Litt om numerisk integrasjon og derivasjon og løsningsforslag til noen ekstraoppgaver MAT-INF 1100 uke 48 (22/11-26/11)

Knut Mørken

22. november 2004

Vi har tidligere i kurset sett litt på numerisk derivasjon (seksjon 6.2 i kompendiet) og numerisk integrasjon (seksjon 8.7 i Kalkulus og seksjon 7.2 i kompendiet). I forbindelse med numerisk løsning av differensialligninger har vi også sett at vi kan ha bruk for tilnærminger til den deriverte. Dette lille skrivet inneholder ikke nytt stoff om disse emnene, men kan forhåpentligvis bidra til å gi litt mer oversikt over temaet. Vi har ikke tatt med noe motivasjon for hvorfor vi kan trenge numeriske metoder for derivasjon og integrasjon, for dette henviser vi til kompendiet og Kalkulus.

Hvis vi bare ser på de ulike tilnærmingene for seg, kan både numerisk integrasjon og derivasjon lett synes som en samling med mer eller mindre tilfeldige metoder, og det kan virke nokså uforståelig hvordan noen kunne finne på disse metodene. For å få oversikt i virvaret, er det som alltid viktig å prøve å få øye på noen overordnede prinsipper. Det overordnede prinsippet for både numerisk integrasjon og derivasjon er følgende:

Erstatt funksjonen f som skal integreres eller deriveres med et interpolerende polynom p og integrer eller deriver p i stedet for f.

Interpolasjon kan du lese om i seksjon 9.2.1 i kompendiet. La oss se litt nærmere på integrasjon og derivasjon i denne rekkefølgen.

Numerisk integrasjon

I seksjon 8.7 i Kalkulus har vi allerede sett prinsippet over gjennomført i praksis. Der deler vi integrasjonsområdet $[a, b]$ inn i delintervaller, tilnærmer f med et polynom på hvert delintervall, integrerer hvert av disse polynomene og summerer til slutt opp bidragene fra hvert delintervall. Den største utfordringen er dermed hvordan vi skal finne polynomtilnærmingen på hvert delintervall.

I Kalkulus er det nevnt tre hovedmuligheter: Tilnærming på et delintervall med en konstant funksjon, en lineær funksjon og en parabel. La oss se på de to siste først.

Trapesformelen. La oss for enkelhets skyld se på det første delintervallet $[a, a+h]$. Vi finner først den rette linja som interpolerer f i a og $a+h$. Deretter finner vi arealet under denne linja som

$$\frac{h}{2}\big(f(a) + f(a+h)\big).$$

Simpsons metode. Her interpolerer vi med en parabel på hvert delintervall. Siden vi trenger tre punkter for å interpolere med parabler, ser vi på intervallet $[a, a+2h]$ og integrerer parabelen som har samme verdi som f i punktene a, $a+h$ og $a+2h$. Integrerer vi denne får vi

$$\frac{h}{3}\big(f(a) + 4(a+h) + f(a+2h)\big)$$

som tilnærming til $\int_a^{a+2h} f(x)\,dx$.

Tilnærming med konstanter. Integralet er i Kalkulus definert ved hjelp av øvre og nedre trappesummer som jo nettopp består i å tilnærme f med en konstant på hvert delintervall. For den øvre trappesummen bruker vi, på intervallet $[a, a+h]$, verdien av f i det punktet C der f oppnår sitt maksimum på $[a, a+h]$. Integraltilnærmingen på dette intervallet blir da

$$hf(C).$$

For den nedre trappesummen bruker vi på tilsvarende måte verdien av f i punktet c der f oppnår sitt minimum på $[a, a+h]$, slik at tilnærmingen blir

$$hf(c).$$

Disse tilnærmingene er hendige når vi skal finne fram til egenskaper ved integralet og vise at de øvre og nedre trappesummene konvergerer mot hverandre. Men for praktiske, numeriske beregninger er disse trappesummene som regel til liten hjelp siden vi da må finne maksimum- og minimumverdiene til f på $[a, a+h]$, noe som kan ta mye tid om f er en komplisert funksjon. En mye enklere løsning er å bruke verdien av f i et fast punkt, for eksempel $f(a)$, siden vi da ikke trenger å kaste bort tid på å regne oss fram til det rette punktet. Tilnærmingen til integralet blir da

$$hf(a)$$

som vi kjenner igjen fra oppgave 2a i ekstraoppgavene for uke 48. Andre muligheter ville være å bruke $f(b)$ eller $f\big((a+b)/2\big)$ som tilnærming til f på intervallet $[a, a+h]$.

