

## Indhold

<b>1</b>	<b>Modellering og computer fejl ved beregninger</b>	<b>2</b>
1.1	Matematisk modellering . . . . .	2
1.2	Approximationsfejl . . . . .	2
1.3	Hvordan repræsenteres tal i computeren . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Taylors Formel</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Nulpunktsbestemmelse</b>	<b>6</b>
3.1	Bisektionsmetoden . . . . .	6
3.1.1	Fejlvurdering af Bisektionsmetoden . . . . .	7
3.2	Funktionsiterationsmetoder . . . . .	7
3.2.1	Fejlvurdering af Funktionsiterationsmetoder . . . . .	8
3.3	Newtons Metode . . . . .	9
3.3.1	Fejlvurdering af Newtons metode . . . . .	9
3.4	Sekantmetoden . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Interpolation og Kvadraturregler</b>	<b>11</b>
4.1	Numerisk Differentiation . . . . .	12
4.1.1	Topunkts Differensformler . . . . .	13
4.1.2	Trepunkts Differensformler . . . . .	14
4.2	Numerisk Integration . . . . .	16
4.2.1	Interpolerende Kvadraturregler . . . . .	17
4.3	Sammensatte Kvadraturregler . . . . .	18
4.3.1	Uddybende for Trapezreglen . . . . .	18
4.4	Fejlanalyse . . . . .	19
4.5	Runga-Kutta Metode: RK4 . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Differentialligninger</b>	<b>23</b>
5.1	Eulers Metode . . . . .	23
5.2	Runge-Kutta Metoder . . . . .	24
5.3	Integration og Differentialligninger . . . . .	25

# 1 Modellering og computer fejl ved beregninger

## 1.1 Matematisk modellering

Medmindre den opstillede er meget simpel, så kan man ikke forvente at problemet har en pæn analytisk løsning -> der skal anvendes en numerisk tilgang, hvor der iterativt approksimeres en løsning (medfører yderligere fejl). Computeren har endelig hukommelse, hvilket skaber afrundings- og trunkeringsfejl.

## 1.2 Approksimationsfejl

Fejl ved approksimation:

Når vi skal bestemme præcisionen af en approksimeret  $x := \hat{x}$ , så bliver vi nødt til at kunne måle fejlen. Den absolute fejl måles ved  $|x - \hat{x}|$ , og den relative fejl måles ved  $\frac{|x - \hat{x}|}{|x|}$ . Hvilket kræver vi kender det vi forsøger at approksimere, hvilket er underligt og normalt ikke en mulighed.

**Absolute- og relative fejl:** Forskel på absolute fejl og relative fejl: Absolut fejl er ved værdier omkring 1, mens relative fejl anvendes ved store tal samt tal omkring 0.

**Trunkeringsfejl:** Når en uendelig række i en sum forkortes til en bestemt mængde af led, da er der lavet en trunkeringsfejl (afkørningsfejl).

**Ustabilitet og ill-conditioned problem:** En algoritme kaldes numerisk ustabil, hvis afrundingsfejl og trunkeringsfejl risikerer at medføre, at approksimationsfejlen vokser, så vi ikke nærmer os løsningen. Selvom en algoritme er numerisk stabil, så kan det underlæggende problem være sådan, at en lille afvigelse i algoritmens input medfører en stor afvigelse i algoritmens output. Et sådan problem kaldes *ill-conditioned*.

## 1.3 Hvordan repræsenteres tal i computeren

Antallet af betydende cifre har betydning for hvordan tallet skal repræsenteres. Der anvendes her symmetrisk afrunding eller chopping. Symmetrisk afrunding er det almindelige anvendte, mens chopping runder ned (chopper).

Computere anvender det binære talsystem. Tal repræsenteres med et fortegn, en eksponent og en "mantissa" (de betydende cifre). Helt generelt repræsenteres et positivt tal  $x$  ved en base  $\beta$  som

$$x = f\beta^E, \quad 1 \leq f < \beta,$$

hvorom  $f$  er mantissa'en for tallet. For det binære talsystem er dette

$$x = f \cdot 2^E, \quad 1 \leq f < 2.$$

## 2 Taylors Formel

En funktion kan approksimeres omkring et punkt ud fra et polynomium af funktionens afledede til det punkt. Denne approksimations nøjagtighed øges ved højere grad.

