

NUMOPEN 11-02-07***Om kvadratur***

10 tentor, Trapetsmetod poäng

Del 1 20p

Del 2 50p

20/200

13/500

ALLTSÅ

bör 10% av tiden ägnas trapetsmetoden (?)

- Formler
- Fel
- Extrapolation
- matlabs funktioner QUAD, QUADL, QUADGK
- Generaliserade integraler
 - singularitet
 - oändligt intervall
- Multipelintegraler

Att kunna:

Formel, fel; Extrapolation, Simpsons formel; svanskapning

Exempel

- Normalfördelning med medelvärde m och varians σ :

$$N(x, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-m}{\sigma}\right)^2}$$

- Boltzmanns strålningslag:

$$dE(\nu) = \frac{2h}{c^2} \cdot \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

- Geometri – Kurvlängd, yta, volym

$$L = \int_0^1 \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} dt$$

t ex

 $x(t), y(t), z(t)$ Bézierkurva, NURB

Härledning

Integralkalkylens fundamentalsats:

$$F'(x) = f(x) \Leftrightarrow \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

$$x_j = a + jh, j = 0, 1, \dots, N; x_N = b, h = (b - a) / N$$

$$F_j = F(x_j), \text{etc.. } F(b) = F_N, F(a) = F_0$$

Differensapproximation, central

$$\frac{F_{j+1} - F_{j-1}}{2h} = f_j + O(h^2), j = 1, 2, \dots, N-1$$

Summera!

$$\frac{F_N + F_{N-1} - (F_1 + F_0)}{2h} = f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + (N-1)O(h^2)$$

Men – enkelsidig differensapproximation -

$$F_1 - F_0 = hf_0 + O(h^2), F_N - F_{N-1} = hf_N + O(h^2)$$

och så får vi:

Trapezregeln med steg h , Eng. trapezoidal rule.

$$F_N - F_0 = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N\right) + \frac{h(N-1)}{(b-a)-h}O(h^2)$$

Fel

Om f är kontinuerligt deriverbar i $[a, b]$ så:

$$\left| \int_a^b f(x)dx - T(h) \right| \leq Kh^2$$

Om f är många gånger kontinuerligt deriverbar i $[a, b]$ så gäller Euler-McLaurins summationsformel

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx - T(h) &= -\frac{h^2}{12}(f'(b) - f'(a)) + \frac{h^4}{720}(f'''(b) - f'''(a)) + \dots \\ &\quad - \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)) + \dots \end{aligned}$$

(B_k är Bernoulli-talen, $B_1 = -1/2$, $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, $B_6 = 1/42$, $B_8 = -1/30$...)

Serien är i allmänhet *inte* konvergent när antalet termer ökar; men för givet antal termer blir resttermen mindre med h .

Extrapolation till $h = 0$:

Richardson-extrapolation

$$\begin{cases} I - T(h) = ch^2 + O(h^4) \\ I - T(qh) = c(qh)^2 + O(h^4) \end{cases} \Rightarrow I = S(h) + O(h^4) = T(h) + \frac{1}{q^2 - 1}(T(h) - T(qh)) + O(h^4)$$

Simpsons formel: $S(h) = \frac{b-a}{6} \cdot \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$

Prova på $f(x) = x^2$. $2h = b-a$, $q = 2$.

$$\begin{aligned} T(2h) &= h(a^2 + b^2) \\ T(h) &= h(1/2a^2 + 1/4(a+b)^2 + 1/2b^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S(h) &= 4/3T(h) - 1/3T(2h) = h(1/3a^2 + 1/3b^2 + 1/3(a+b)^2) \\ &= (b-a)/6 (2a^2 + 2ab + 2b^2) \\ &= \underline{(b^3 - a^3)/3} \end{aligned}$$

dvs. exakt. Förklaring ges tex av Euler-McLaurins formel – bara h^2 -feltermen finns!

Exempel – manuell räkning

$$I = \int_0^1 \frac{\sin \pi x}{x} dx$$

Obs: $f(0) = 0/0$. Gränsvärdet är π .

x	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
f	3.1415	2.8284	2.0000	0.9428	0.0000

$$T(1) = 1 \left(\frac{1}{2} \cdot 3.1415 + \frac{1}{2} \cdot 0 \right) = 1.5708$$

$$T(1/2) = \frac{1}{2} (3.1415/2 + 2.0000 + 0.0000/2) = (1.5708 + 2.0000)/2 = 1.7854$$

$$T(1/4) = \frac{1}{4} (3.1415/2 + 2.8284 + 2.0000 + 0.9428 + 0.0000/2) = 1.7854/2 + (2.8284 + 0.9428)/4 = 1.8355$$

Extrapolation

T	diff	diff/3	T1	diff	diff/15
1.5708					
	0.2146	0.0715			
1.7854			1.8569		
	0.0501	0.0167		-0.0047	-0.0003
1.8355			1.8522		<u>1.8519</u>

Nogg.ordning

<u>$o(h^2)$</u>	<u>$o(h^4)$</u>	<u>$o(h^6)$</u>
----------------------------	----------------------------	----------------------------

Pessimistisk feluppskattning (av 1.8522 ...) 0.005/15

QUADL med tolerans 10^{-12} ger 1.8519370520 ...