Mer om tilnærming med en rett linje. Når vi tilnærmer f med en konstant verdi på intervallet $[a,h]$, har vi altså mange mulige valg for denne konstanten. På samme måte kan vi tilnærme f med mange rette linjer på det samme intervallet. Det er dette som er tema for oppgave 2b–2c i ekstraoppgavene for uke 48. For å få en mer symmetrisk notasjon ser vi nå heller på intervallet $[a-h, a+h]$, resultatet kan alltid oversettes til andre intervaller etter behov. I oppgave 2b ønsker vi å bruke punktene $f(a-\alpha h)$ og $f(a+\alpha h)$ med kravet at $\alpha \in [0,1]$. Det første punktet skal altså ligge i intervallet $[a-h, a]$ og det andre i $[a, a+h]$, men avstanden til a skal være like stor for begge punktene slik at vi har symmetri. Utfordringen er så å bestemme α. For å gjøre dette trenger vi et eller annet fornuftig prinsipp vi kan benytte oss av. Prinsippet er som følger:

For å få en god metode for numerisk integrasjon er det om å gjøre at polynomer av så høy grad som mulig blir integrert eksakt.

En måte å se at dette er fornuftig er å tenke på Taylorpolynomer. Vi vet at mange funksjoner kan tilnærmes godt med Taylorpolynomer hvis vi bare ikke beveger oss for langt bort fra punktet vi gjør Taylorutviklingen om. For å få en god tilnærming til integralet av en slik funksjon kan vi derfor glemme restleddet og bare integrere Taylorpolynomet av en passende grad n. Har vi laget en numerisk integrasjonsmetode som integrerer polynomer av grad n eksakt så er det nettopp dette vi oppnår.

I oppgave 2b–2c er dette gjennomført med $n = 3$. Vi bestemmer nemlig α slik at den numeriske integrasjonsmetoden ikke gjør noen feil når vi integrerer funksjonene 1, x, x^2 og x^3, og resonnementet i løsningsforslaget viser at da kan vi faktisk integrere ethvert tredjegradspolynom uten feil (vi ser bort fra avrundingsfeil).

Utledning av feilformler. I oppgave 2c skal vi finne feilen i den numeriske metoden. Dette kan kanskje virke nokså voldsomt, men den underliggende teknikken er faktisk akkurat den samme som i den mye enklere oppgave 2a:

Erstatt alle funksjonsverdier som ikke er $f(a)$ med en Taylorutvikling om a. Kanseller ledd og slå sammen restleddene til et samlet restledd ved å ta maksverdier av den deriverte som forekommer.

Dette er som sagt langt enklere å gjennomskue i 2a, men teknikken er altså den samme i 2c.

Numerisk derivasjon

Prinsippet om å tilnærme f med polynomer av ulik grad er også prinsippet som gir oss ulike tilnærminger til den deriverte: Når vi har funnet tilnærmingen, deriverer vi denne i steden for f. I denne sammenhengen er det ikke så spennende med en konstant tilnærming siden den deriverte av denne alltid er 0.

Tilnærming med en rett linje. La oss igjen se på intervallet $[a,h]$ og tilnærme f med den rette linja som interpolerer f i a og $a+h$. Denne er gitt ved formelen

$$p_r(x) = f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x-a)$$

(sjekk at $p_r(a) = f(a)$ og $p_r(a+h) = f(a+h)$). Siden p_r er et førstegradspolynom, er den deriverte gitt ved konstanten $p_r'(x) = \bigl(f(a+h) - f(a)\bigr)/h$. Dette gir opphav til tilnærmingen

$$f'(a) \approx p_r'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x-a).$$

Denne tilnærmingen er kanskje den mest opplagte ut fra definisjonen av den deriverte, men samtidig er den litt utilfredstillende fordi vi bare henter informasjon om f fra den ene siden av a. Dette kan vi rette på ved å bruke linja som interpolerer f i $a-h$ og $a+h$. Denne er gitt ved

$$p_s(x) = f(a-h) + \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}(x-a+h).$$

Den deriverte av denne linja er gitt ved $p_s'(x) = \bigl(f(a+h) - f(a-h)\bigr)/(2h)$. Vi kan derfor ha godt håp om at $f'(a)$ kan tilnærmes med denne verdien,

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

At disse tilnærmingene faktisk gir mindre og mindre feil når h avtar, og at den andre metoden er mer nøyaktig enn den første, er tema i oppgave 1 i ekstraoppgavene til uke 48 (løsningsforslag for den ene finner du under).