**Definition 2.1 (Taylor Polynomie)**

Antag, at  $f$  er  $N$  gange kontinuert differentiabel på et interval  $I = [a; b]$  og lad  $x_0 \in I$  være fast. Polynomiet i  $h$  (afhængig af  $h$  da udviklingspunktet er holdt fast) givet ved

$$P_{N-1}(x_0; h) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x_0)$$

kaldes Taylor polynomiet af grad  $N - 1$ , hvor  $h$  er afstanden væk fra udviklingspunktet  $x_0$ .

Udtrykket

$$R_N(x_0; h) = \frac{h^N}{(N-1)!} \int_0^1 f^{(N)}(x_0 + th)(1-t)^{N-1} dt \quad (1)$$

kaldes restleddet af orden  $N$ .

Restleddet af Taylors formel kan omskrives til

$$R_N(x_0; h) = \frac{h^N}{N!} f^{(N)}(x_0 + \theta h), \quad (2)$$

hvor  $0 < \theta < 1$  er et tal, der afhænger af både  $x_0$ ,  $h$  og  $f$ .

**Theorem 2.1 (Vurdering af Restleddet)**

Antag, at  $f$  er en  $N$  gange kontinuert differentiabel funktion på et interval  $I = (a; b)$ .

Antag, at der findes et  $M > 0$ , således at  $|f^{(N)}(x_0)| \leq M$  for alle  $x \in I$ . Så gælder

$$|R_N(x_0; h)| \leq \frac{|h|^N}{N!} M$$

for alle  $h$ , således at  $x + h \in I$ .

**Proof 2.1**

Resultatet følger umiddelbart fra ligning (2) og de opstillede antagelser. Sætningen bevises nu ud fra ligning (1).

$$\begin{aligned} |R_N(x_0; h)| &= \left| \frac{h^N}{(N-1)!} \int_0^1 f^{(N)}(x_0 + th)(1-t)^{N-1} dt \right| \\ &\leq \frac{|h|^N}{(N-1)!} \int_0^1 |f^{(N)}(x_0 + th)|(1-t)^{N-1} dt \\ &\leq \frac{|h|^N}{(N-1)!} M \int_0^1 (1-t)^{N-1} dt \\ &\leq \frac{|h|^N}{(N-1)!} M \left[ \frac{-1}{N} (1-t)^N \right]_{t=0}^{t=1} \\ &= \frac{|h|^N}{N!} M. \end{aligned}$$



Hvis  $|h| < 1$  går  $R_N \rightarrow 0$  når  $N \rightarrow \infty$ , hvilket betyder approksimationen nærmer sig den approksimerede funktion da restleddet går mod 0.

**Theorem 2.2 (Taylors Formel)**

Antag, at  $f$  er en  $N$  gange kontinuert differentiabel funktion på et interval  $I = (a; b)$  og lad  $x_0 \in I$  være fast. Lad desuden  $h$  være så lille, at  $x + h \in I$ . Så gælder Taylors formel

$$f(x_0 + h) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x_0) + \frac{h^N}{(N-1)!} \int_0^1 f^{(N)}(x_0 + th)(1-t)^{N-1} dt$$
$$f(x_0 + h) = P_{N-1}(x_0; h) + R_N(x_0; h),$$

hvor  $0 < \theta < 1$  er et tal, der afhænger af både  $x, h$  og  $f$ .