Generaliserad integral

a) Integrabel singularitet

$$\int_{-1}^1 \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (= \frac{\pi}{2})$$

Integrabel singularitet i båda intervallgränserna: $f(a+\delta) = C\delta^{-1/2}$

En substitutions $x = \sin t$ eliminerar singulariteten.

Prova utan med

1) trapetsregeln och 2) QUADGK

1. Trapetsregeln

Evaluerar f i ändpunkterna där f blir oändlig, så vi tar

$$2 \int_0^{1-\delta} \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (\approx \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{2\delta})$$

och får med $\delta = 10^{-12}$

n T(h)

20 7.0712e+004

...

320 4.4209e+003

I själva verket behövs alltså att $h/\sqrt{\delta} \ll 1$ för att det ska bli litet fel. Det duger inte.

2. QUADGK

klarar det galant. Sågs kunna integrera änd-singulariteter $\log|x-a|$ och $(x-a)^p$, $p > -1/2$

och $-1/2$ fungerar:

> **quadgk(@func1, -1, 1): 1.5708 med 150 f-evalueringar**

b) Oändligt intervall

Substitution kan byta oändligt intervall mot ändligt intervall med integrabel singularitet;

Rätt substitution kan transformera till ändligt intervall utan singularitet.

Generellt: "svanskapning"

$$\int_a^\infty f(x) dx = \int_a^A f(x) dx + S(A), S(A) = \int_A^\infty f(x) dx$$

där A väljs så att svans-integralen kan försummas eller tillräckligt noga beräknas

approximativt. Antag att felet ska bli $< \text{tol}$. Då ser vi till att svansen blir $< 1/2 \text{ tol}$ och spar

$1/2 \text{ tol}$ för numerisk beräkning av $\int_a^A f(x) dx$. Alltså ska vi för, säg $A > 1$, finna ett så litet A

som möjligt som ger $S(A) < \text{tol}/2$.

Exempel – Påhittat för tenta-tal

$$I = \int_0^\infty \frac{1}{x^4 + 1 + \sin^2 x} dx. \text{ Vi får } S(A) = \int_A^\infty \frac{dx}{x^4 + 1 + \sin^2 x} < \int_A^\infty \frac{dx}{x^4} = \frac{1}{3A^3}$$

så vi väljer $A = \sqrt[3]{\frac{2}{3 \cdot \text{tol}}}$. För $\text{tol} = 10^{-6}$ blir A ca 100.

(forts.)

Listigare är förstås att lägga till uppskattningen. Då blir felet bara

$$E(A) = \int_A^{\infty} \left(\frac{1}{x^4 + 1 + \sin^2 x} - \frac{1}{x^4} \right) dx = - \int_A^{\infty} \frac{1 + \sin^2 x}{x^4 (x^4 + 1 + \sin^2 x)} dx, |E(A)| < \int_A^{\infty} \frac{2}{x^8} dx = \frac{2}{7A^7}$$

så nu räcker det med $A = \frac{k}{\sqrt[7]{tol}}$, ungefär 10 för $tol = 10^{-6}$ - en väsentlig minskning!

Exempel

Vilken noggrannhetsordning har matlabs QUAD?

- I help står "recursive adaptive Simpson quadrature." – antyder ordning 4.
- I koden står:

```
...
% Three point Simpson's rule.
Q1 = (h/6)*(fa + 4*fc + fb);
% Five point double Simpson's rule.
Q2 = (h/12)*(fa + 4*fd + 2*fc + 4*fe + fb);
% One step of Romberg extrapolation.
Q = Q2 + (Q2 - Q1)/15;
```

dvs. en extrapolation av $O(h^4)$ -formler, så felet bör bli $O(h^6)$. QUAD använder inte konstant steglängd, så vi räknar hur många punkter **nf** integranden evalueras i. Då blir

$$h = (b-a)/nf.$$

Vi provar på

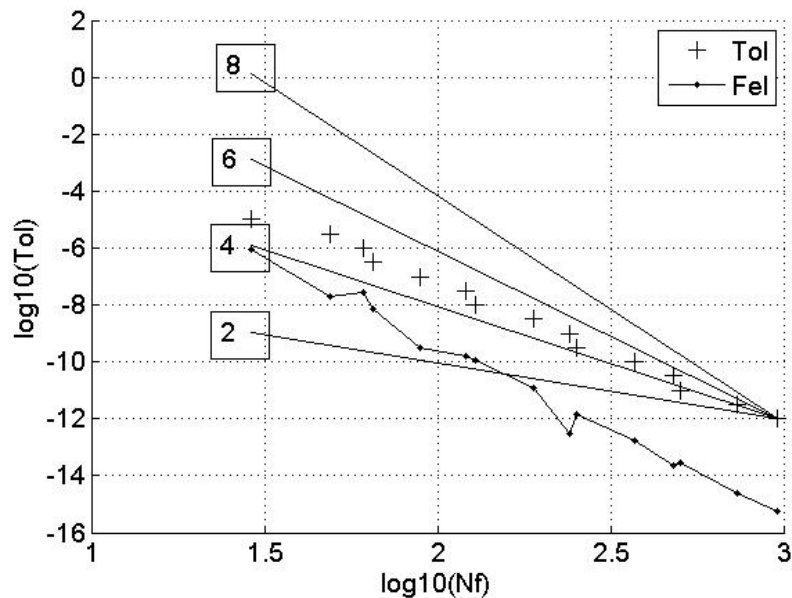
$$\int_0^2 \sin 4x \, dx = 1/4(1 - \cos(8))$$

och visar absolutfel, tolerans, och nf i ett log-log diagram. Det bör bli ungefär samma steg i hela intervallet (och det blir det). Linjer med lutning 2, 4, 6 och 8 ritas in som jämförelse.

