9 Numerisk integrasjon

I dette kapitlet skal vi ta for oss noen vanlige numeriske integrasjonsmetoder. I M1 har du lært to av dem - trapesregelen og Simpsons metode. Vi skal raskt repetere disse, og så gå videre til mer spennende metoder. Alle er bygget på interpolasjonsteknikken vi lærte i forrige uke.

Kvadraturregler

Vi skal finne tilnærminger til integralet

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

ved å interpolere f, og så integrere intepolasjonspolynomet analytisk. Dette kalles kvadratur, og en bestemt metode kalles gjerne *kvadraturregel.* La x_i være interpolasjonspunkter på $[a, b]$, og l_i de korresponderende lagrangefunksjonene, slik at

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x).$$

Vi skriver

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x)\,dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)\,dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i) A_i = Q[f],\end{aligned}$$

der vi har definert $A_i = \int_a^b l_i(x)\,dx$. Disse kalles *kvadraturvektene*, eller bare *vektene.*

Eksempel 9.1. En av de aller enkleste kvadraturreglene kjenner du fra M1. Den kalles trapesregelen, er gitt ved

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$$

og utledes enkelt ved å interpolere f med et førsteordens polynom i $x_0 = a$ og $x_1 = b$ og integrere dette. Vektene er

$$A_0 = A_1 = \frac{b-a}{2}. \qquad \triangle$$

Eksempel 9.2. Gauss-Legendre-punktene for $n = 2$ på intervallet $[-1, 1]$ er $\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$, og lagrangefunksjoner er

$$l_0(x) = \frac{\sqrt{3}}{2}\left(x + \sqrt{\frac{1}{3}}\right)$$

og

$$l_1(x) = -\frac{\sqrt{3}}{2}\left(x - \sqrt{\frac{1}{3}}\right).$$

Vi beregner

$$A_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}\int_{-1}^{1} x + \sqrt{\frac{1}{3}}\,dx = 1$$

og

$$A_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\int_{-1}^{1} x - \sqrt{\frac{1}{3}}\,dx = 1. \qquad \triangle$$

Eksempel 9.3. Simpsons regel, som du også kjenner fra M1,

$$Q[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right),$$

har vekter

$$A_0 = A_2 = \frac{b-a}{6} \quad \text{og} \quad A_1 = \frac{2(b-a)}{3}.$$

Disse utledes ved å interpolere f med andre ordens polynomer i a, b og $\frac{a+b}{2}$, men dette er gjort i M1, så vi dropper det. $\triangle$

Feilestimat

Det første vi kan gjøre, er å sette opp en generell regel for kvadraturfeil. Denne detter rett ut av feilestimatet for intepolasjon.

Teorem 9.4. *La Q være en $n+1$-punkts kvadraturregel på $[a, b]$, og anta at f er $n+1$ ganger kontinuerlig deriverbar på $[a, b]$. En øvre skranke for feilen er*

$$|I[f] - Q[f]| = \frac{M}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{n} |x - x_i|\,dx$$

der $M = \max_{s\in[a,b]} |f^{n+1}(s)|$.

Bevis. Integrer feilestimatet

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{n+1}(s)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x - x_k).$$

fra a til b og bruk at $|f^{n+1}| \le M$. $\square$

Fordelen med dette teoremet er at det er lett å bevise. Ulempen er at det stort sett er mulig å finne skarpere estimater, men disse er mer grisete å utlede. Vi tar derfor med noen bedre feilestimater for forskjellige kvadraturregler uten bevis.

Teorem 9.5. *For trapesregelen finnes det en $s \in (a, b)$ slik at*

$$I[f] - Q[f] = \frac{(b-a)^3}{12} f''(s).$$

Teorem 9.6. *For Simpsons regel finnes det en $s \in (a, b)$ slik at*

$$I[f] - Q[f] = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^4(s).$$

Det går an å skrive opp feilestimater for kvadraturregler basert på Chebyshev-punkter, Gauss-Legendre-punkter og Gauss-Lobatto-punkter, men de er ganske grisete, og bevisen er altfor kompliserte for oss. Vi nøyer oss derfor med noen eksempler, der vi sammenlikner med den analytiske verdien til integralet.