**Proof 2.2**

Beviset for Taylors formel består i gentagne gange delvis integration. Først observeres der at

$$\frac{d}{dt} f^{(k-1)}(x_0 + th) = h f^{(k)}(x_0 + th).$$

Dette resultat anvendes til gentagen delvis integration i restleddet. Givet er

$$\begin{aligned} & \frac{h^N}{(N-1)!} \int_0^1 f^{(N)}(x_0 + th)(1-t)^{N-1} dt \\ &= \left[ \frac{h^{N-1}}{(N-1)!} f^{(N-1)}(x_0 + th)(1-t)^{N-1} \right]_{t=0}^{t=1} \\ & - \frac{h^{N-1}}{(N-1)!} \int_0^1 f^{(N-1)}(x_0 + th)(1-t)^{N-2}(N-1)(-1) dt \\ &= -\frac{h^{N-1}}{(N-1)!} f^{(N-1)}(x_0) + \frac{h^{N-1}}{(N-2)!} \int_0^1 f^{(N-1)}(x_0 + th)(1-t)^{N-2} dt \\ &= -\frac{h^{N-1}}{(N-1)!} f^{(N-1)}(x_0) - \frac{h^{N-2}}{(N-2)!} f^{(N-2)}(x_0) \\ & + \frac{h^{N-2}}{(N-3)!} \int_0^1 f^{(N-2)}(x_0 + th)(1-t)^{N-3} dt \\ & \vdots \\ &= -\frac{h^{N-1}}{(N-1)!} f^{(N-1)}(x_0) - \frac{h^{N-2}}{(N-2)!} f^{(N-2)}(x_0) - \dots - \frac{h}{1!} f^{(1)}(x_0) \\ & + h \int_0^1 f^{(1)}(x_0 + th) dt. \end{aligned}$$

Det sidste trin er da at udregne det sidste integral. Det er givet ved

$$h \int_0^1 f^{(1)}(x_0 + th) dt = [f(x_0 + th)]_{t=0}^{t=1} = f(x_0 + h) - f(x_0).$$

Resultatet følger derefter, hvis man flytter alle led i det sidste udtryk undtagen  $f(x_0 + h)$  over på den anden side af det første lighedstegn i udregningen.



### 3 Nulpunktsbestemmelse

Der skal bestemmes nulpunkt:

$$f(x) = 0.$$

#### 3.1 Bisektionsmetoden

Til nulpunktsbestemmelse skal der anvendes en numerisk tilgang, hvor der anvendes iterative metoder, der konvergerer mod en løsning.

**Theorem 3.1 (Mellemværdisætningen)**

Antag at  $f$  er kontinuert på  $[a; b]$ . Hvis  $u$  er et tal mellem  $f(a)$  og  $f(b)$ , så eksisterer der et  $c \in [a; b]$ , sådan at  $f(c) = u$ .

Antag at  $f$  er kontinuert på et interval  $[a; b]$  og opfylder  $f(a)f(b) < 0$  (så er den ene funktionsværdi negativ og den anden positiv). Så er der ifølge mellemværdisætningen mindst én løsning til ligningen  $f(x) = 0$ .

Der sættes nu et midtpunkt  $m = \frac{a+b}{2}$  og sætter  $b = m$  hvis  $f(a)f(m) \leq 0$  og ellers  $a = m$ . Proceduren gentages indtil der er fundet et interval, hvor længden af intervallet  $|b - a|$  er mindre end en given tolerance  $\varepsilon$ .

**Theorem 3.2 (Konvergens af Bisektionsmetoden)**

Antag at  $f$  er kontinuert på  $[a; b]$ . Hvis  $f(a)f(b) < 0$ , så konvergerer bisektionsmetoden mod en løsning til ligningen  $f(x) = 0$ .

**Proof 3.1**

Lad  $\{a_n\}_{n \geq 0}$  og  $\{b_n\}_{n \geq 0}$  betegne følgerne af endepunkter, hvor  $a_0 := a$  og  $b_0 := b$ . Da gælder

$$a_{n+1} = \begin{cases} a_n & \text{hvis } f(a_n)f\left(\frac{a_n+b_n}{2}\right) \leq 0 \\ \frac{a_n+b_n}{2} & \text{hvis } f(a_n)f\left(\frac{a_n+b_n}{2}\right) > 0. \end{cases}$$

Dermed er  $\{a_n\}_{n \geq 0}$  en voksende følge. Derudover er  $\{a_n\}_{n \geq 0}$  begrænset oppefra af  $a_n < b_n \leq b_0$  for ethvert  $n$ . Følgen  $\{a_n\}_{n \geq 0}$  konvergerer dermed mod en grænse  $L$ . Følgen  $\{b_n\}_{n \geq 0}$  er faldende og konvergerer mod en grænse  $M$  da den er begrænset nedefra af  $a_0$ .

