$ på varje delintervall $[x_k, x_{k+2}]$ ger globalt trunckeringsfel $\mathcal{O}(h^4)$.

Kräver att $f^{(4)}(x)$ är kontinuerlig.

Extrapolation

Definition En *numerisk metod* beräknar ett värde $F(h)$, där h är en *diskretiseringsparameter*.

Definition Den numeriska metoden är *konvergent* om $F(h) \rightarrow F_0$, då $h \rightarrow 0$, där F_0 är det exakta värdet.

Alltså, en metod är konvergent om *trunkeringsfelet* $R_T \rightarrow 0$ då $h \rightarrow 0$.

Lemma Om $f(x)$ är kontinuerlig på $[a, b]$ så är Trapetsmetoden konvergent.

Sats Antag att

$$F(h) = F_0 + c_1 h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Trunkeringsfelet i approximationen $F(h)$ kan uppskattas,

$$|R_T(h_1)| = |F(h_1) - F_0| \approx c_1 h^p \approx \frac{|F(qh) - F(h)|}{q^p - 1}.$$

där $q > 1$ är ett heltal.

Kommentar Vi kan alltså uppskatta ett trunkeringsfel genom att beräkna två olika approximationer med olika steglängd h och dessutom känna till metodens noggrannhetsordning p .

Sats Om $f(x)$ har fyra kontinuerliga derivator på $[a, b]$ så gäller att Trapetsmetoden har ett trunkeringsfel som kan skrivas som

$$R_T = |T(h) - I| = Ch^2 + \mathcal{O}(h^4),$$

där C är en konstant som är *oberoende av h* .

Kommentar Detta är lite klurigt att visa men går att utnyttja! Liknande resultat finns för många olika numeriska metoder.

Exempel Vi använder trapetsmetoden och beräknas approximationer av en integral med olika steglängder.

| h | 0.2 | 0.1 | 0.05 | 0.025 |
|--------|----------|----------|----------|----------|
| $T(h)$ | 1.589339 | 1.577520 | 1.574243 | 1.573402 |

Använd tabellen ovan för att uppskatta felet i approximationen för $h = 0.1$ och $h = 0.05$.

Sats Antag att

$$F(h) = F_0 + c_1 h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Då gäller att

$$\begin{aligned} F_1(h) &= F(h) - \frac{1}{q^p - 1} (F(qh) - F(h)) \\ &= F_0 + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned}$$

Kommentar Vi har eliminerat den dominerande feltermen och har fått en approximation med högre noggrannhetsordning. Att kombinera en numerisk metod med extratolation ger en ny, oftast bättre, metod.

Exempel Beräkna integralen

$$I = \int_0^{0.1} \sqrt{x} e^{-x} dx,$$

med Trapetsmetodenusing. Vi får

| | | | | |
|--------|----------|----------|----------|----------|
| h | 0.05 | 0.025 | 0.0125 | 0.00625 |
| $T(h)$ | 0.017788 | 0.019101 | 0.019586 | 0.019762 |

Uppskattar vi trunckeringsfelet med $R_T(h) \approx (T(h) - T(h/2))/3$ fås

| | | | |
|----------|-----------|-----------|------------|
| h | 0.025 | 0.0125 | 0.00625 |
| $R_T(h)$ | -0.000438 | -0.000162 | -0.0000587 |

Felet **kan inte** skrivs som ch^2 . Extrapolation fungerar inte.

Sats Antag att en funktionen $f(x)$ har tillräckligt många kontinuerliga derivator. Då gäller att

$$f'(x) = D_0(h) + R_T(x),$$

där

$$D_0(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

och

$$R_T(x) = c_1 h^2 + \mathcal{O}(h^4).$$

Kommentar Detta kallas för *centraldifferensapproximation* av derivatan. Även här är trunckeringsfelets utseende känt.