Eksempel 9.7. Vi tilnærmer

$$\int_{-1}^{1} e^x \, dx = e - e^{-1} = 2.350402387287603$$

med trapesregelen:

$$Q[f] = e^{-1} + e \approx 3.086161269630488.$$

Feilen er i samme størrelsesorden som svaret. Triste greier. △

Eksempel 9.8. Med Simpsons regel går det litt bedre:

$$Q[f] = \frac{1}{3}(e^{-1} + 4e^0 + e) \approx 2.362053756543496$$

Her er feilen $0.011651369255893 \approx 10^{-2}$. △

Eksempel 9.9. Gauss-Legendre med $n = 2$ gir

$$Q[f] = e^{-\sqrt{1/3}} + e^{\sqrt{1/3}} \approx 2.342696087909730$$

Her er feilen på $-0.007706299377873 \approx 10^{-2}$, og faktisk mindre enn for Simpsons regel, til tross for at kvadraturregelen er basert på en lavere ordens interpolasjon. Dette eksemplet illustrerer at plasseringen av interpolasjonspunktene har mye å si. △

Presisjonsgrad

Har forskjellige kvadraturregler noen andre gode egenskaper enn høy presisjon? Vi sier at en integrasjonsformel er eksakt for funksjonen f dersom

$$\int_a^b f \, dx = \sum_i f(x_i)A_i.$$

Dersom du interpolerer et polynom av grad n elller lavere med et polynom av grad n, blir f og p identiske. Derfor må det være klart at

$$\int_a^b p(x) \, dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)A_i,$$

for alle polynomer av grad n eller lavere. Dersom kvadraturregelen er intelligent designet, kan man oppnå høyere presisjonsgrad enn som så.

Eksempel 9.10. Trapesregelen har presisjonsgrad 1, for

$$Q[1] = (b-a)\left(\frac{1+1}{2}\right) = b - a = \int_a^b \, dx$$

og

$$Q[x] = (b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right) = \frac{b^2-a^2}{2} = \int_a^b x \, dx,$$

mens

$$\begin{aligned} Q[x^2] &= (b-a)\left(\frac{a^2+b^2}{2}\right) \\ &= \frac{b^3 - ab^2 + a^2b - a^3}{2} \neq \int_a^b x^2 \, dx. \end{aligned}$$

Disse beregningene viser at trapesregelen integrerer alle første ordens polynomer riktig, siden

$$Q[cx + d] = cQ[x] + dQ[1].$$

Ingen andre ordens polynomer integreres riktig, siden

$$Q[cx^2 + dx + e] = cQ[x^2] + dQ[x] + eQ[1],$$

og $Q[x^2]$ ikke integreres riktig. △

Eksempel 9.11. Gauss-Lobatto $n = 2$ har presisjonsgrad 3. Dette kan vises på samme måte som for trapesregelen, men vi venter litt med å se på det. Det er nemlig ikke så vanskelig å vise generelt at en $n+1$-punkts Gauss-Lobatto-regel har presisjonsgrad $2n+1$, og dette skal vi gjøre senere. △

Eksempel 9.12. Simpsons regel har presisjonsgrad 3. En rask titt på feilestimatet forteller at dersom f er et tredjegradspolynom, er $f^4 = 0$. △

Noen forskjellige kvadraturklasser

Kvadraturregler skilles av er punktfordelingen, og hvorvidt man interpolerer med et polynom av høy grad på alle punktene, eller deler opp intervallet og interpolerer med stykkvis kontinuerlige polynombiter, såkalt *sammensatte regler*. Vi skal ta for oss et par klassiske kvadraturregler, og avslutte med en diskusjon rundt sammensatte regler.

Newton-Cotes

Både trapesregelen og Simpsons metode er eksempler på Newton-Cotes-regler. Dette er regler der interpolasjonen er gjort på ekvidistante gitre. En klassisk lærebok i numerisk analyse vil typisk inneholde en lengre utgreining om Newton-Cotes, men vi vet jo at man skal styre unna polynominterpolasjon på ekvidistante gitre, så derfor lar vi Newton-Cotes ligge.