Bisektionsmetoden er konstrueret således at

$$b_n - a_n = \frac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \dots = \frac{b_0 - a_0}{2^n},$$

hvorfra det følger at  $b_n - a_n \rightarrow 0$  og dermed er  $L = M$ . Da  $f$  er kontinuert gælder  $f(a_n)f(b_n) \rightarrow (f(L))^2 \geq 0$ , men siden algoritmen er konstrueret således at  $f(a_n)f(b_n) \leq 0$  for ethvert  $n$  må  $f(L) = 0$ , som betyder at den grænse er en løsning til  $f(x) = 0$ . ■

### 3.1.1 Fejlvurdering af Bisektionsmetoden

Fejlen for den  $n$ 'te iteration defineres som

$$b_n - a_n = \frac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \dots = \frac{b_0 - a_0}{2^n}.$$

Fejlen halveres ved hver iteration, og bisektionsmetoden siges derfor at konvergere *lineært* (konvergerer langsomt sammenlignet med andre metoder).

### 3.2 Funktionsiterationsmetoder

Antag at  $f(x) = 0$  kan omskrives til en fixpunkt ligning

$$g(x) = x.$$

En løsning  $s$  til  $f(x) = 0$  vil dermed opfylde  $g(s) = s$ . Der gættes nu på en løsning  $x_0$  og iterativt definerer

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Hvis  $g$  er kontinuert, og følgen  $\{x_n\}_{n \geq 0}$  konvergerer, så vil elementerne i følgen nærme sig hinanden  $x_{n+1} \approx x_n$ . Det vil sige  $g(x_n) \approx x_n$ , hvilket betyder  $x_n$  udgør en approksimation til løsningen  $s$ .

#### Theorem 3.3 (Middelværdisætningen)

Antag at  $f$  er kontinuert på et interval  $I = [a; b]$  og differentiabel på  $(a; b)$ . Så eksisterer der et  $c \in I$ , sådan at

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

#### Theorem 3.4 (Konvergens af Funktionsiterationsmetoder)

Antag at  $g$  er differentiabel på intervallet  $[a; b]$  samt at

1.  $g([a; b]) \subseteq [a; b]$ .
2.  $|g'(x)| \leq K < 1 \quad \forall x \in [a; b]$ .

Så har ligningen  $g(x) = x$  en unik løsning i intervallet  $[a; b]$  og

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

konvergerer mod denne løsning for alle  $x_0 \in [a; b]$ . (Dette er en tilstrækkelig betingelse)

#### Proof 3.2

Da  $g(a), g(b) \in [a; b]$ , så gælder der

$$a - g(a) \leq 0 \leq b - g(b).$$

Ved at definere  $h(x) = x - g(x)$  kan det omskrives til

$$h(a) \leq 0 \leq h(b).$$

Da  $h$  er kontinuert, så eksisterer der ifølge mellemværdisætningen et  $s \in [a; b]$ , sådan at  $h(s) = 0$ . Det betyder at  $g(s) = s$ , og  $s$  er dermed en løsning.

Antag at  $t$  opfylder  $g(t) = t$  for  $t \in [a; b]$  og  $t \neq s$ . Ifølge middelværdisætningen gælder der

$$g'(\xi) = \frac{g(s) - g(t)}{s - t} = \frac{s - t}{s - t} = 1,$$

hvilket er modstrid, da  $s$  derved er  $t$ .