Exempel Beräkna en derivata $f'(1)$ med hjälp av centraldifferensformeln

$$D_0(h) = \frac{1}{2h} (f(x+h) - f(x-h)).$$

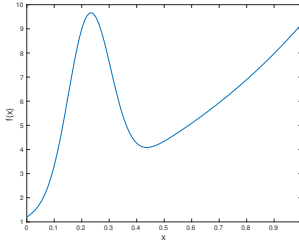
Vi använder två steglängder och får

$$D_0(0.3) = 1.25657, \quad D_0(0.1) = 1.28420$$

Uppskatta nu felet i approximationen $D_0(0.1)$. Förbättra även noggrannheten med extrapolation.

Observation Det är oftast enklare att kombinera en existerande metod med extrapolation än att utveckla nya metoder med högre noggrannhetsordning.

Exempel Vi vill beräkna integralen av en funktion $f(x)$ med ett givet maximalt fel ε . Först plottar vi funktionen



Observation Andra derivatan är av olika storleksordning på olika delar av intervallet. Vi bör anpassa steglängden efter detta.

I Python skriver vi en funktion

```
def AdaptInt(f, a, b, tol, fa, fb):
    c=(a+b)/2
    fc=f(c)
    I1=(b-a)*(fa+fc)/2
    I2=(b-a)*(fa/2+fc+fb/2)/2
    Rt=np.abs((I2-I1)/3)
    if Rt<tol:
        return (I2,Rt)
    else:
        (I1,Rt1)=AdaptInt(f,a,c,tol/2,fa,fc)
        (I2,Rt2)=AdaptInt(f,c,b,tol/2,fc,fb)
    return (I1+I2,Rt1+Rt2)
```

En funktionsberäkning vid varje rekursionssteg.

Metod Låt $h = b - a$, och $c = (a + b)/2$. Beräkna

$$I_h = \frac{h}{2} (f(a) + f(b)) \quad \text{och} \quad I_{h/2} = \frac{h}{2} \left(\frac{f(a)}{2} + f(c) + \frac{f(b)}{2} \right).$$

Då är

$$I = \int_a^b f(x)dx = I_{h/2} + R_T \quad \text{och} \quad R_T \approx (I_h - I_{h/2})/3.$$

Om $|R_T| < \varepsilon$ är vi klara annars tillämpar vi metoden rekursivt och beräknar

$$I_1 = \int_a^c f(x)dx \quad \text{och} \quad I_2 = \int_c^b f(x)dx,$$

med fel högst $\varepsilon/2$. Då blir $I = I_1 + I_2$ med ett fel högst ε .

För att underlätta anrop skriver vi dessutom

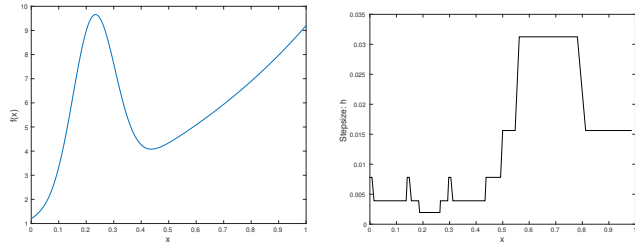
```
def adaptivIntegral(f, a, b, tol):
    return AdaptInt(f, a, b, tol, f(a), f(b))

def f(x):
    return np.sqrt(1+x)

adaptivIntegral(f, 0, 1, 1e-3)
```

Ger resultatet $I = 1.2189506716330833$ och $|R_T| \leq 8.1 \cdot 10^{-4}$.

Krävs 159 funktionsberäkningar. Med tolerans 10^{-5} krävs istället 1569 funktionsberäkningar.



Funktionen $f(x)$ och den steglängd h som används för fallet $\text{tol} = 10^{-3}$.

I `scipy.integrate` finns funktionen `quad` som beräknar integraler med liknande adaptivt steglängdsval.

Sammanfattning

- Extrapolation är en väldigt kraftfull teknik för att uppskatta fel och förbättra resultat.
- Det är viktigt att känna till trungeringsfelets beroende på diskretiseringsparametern h för numeriska metoder.
- Ger möjlighet att kontrollera om ett datorprogram implementerats korrekt.
- Adaptiva metoder anpassar sig till det aktuella problemet. Steglängden väljs automatiskt så att en given tolerans uppfylls.