Om $Fel = K h^p$ så

$$\log(Fel) = \log K + p \log h$$

så att sambandet mellan fel och steglängd liknar en rät linje i ett loglog-diagram



Det ser ut som att: fel-kurvan har lutning 6 men tolerans-kurvan lutar ca. 5.

Gauss-kvadratur

De andra matlab-kvadraturfunktionerna bygger på Gauss-kvadratur.

QUADL rekommenderas för snälla integrander:

"...recursive adaptive Lobatto quadrature."

"QUADGK (Gauss-Kronrod) may be most efficient for oscillatory integrands and any smooth integrand at high accuracies. It supports infinite intervals and can handle moderate singularities at the endpoints. It also supports contour integration along piecewise linear paths."

Vi har ovan använt ekvidistanta punkter att evaluera integranden i. Om man får välja punkterna fritt kan formeln bli mycket noggrannare. En *Gauss-kvadratur-formel* G_N definieras av *abskissorna* x_j , $j = 1, \dots, N$ och *vikterna* w_j ,

$$G_N = \sum_{j=1}^n w_j f(x_j), R(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx - G_N$$

Vi har här $2N$ parametrar till förfogande och det visar sig, att man kan bestämma abskissor och vikter så att felet $R(f)$ försvinner när f är *polynom av gradtal $2N-1$* .

Trapetsregeln är exakt för förstgradspolynom, Simpsons regel för tredjegradspolynom, en lika jobbig Gauss-formel klarar femtegradspolynom.

Man kan visa, att

- vikterna blir positiva, vilket garanterar måttlig tillväxt av avrundningsfel
- abskissorna är noll-ställen till Legendre-polynomet av gradtal $2N-1$ och abskissorna ligger i det inre av $[-1, 1]$
- abskissorna är också egenvärden till en tri-diagonal matris som innehåller koefficienterna till den rekursionsformel som Legendre-polynomen satisfierar,

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x), P_0(x) = 1, P_1(x) = x$$

0 1

1 x

2 $\frac{1}{2}(3x^2 - 1)$

3 $\frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$ (**)

4 $\frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$

5 $\frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$

6 $\frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$

7 $\frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x)$

8 $\frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35)$

Figur: Legendre-polynom av ordning 0 ... 8.

För en tre-punktsformel (**) är alltså $x_{-1} = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_0 = 0, x_1 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Vikterna w_0 och w_1

(av symmetriskäl blir $w_1 = w_{-1}$) bestäms så att formeln blir exakt för polynom av gradtal 0, (1), 2, 3, ...:

$f = 1$: $w_0 \cdot 1 + 2w_1 \cdot 1 = 2$;

$f = x^2$: $w_0 \cdot 0 + 2 \cdot \frac{3}{5} w_1 = 2/3$; Ger $w_1 = 5/9, w_0 = 8/9$.

Vi provar om den kan integrera ett fjärdegradspolynom $f(x) = x^4$ exakt:

$$8/9 \cdot 0 + 2 \cdot 5/9 \cdot (\sqrt{3/5})^4 = 2/5 = \int_{-1}^1 x^4 dx$$

OK. Och alla udda-gradspolynom klaras (alla integraler blir 0)
så formeln är exakt för femtegradspolynom, $2N-1 = 6-1 = 5$, OK!

Exempel – Riktigt men krångligare än tenta-tal

$I = \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$ dyker upp i Boltzmanns strålningslag. Man kan visa med konturintegration -

se kurs i komplexa variabler - att $I = \frac{\pi^4}{90}$.

Nämnaren blir 0 för $x = 0$, men täljaren x^3 ger $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = 0$, så vi behöver bara kapa svansen.

$$\begin{aligned} S(A) &= \int_A^\infty f(x) dx = \int_A^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \int_A^\infty \frac{e^{-x} x^3}{1 - e^{-x}} dx < \frac{1}{1 - e^{-A}} \cdot \int_A^\infty e^{-x} x^3 dx = \\ &= \frac{1}{1 - e^{-A}} \cdot e^{-A} (A^3 + 3A^2 + 6A + 6) < 2 \cdot 16A^3 e^{-A} \end{aligned}$$

där vi partial-integrerat tre gånger vilket gav polynomet i A . Nu återstår att finna det minsta A så att

$$A^3 e^{-A} < tol / 32$$

och det gör man nog enklast genom att prova några A ;