Konvergens følger også af middelværdisætningen:

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= |x_{n+1} - s| = |g(x_n) - s| = |x_n - s| |g'(\xi_n)| \\ &= e_n |g'(\xi_n)| \leq K e_n \leq \dots \leq K^{n+1} e_0 \rightarrow 0, \quad \xi_n \in [a; b]. \end{aligned}$$

■

### 3.2.1 Fejlsvurdering af Funktionsiterationsmetoder

Fejlen er givet af  $e_{n+1} = |x_{n+1} - s| = |g(x_n) - s|$ . Ved at lave en Taylorudvikling omkring  $s$  gælder

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= \left| g(s) + (x_n - s)g'(s) + \frac{(x_n - s)^2}{2}g''(s) + \dots - s \right| \\ &= \left| (x_n - s)g'(s) + \frac{(x_n - s)^2}{2}g''(s) + \dots \right| \\ &= \left| e_n g'(s) + \frac{e_n^2}{2}g''(s) + \dots \right|. \end{aligned}$$

Hvis  $e_n$  er tilstrækkelig lille, så kan vi lave følgende approksimation

$$e_{n+1} \approx |(x_n - s)g'(s)| = e_n |g'(s)|.$$

Metodens konvergens er afgjort af det første ikke-nul led i Taylorudviklingen. Dermed konvergerer iterationsmetoden som udgangspunkt lineært. Hvis  $g'(s) = 0$ , så er der hurtigere konvergens.



### 3.3 Newtons Metode

En første ordens Taylor approksimation anvendes til at bestemme funktionsværdierne for punkter nær nulpunktet  $f(s) = 0$ :

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0),$$

ud fra denne approksimation kan en ny første ordens Taylorudvikling findes, som nu er tættere på nulpunktet

$$\begin{aligned} f(x_0) + (x_1 - x_0)f'(x_0) &= 0 \\ \Updownarrow \\ x_1 &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}, \quad f'(x_0) \neq 0. \end{aligned}$$

Taylor approksimationen sættes lig 0 og der findes en ny  $x$  værdi.

Dette leder frem til **Newtons iterationsformel**:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Newtons metode kan anvendes til at bestemme kvadratrødder, givet  $c > 0$ , så kan  $\sqrt{c}$  bestemmes ved at løse ligningen

$$f(x) = x^2 - c = 0,$$

hvilket giver iterationsformlen

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_n - \frac{x_n^2}{2x_n} = \frac{x_n + c/x_n}{2}.$$

#### Theorem 3.5 (Konvergens for Newtons Metode)

Lad  $f$  være to gange differentiabel på  $[a; b]$  og opfylde

1.  $f(a)f(b) < 0$ .
2.  $f'$  har ingen nulpunkter på  $[a; b]$ . (Newtons metode er ikke defineret)
3.  $f''$  skifter ikke fortegn på  $[a; b]$ . (Krumning)
4.  $\left| \frac{f(a)}{f'(a)} \right|, \left| \frac{f(b)}{f'(b)} \right| < b - a$ .

Så har  $f(x) = 0$  en unik løsning  $s \in (a; b)$ , og Newtons metode konvergerer mod  $s$  for alle  $x_0 \in [a; b]$ . (Dette er et tilstrækkeligt krav)

#### 3.3.1 Fejlvurdering af Newtons metode

For funktionsiterationsmetoder er fejlen givet ved

$$\left| e_n g'(s) + \frac{e_n^2}{2} g''(s) + \dots \right|.$$

Fejlen ved Newtons metode bestemmes ved evaluering af de første afledede. For Newtons metode gælder  $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$  og dermed er

$$\begin{aligned} g'(x) &= 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} \\ &= \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}. \end{aligned}$$

Siden  $s$  er en løsning til  $f(x) = 0$  er  $f(s) = 0$  og  $g'(s) = 0$ , så fejlen kan approksimeres ved

$$e_{n+1} \approx \frac{e_n^2}{2} |g''(s)|.$$

Newton's metode har dermed kvadratisk konvergens.

### 3.4 Sekantmetoden

For at kunne anvende Newtons iterationsmetode skal funktionens afledede eksistere og være forskellig fra nul. Sekantmetoden er langsommere end Newtons metode, men kræver ikke at de afledede eksisterer.