Eksempel 9.13. Trapesregelen og Simpsons regel er Newton-Cotes-regler med henholdsvis $n = 2$ og $n = 3$. △

Clenshaw-Curtis

Clenshaw-curtiskvadratur baserer seg på å integrere chebyshevinterpolanten. For chebyshevinterpolasjon er det lett å skrive opp formler for interpolasjonspunktene, og pene formler for kvadraturvektene, men disse formlene er vanskelige å utlede.

Teorem 9.14. *Dersom n er et partall, og interpolasjonsgitteret er et n-punkts chebyshev ekstremalgitter, er vektene til kvadraturregelen gitt ved*

$$w_1 = w_n = \frac{1}{(n-1)^2}$$

og

$$w_i = \frac{2}{(n-1)}\left(1 - \sum_{j=1}^{(n-2)/2} \frac{2}{4j^2-1} \cos\frac{2j(i-1)}{n-1}\pi\right)$$

for $2 \le i \le n-1$.

Gauss-Legendre

Vi skal beskrive prosessen som produserer Legendre-polynomene, og vise at denne prosessen produserer kvadraturformler med presisjonsgrad $2n+1$.

Teorem 9.15. *La q være et polynom av grad $n+1$ slik at*

$$\int_a^b qp\,dx = 0 \tag{9.1}$$

for alle polynomer p av grad mindre enn eller lik n. En kvadraturregel med disse $n+1$ nullpunktene som noder, vil være eksakt for alle polynomer av grad mindre enn eller lik $2n+1$.

Bevis. Vi begynner med å vise at polynomet q har $n+1$ forskjellige nullpunkter på intervallet $[a,b]$. La $x_0, x_1 \ldots, x_{r-1}$ være de r punktene der q bytter fortegn på $[a,b]$. Polynomet

$$\prod_{i=0}^{r-1}(x - x_i)$$

har grad r, og bytter fortegn nøyaktig samtidig som q, slik at enten

$$q\prod_{i=0}^{r-1}(x - x_i) \leq 0$$

eller

$$q\prod_{i=0}^{r-1}(x - x_i) \geq 0$$

på $[a,b]$. Dette betyr at

$$\int_a^b q\prod_{i=0}^{r-1}(x - x_i)\,dx \neq 0,$$

og siden vi har

$$\int_a^b qp\,dx = 0 \tag{9.2}$$

for alle polynomer p av grad mindre enn eller lik n, impliserer dette at $r \geq n+1$. Siden r åpenbart ikke kan være større enn $n+1$, må $r = n+1$. Altså bytter q fortegn $n+1$ ganger på $[a,b]$, og må følgelig ha $n+1$ nullpunkter på $[a,b]$.

La nå h være et polynom av grad $2n+1$ eller lavere, og del h på q med rest r:

$$h = qp + r.$$

der p har grad n, og r har maksimal grad n. Vi evaluerer h i x_i, og ser at

$$h(x_i) = q(x_i)p(x_i) + r(x_i) = r(x_i),$$

siden $q(x_i) = 0$ for alle i. Siden kvadraturregelen er basert på integrasjon av et n-te ordens polyom, er den åpenbart er eksakt for polyonomer av orden n eller lavere, og vi kan beregne

$$\begin{aligned}\int_a^b h(x)\,dx &= \int_a^b q(x)p(x) + r(x)\,dx = \int_a^b r(x)\,dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} r(x_i)A_i = \sum_{i=0}^{n} h(x_i)A_i. \qquad \square\end{aligned}$$

Eksempel 9.16. Vi tar et eksempel der vi konstruerer q fra grunnen av. La $n = 1$ og $[a,b] = [0,1]$. Vi må finne

$$q(x) = ax^2 + bx + c.$$

Vi begynner med å kreve at q skal stå ortogonalt på alle polynomer av grad 1 eller lavere. Dersom

$$\int_0^1 q(x)\,dx = \int_0^1 ax^2 + bx + c\,dx = \frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 0$$

og

$$\int_0^1 xq(x)\,dx = \int_0^1 ax^3 + bx^2 + cx\,dx = \frac{a}{4} + \frac{b}{3} + \frac{c}{2} = 0,$$

vil

$$\int_0^1 (ax+b)q(x)\,dx = 0.$$

Vi ganger den første likningen med seks, den andre med tolv, og får likningssystemet