Tilnærming med parabel. I begge de to foregående metodene finner vi en tilnærming til den deriverte ved hjelp av et førstegradspolynom. Men hvis vi ønsker å finne en tilnærming til den andrederiverte, holder det ikke å bruke rette linjer, siden den andrederiverte da alltid er identisk lik 0. Vi prøver i steden med en parabel. Vi husker fra seksjon 9.2.1 i kompendiet at vi kan tvinge en parabel til å gå gjennom tre punkter, og velger oss de tre punktene $a-h$, a og $a+h$. Hvis vi regner ut parabelen p_2 som har verdiene $f(a-h)$, $f(a)$ og $f(a+h)$ i disse punktene, får vi

$$\begin{aligned} p_2(x) = f(a-h) &+ \frac{f(a) - f(a-h)}{h}(x-a+h) \\ &\qquad + \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^2}(x-a+h)(x-a). \end{aligned}$$

Den andrederiverte er konstant og gir opphav til tilnærmingen

$$f''(a) \approx p_2''(a) = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}$$

(2-tallet i nevneren forsvinner siden den deriverte av x^2 er 2). Dette kjenner vi igjen som tilnærmingen i oppgave 1c.

Det kan også være interessant hvilken tilnærming vi får til den førstederiverte i a fra p_2. Hvis vi deriverer og regner ut får vi

$$f'(a) \approx p_2'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h},$$

altså akkurat den samme tilnærmingen som vi fant over.

Ved å bruke polynomer av høyere grad, kan vi på lignende måte finne fram til en hel hærskare av tilnærminger til ulike deriverte, men det er de enkle vi har gjengitt her som er de mest vanlige.

Feilformler. For å kunne vurdere kvaliteten på tilnærmingene må vi vite noe om feilen. Til dette bruker vi samme teknikk som ved numerisk integrasjon: Vi erstatter alle funksjonsverdier i andre punkter enn a med et Taylorpolynom med restledd, utviklet om a. Det eneste spørsmålet er hvor stor grad vi skal bruke på Taylorpolynomet. Generelt kan vi si at om vi tilnærmet f med et polynom av grad n for å finne fram til formelen, så bør vi bruke et Taylorpolynom av grad n når vi skal analysere feilen. (I tilfellet over der vi fant samme tilnærming for den deriverte med både første- og andregradspolynom, bør vi bruke Taylorpolynom av grad 2 siden dette er mest nøyaktig og derfor vil gi best feilestimat.) Under viser vi et løsningsforslag for oppgave 1b i ekstraoppgavene for uke 48 som illustrerer denne teknikken, så kan du selv prøve deg på 1a og 1c.

Oppgaver

Oppgave 1b. En midtpunkttilnærming er gitt ved

$$f'(a) \approx \delta_m(f,h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

Vis at

$$\left|f'(a) - \delta_m(f,h)\right| \le \frac{1}{6}h^2 \max_{x\in[a-h,a+h]} \left|f'''(x)\right|.$$

Løsning. Vi har

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2}f''(a) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1), \tag{1}$$

$$f(a-h) = f(a) - hf'(a) + \frac{h^2}{2}f''(a) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2), \tag{2}$$

der ξ_1 er et tall i intervallet $(a, a+h)$ og ξ_2 er et tall i intervallet $(a-h, a)$. Trekker vi den første av disse ligningene fra den andre får vi

$$f(a+h) - f(a-h) = 2hf'(a) + \frac{h^3}{6}\big(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\big).$$

Dette gir

$$\Big|\frac{f(a+h)-f(a)}{2h}-f'(a)\Big| = \frac{h^2}{12}\big|f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)\big| \le \frac{h^2}{6}\max_{x\in[a-h,a+h]}\big|f'''(x)\big|.$$

Denne symmetriske tilnærmingen til den deriverte gir altså større nøyaktighet (vi har faktoren h^2 i steden for h som vi hadde i (a)).