Antag at  $f(s) = 0$  og betragt sekanten gennem to nabopunkter  $x_0$  og  $x_1$ . Hældning af sekanten er givet ved

$$a = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0},$$

og skæringen med y-aksen er givet ved

$$b = f(x_1) - ax_1 = f(x_1) - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} x_1.$$

Ligningen for sekanten er dermed

$$y = ax + b = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_1) + f(x_1).$$

Dette kan anvendes til at finde den næste approksimation ved at sætte højresiden lig nul.

$$\begin{aligned} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x_2 - x_1) + f(x_1) &= 0 \\ \Downarrow \\ x_2 &= x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1). \end{aligned}$$

Det leder frem til **sekantmetodens iterationsformel**:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n).$$

Sekantmetoden svarer til Newtons metode med approksimationen

$$f'(x_n) \approx \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

Sekantmetoden konvergerer superlineært:

$$e_{n+1} = |x_{n+1} - s| \approx C e_n^\alpha,$$

hvor  $C$  er en konstant og  $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.6$ . Sekantmetoden konvergerer altså hurtigere end bisektionsmetoden, men langsommere end Newtons metode.

## 4 Interpolation og Kvadraturregler

Givet et datasæt med  $N + 1$  datapunkter

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N), \quad x_j \neq x_k, j \neq k,$$

da skal der findes et interpolerende polynomium som opfylder

$$p(x_j) = y_j \quad \forall j = 0, 1, \dots, N.$$

Graden af  $p(x)$  skal holdes lav for at minimere kompleksiteten af approksimationen.

### Theorem 4.1 (Weierstrass' Approksimationssætning)

Lad  $f$  være en kontinuert funktion på  $[a; b]$ . Givet  $\varepsilon > 0$ , så eksisterer der et polynomium  $p_{N(\varepsilon)}$  af grad  $N(\varepsilon)$ , sådan at

$$|f(x) - p_{N(\varepsilon)}(x)| < \varepsilon \quad \forall x \in [a; b].$$

Sætningen er en væsentlig grund til at approksimere med polynomier, da det fungerer, og polynomier nemt kan integreres og differentieres. Polynomier kan effektivt evalueres med Horner's skema. Man kan direkte opskrive en følge af polynomier med den angivne konvergensgenskab. Disse polynomier kaldes Bernstein polynomier og er beregningsmæssigt tunge at bestemme for en vilkårlig funktion.

**Horner's skema:** Et polynomie kan omskrives som

$$\begin{aligned} p(x) &= a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 \\ p(x) &= a_0 + x(a_1 + x(\dots + x(a_{n-1} + x a_n))) \end{aligned}$$

En måde at bestemme det interpolerende polynomium er ved hjælp af Lagrange basis polynomier. Lagrange basis polynomier defineres som

$$l_k(x) = \frac{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x_k - x_j)}, \quad k = 0, 1, \dots, N.$$

Hvert polynomium  $l_k(x)$  har grad præcis  $N$  og opfylder

$$l_k(x_j) = \begin{cases} 1, & k = j \\ 0, & k \neq j \end{cases}.$$

Dette betyder at  $l_0(x_0) = 1$  og ses tydeligt af

$$\begin{aligned} l_k(x_k) &= \frac{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x_k - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x_k - x_j)} = 1 \\ l_k(x_j) &= \frac{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x_j - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq k}^N (x_k - x_j)} = 0. \end{aligned}$$

Lagrange interpolerende polynomium er da givet som

$$p(x) = \sum_{k=0}^N y_k l_k(x).$$

**Theorem 4.2 (Entydighed)**

Givet datapunkter

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N), \quad x_j \neq x_k, j \neq k,$$

så eksisterer der ét og kun ét polynomium  $p(x)$  af grad højst  $N$  med interpolationsegenskaben  $p(x_j) = y_j$  for alle  $j$ .