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 6 \\ 3 & 4 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Litt gausseliminasjon gir

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 6 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Her står det at $a + b = 0$, og at $2a + 3b + 6c = 0$. Løsningsrommet er

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 6 \\ -6 \\ 1 \end{pmatrix},$$

slik at

$$q(x) = 6x^2 - 6x + 1,$$

er et mulig valg for q. Andre valg av konstanten c vil gi andre polynomer, men alle vi ha de samme nullpunktene, og det er dem vi er ute etter. Nullpunktene til q er

$$x_0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \qquad \text{og} \qquad x_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}.$$

Lagrangefunksjonene blir

$$L_0 = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \sqrt{3}\left(x - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)\right)$$

og

$$L_1 = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \sqrt{3}\left(x - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)\right)$$

slik at

$$A_1 = \sqrt{3}\int_0^1 x - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)dx = \frac{1}{2} = A_0.$$

Integrasjonsrutinen vi har laget skal være eksakt for alle polynomer opp til grad 3. Vi tester:

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^2 = \frac{1}{3} = \int_0^1 x^2\,dx$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^3+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^3=\frac{1}{4}=\int_0^1 x^3\,dx.$$

Merk at punktene er bare Gauss-Legendre-punktene flyttet til intervallet $[0,1]$. Dette eksemplet illustrerer hvordan Gauss-Legendre-tabellen i interpolasjonskapitlet er konstruert. △

Kommentar. Legendrepolynomene er definert på intervallet $[-1,1]$, så eksemplet over laget ikke et legendrepolynom, men derimot et polynom som har nullpunktene til legendrepolynomet

$$P_2=\frac{1}{2}(3x^2-1)$$

flyttet til intervallet $[0,1]$.

Vi kan utvide tabellen fra forrige kapittel med vekter. Husk at tabellen gjelder for $[-1,1]$, så om du trenger integrasjonsrutine for andre intervaller, må punktene flyttes, og vektene beregnes på nytt.

n	x_i	A_i
2	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
3	0	$\frac{8}{9}$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$
4	$\pm\sqrt{\frac{3}{7}-\frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{7}+\frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$
5	0	$\frac{128}{225}$
5	0, $\pm\frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$
5	0, $\pm\frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$

Merk at alle vektene er positive. Kvadraturentusiaster regner dette som et kvalitetsstempel.

Gauss-Lobatto

Vi koster på oss en tabell med vekter for Gauss-Lobatto også.

n	x_i	A_i
3	0	$\frac{4}{3}$
	± 1	$\frac{1}{3}$
4	$\pm\sqrt{\frac{1}{5}}$	$\frac{5}{6}$
	± 1	$\frac{1}{6}$
5	0	$\frac{32}{45}$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{7}}$	$\frac{49}{90}$
	± 1	$\frac{1}{10}$
6	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}-\sqrt{\frac{2}{3\sqrt{7}}}}$	$\frac{14+\sqrt{7}}{30}$
	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}+\sqrt{\frac{2}{3\sqrt{7}}}}$	$\frac{14-\sqrt{7}}{30}$
	± 1	$\frac{1}{15}$
7	0	$\frac{256}{525}$
	$\pm\sqrt{\frac{5}{11}-\frac{2}{11}\sqrt{\frac{5}{3}}}$	$\frac{124+7\sqrt{15}}{350}$
	$\pm\sqrt{\frac{5}{11}+\frac{2}{11}\sqrt{\frac{5}{3}}}$	$\frac{124-7\sqrt{15}}{350}$
	± 1	$\frac{1}{21}$

Eksempel 9.17. Simpsons regel er også en Gauss-Lobatto-regel med $n=3$. △