Oppgave 2. I denne oppgaven skal vi utlede noen numeriske integrasjonsformler med tilhørende feilestimater. Vi skal bare se på et enkelt delintervall og ikke summere opp bidragene slik som i trapesformelen og Simpsons formel.

b) Vi skal nå finne en tilnærming til integralet på intervallet $[a-h, a+h]$. Finn en α i intervallet $[0,1]$ slik at tilnærmingen

$$\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx \approx I_g = h\big(f(a-\alpha h)+f(a+\alpha h)\big)$$

er eksakt (gir feil 0) for funksjonene $f(x) = 1,\ x,\ x^2,\ x^3$.

Løsning. Integrasjonsformler som denne kalles Gausskvadratur, og er kjent for sin store nøyaktighet ved bruk av få punkter. Formelen vi ser på her er basert på to punkter, men en kan lage lignende formler basert på flere punkter.

Det kan være greit å skrive $I_g = I_g(f)$ når funksjonen vi skal integrere er f. Vi skal altså bestemme α slik at $I_g(f) = \int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx$ når $f(x) = 1,\ x,\ x^2,\ x^3$. La oss først prøve med $f(x) = 1$. Da er

$$\int_{a-h}^{a+h} 1\cdot dx = 2h, \quad I_g(1) = h\big(f(a-\alpha h)+f(a+\alpha h)\big) = 2h,$$

så tilnærmingen er uten videre eksakt i dette tilfellet.

Vi prøver deretter med $f(x) = x$. Da får vi

$$\int_{a-h}^{a+h} x\,dx = \Big[\frac{x^2}{2}\Big]_{a-h}^{a+h} = \frac{1}{2}\big((a+h)^2-(a-h)^2\big) = 2ah,$$
$$I_g(x) = h\big(f(a-\alpha h)+f(a+\alpha h)\big) = h(a-\alpha h + a + \alpha h) = 2ah,$$

så formelen I_g er eksakt også i dette tilfellet, uavhengig av hvordan α velges.

Neste tilfelle er $f(x) = x^2$. Da er

$$\int_{a-h}^{a+h} x^2\,dx = \Big[\frac{x^3}{3}\Big]_{a-h}^{a+h} = \frac{1}{3}\big((a+h)^3-(a-h)^3\big) = 2h(a^2+h^2/3),$$
$$I_g(x^2) = h\big((a-\alpha h)^2+(a+\alpha h)^2\big) = 2h(a^2+\alpha^2h^2).$$

Skal integrasjonsformelen være riktig i dette tilfellet må disse to uttrykkene være like, og dette ser vi holder om $\alpha^2 = 1/3$ eller

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Det siste tilfellet er $f(x) = x^3$. Da har vi

$$\int_{a-h}^{a+h} x^3\,dx = \Big[\frac{x^4}{4}\Big]_{a-h}^{a+h} = \frac{1}{4}\big((a+h)^4 - (a-h)^4\big) = 2ah(a^2+h^2),$$
$$I_g(x^3) = h\big((a-\alpha h)^3 + (a+\alpha h)^3\big) = 2ah(a^2+3\alpha^2h^2) = 2ah(a^2+h^2),$$

der den siste likheten holder siden $\alpha^2 = 1/3$. Med andre ord er den tilnærmede integrasjonsformelen I_g riktig også i dette tilfellet.

Legg merke til at dette betyr at formelen vil være eksakt for alle tredjegradspolynomer. For å se dette, observerer vi først at om c_1 og c_2 er to tall og f_1 og f_2 to funksjoner, så er alltid

$$\begin{aligned} I_g(c_1f_1 + c_2f_2) &= h\big(c_1f_1(a-\alpha h) + c_2f_2(a-\alpha h) \\ &\qquad + c_1f_1(a+\alpha h) + c_2f_2(a+\alpha h)\big) \\ &= c_1I_g(f_1) + c_2I_g(f_2). \end{aligned}$$

Denne egenskapen kalles *linearitet*, og integralet selv har den samme egenskapen (konstanter går utenfor integralet og integralet av en sum er summen av integralene).

Vi kan nå lett verifisere at vår tilnærming til integralet er eksakt for alle tredjegradspolynomer. For hvis $p(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3$, så er (vi betegner det eksakte integralet med $I(p)$)

$$I(p) = \int_{a-h}^{a+h} (c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3)\,dx =$$
$$c_0\int_{a-h}^{a+h} 1\,dx + c_1\int_{a-h}^{a+h} x\,dx + c_2\int_{a-h}^{a+h} x^2\,dx + c_3\int_{a-h}^{a+h} x^3\,dx.$$

Siden integralene på høyre side alle kan integreres eksakt med vår tilnærmingsformel har vi derfor

$$\begin{aligned} I(p) &= c_0I_g(1) + c_1I_g(x) + c_2I_g(x^2) + c_3I_g(x^3) \\ &= I_g(c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3) \\ &= I_g(p), \end{aligned}$$

der den andre likheten følger av lineariteten til I_g.

c) Finn feilestimat av tilsvarende type som i (a) for I_g.