**Proof 4.1**

Grundet Weierstrass' sætning (Sætning 4.1) eksisterer der mindst ét polynomie. Under antagelse af at der eksisterer to polynomier  $p(x)$  og  $q(x)$  som opfylder interpolationsegenskaben

$$p(x_j) = y_j \quad \forall j = 0, 1, \dots, N.$$

Da er et nyt polynomie givet af differensen

$$h(x) = p(x) - q(x),$$

som er af grad højst  $N$ , men med  $N + 1$  nulpunkter da  $p(x_j) - q(x_j) = 0$  for alle  $j$ . Dette er en modstrid da et polynomie af grad  $N$  højst har  $N$  nulpunkter. ■

Interpolation er nyttigt til at modellere et givent datasæt. Vi kan med det interpolerende polynomium approksimere mellemliggende værdier og forudsige fremtidige værdier.

**Theorem 4.3 (Fejl ved Lagrange interpolation)**

Antag at  $f$  er  $N + 1$  gange kontinuert differentiabel på intervallet  $[a; b]$ , der indeholder  $x_0, x_1, \dots, x_N$ , hvor  $x_j \neq x_k$  for  $j \neq k$ . Lad  $p$  være Lagrange interpolation polynomiet baseret på

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_N, f(x_N)).$$

Da gælder for alle  $x \in [a; b]$  at

$$f(x) - p(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N)}{(N + 1)!} f^{(N+1)}(\xi),$$

hvor  $\xi \in [a; b]$ .

**4.1 Numerisk Differentiation**

Ideen er at bestemme det interpolerende polynomium gennem et par nabopunkter, og så lave approksimationen

$$f'(x_0) \approx p'(x_0).$$

#### 4.1.1 Topunkts Differensformler

Der kigges på topunkts differensformler, hvor man anvender et enkelt nabopunkt  $x_0 + h$  eller  $x_0 - h$ . Differentiationen findes med Lagranges interpolerende polynomium, hvilket med ét nabopunkt svarer til hældningen for en ret linje.

For de to punkter  $(x_0, y_0), (x_0 + h, y_1)$  er det Lagrange interpolations polynomie givet ved

$$p(x) = y_0 \frac{(x - x_0 - h)}{-h} + y_1 \frac{(x - x_0)}{h}$$

som ved differentiation giver

$$p'(x) = \frac{y_1 - y_0}{h}.$$

Den afledede er en konstant og er derved ikke afhængig af  $x$ . Dette betegnes første ordens fremadgående differens.

Første ordens tilbagegående differens er givet ved at anvende punkterne  $(x_0 - h, y_{-1}), (x_0, y_0)$ , hvor det tilhørende Lagrange interpolations polynomie og dens afledede er givet ved

$$p(x) = y_{-1} \frac{(x - x_0)}{-h} + y_0 \frac{(x - x_0 + h)}{h}$$
$$p'(x) = \frac{y_0 - y_{-1}}{h}.$$

Dette er også en konstant uafhængig af  $x$  og kaldes for en første ordens tilbagegående differens.

**Fejlanalyse** Fejlen for fremadgående differens er givet ved Taylors formel med restled:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0 + \theta h)$$

for et  $\theta \in (0, 1)$ . Heraf følger, at

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + \frac{h}{2}f''(x_0 + \theta h).$$

Et fejllid af formen  $\frac{h}{2}f''(x_0 + \theta h)$  opfylder

$$\left| \frac{h}{2}f''(x_0 + \theta h) \right| \leq M|h|$$

for små værdier af  $h$ . Dette skrives typisk som  $\frac{h}{2}f''(x_0 + \theta h) = \mathcal{O}(h)$  og resultatet skrives som

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \mathcal{O}(h).$$

For den tilbagegående differens er resultatet

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Et fejllid af formen  $\mathcal{O}(h)$  kaldes et første ordens fejllid, og approksimationsmetoden kaldes en første ordens metode.