Løsning. Et feilestimat som det i (a) må være på formen

$$\Big|\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx - I_g(f)\Big| \le K \max_{x\in[a-h,a+h]} \big|f^{(n)}(x)\big|$$

for en passende n og en eller annen konstant K som ikke avhenger av f. Siden formelen er eksakt for tredjegrads polynomer, vet vi at høyresiden skal være 0 for $f(x) = 1$, x, x^2 og x^3. Dermed ser vi at vi må ha $n \ge 4$. Hvis $n > 4$, så får vi at formelen også er eksakt for $f(x) = x^4$, og det har vi ingen grunn til å tro (i og for seg lett å sjekke). Altså må vi ha $n = 4$. Feilestimatet vårt skal se ut som

$$\Big|\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx - h\big(f(a-\alpha h) + f(a+\alpha h)\big)\Big| \le K \max_{x\in[a-h,a+h]} \big|f''''(x)\big|.$$

For å få til dette, erstatter vi alle de tre uttrykkene som involverer f med Taylorpolynomer av tredje grad med tilhørende restledd, utviklet om a,

$$\begin{aligned}
f(x) &= f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2}f''(a) + \frac{(x-a)^3}{6}f'''(a) \\
&\qquad + \frac{(x-a)^4}{24}f''''(\xi_1),\\
f(a-\alpha h) &= f(a) - \alpha h f'(a) + \frac{\alpha^2h^2}{2}f''(a) - \frac{\alpha^3h^3}{6}f'''(a) + \frac{\alpha^4h^4}{24}f''''(\xi_2),\\
f(a+\alpha h) &= f(a) + \alpha h f'(a) + \frac{\alpha^2h^2}{2}f''(a) + \frac{\alpha^3h^3}{6}f'''(a) + \frac{\alpha^4h^4}{24}f''''(\xi_3),
\end{aligned}$$

der ξ_1 varierer i intervallet $(a-h, a+h)$ når x varierer i $[a-h, a+h]$, mens $\xi_2 \in (a-h, a)$ og $\xi_3 \in (a, a+h)$. Nå vet vi jo at integrasjonsformelen vår er eksakt for alle tredjegradspolynomer, så i differansen $\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx - I_g(f)$ vil alt kansellere bortsett fra feilleddene. Vi får derfor

$$\begin{aligned}
&\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx - I_g(f)\\
&\qquad = \int_{a-h}^{a+h} \frac{(x-a)^4}{24}f''''(\xi_1)\,dx - h\frac{\alpha^4h^4}{24}\big(f''''(\xi_2) + f''''(\xi_3)\big).
\end{aligned}$$

Ved å ta maksimum av $\left|f''''(x)\right|$ og bruke trekantulikheten, får vi

$$\begin{aligned}
&\Big|\int_{a-h}^{a+h} f(x)\,dx - I_g(f)\Big| \\
&\qquad \le \Big(\int_{a-h}^{a+h} \frac{(x-a)^4}{24}\,dx + h\frac{\alpha^4 h^4}{24}2\Big) \max_{x\in[a-h,a+h]}\left|f'''(x)\right| \\
&\qquad = \Big(\frac{1}{24}\Big[\frac{(x-a)^5}{5}\Big]_{a-h}^{a+h} + \frac{h^5}{9\cdot 12}\Big) \max_{x\in[a-h,a+h]}\left|f'''(x)\right| \\
&\qquad = \Big(\frac{2h^5}{24\cdot 5} + \frac{h^5}{108}\Big) \max_{x\in[a-h,a+h]}\left|f'''(x)\right| \\
&\qquad = \frac{19h^5}{1080} \max_{x\in[a-h,a+h]}\left|f'''(x)\right|,
\end{aligned}$$

siden $\alpha^4 = 1/9$.

Dette er overaskende bra! Ved hjelp av to punkter får vi en tilnærmingsmetode der feilen går mot 0 med h^4. Dette karakteriserer Gausskvadratur - stor nøyaktighet med få punkter.