### 4.1.2 Trepunkts Differensformler

Der undersøges de to nærmeste symmetriske nabopunkter og differentiationen approksimeres ud fra de to nabopunkter.

$$(x_0 - h, y_{-1}), (x_0, y_0), (x_0 + h, y_1).$$

Lagrange polynomiet er givet ved

$$\begin{aligned} p(x) &= y_{-1}l_{-1}(x) + y_0l_0(x) + y_1l_1(x) \\ &= y_{-1}\frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2h^2} + y_0\frac{(x-x_0+h)(x-x_0-h)}{-h^2} + y_1\frac{(x-x_0+h)(x-x_0)}{2h^2}. \end{aligned}$$

Den første afledede er

$$\begin{aligned} p'(x) &= \frac{1}{2} \left( \frac{y_{-1}(x-h-x_0)}{h^2} + \frac{y_{-1}(x-x_0)}{h^2} \right) \\ &\quad - \frac{y_0(x_0-h-x_0)}{h^2} - \frac{y_0(x+h-x_0)}{h^2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left( \frac{y_1(x-x_0)}{h^2} + \frac{y_1(x+h-x_0)}{h^2} \right), \end{aligned}$$

som forenkles ved indsættelse af  $x = x_0$ :

$$p'(x_0) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}.$$

Den anden afledede af  $p(x)$  er

$$p''(x_0) = \frac{y_1 - 2y_0 + y_{-1}}{h^2}.$$

Dermed er approksimationerne til den første og anden afledede i  $x_0$  baseret på datapunkterne  $(x_0 - h, y_{-1}), (x_0, y_0), (x_0 + h, y_1)$ .

Ved antagelse af, at der er en underliggende funktion  $y = f(x)$  så kan formlerne skrives på følgende måde.

Den første afledte er givet ved

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

Den anden afledte er givet ved

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}.$$

Der kan også undersøges to assymetriske nabopunkter:

$$(x_0, y_0), (x_0 + h, y_1), (x_0 + 2h, y_2).$$

Udregningerne for symmetriske trepunkts formler kan gentages, hvilket vil give følgende for den første afledede:

$$p'(x_0) = \frac{-y_2 + 4y_1 - 3y_0}{2h}. \quad (3)$$

Den anden afledede er

$$p''(x_0) = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2}. \quad (4)$$

Ved at vælge de to punkte til venstre for  $x_0$ :

$$(x_0 - 2h, y_{-2}), (x_0 - h, y_{-1}), (x_0, y_0),$$

opnås de følgende resultater for den første og anden afledede.

$$p'(x_0) = \frac{3y_0 - 4y_{-1} + y_{-2}}{2h}$$
$$p''(x_0) = \frac{y_0 - 2y_{-1} + y_{-2}}{h^2}.$$

Ved antagelse af, at der er en underliggende funktion  $y = f(x)$  så kan formlerne skrives på følgende måde.

$$f'(x_0) = \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h}$$
$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^2}$$

Oversigt over trepunktsformlerne:

De afledte for fremadgående assymetriske nabopunkter er givet ved

$$f'(x_0) = \frac{-f(x_0 + 2h) + 4f(x_0 + h) - 3f(x_0)}{2h}$$
$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) - f(x_0)}{h^2}.$$

De afledte for tilbagegående assymetriske nabopunkter er givet ved

$$f'(x_0) = \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h}$$
$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^2}.$$

Bemærk at det kun er de dobbelt afledte der er anden ordens metoder, mens de første ordens afledte er første ordens metoder.

**Fejlanalyse** Fejlen for trepunktsformlerne er givet ved Taylors formel med restled:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x_0 + \theta_1 h),$$
$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x_0 - \theta_2 h),$$

hvor  $0 < \theta_j < 1$ ,  $j = 1, 2$ . Ved indsættelse i ligning (3) (symmetrisk første afledede) følger

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = f'(x_0) + \frac{h^2}{12}(f^{(3)}(x_0 + \theta_1 h) + f^{(3)}(x_0 - \theta_2 h)).$$

Dette kan skrives som

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2),$$

hvor fejleddet  $\mathcal{O}(h^2) = \frac{h^2}{12} (f^{(3)}(x_0 + \theta_1 h) + f^{(3)}(x_0 - \theta_2 h))$ . Denne metode kaldes for en anden ordens metode.

Ved at bruge en fjerde ordens Taylor udvikling så gælder der at resultatet for ligning (4) er

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2),$$

som dermed også er en anden ordens metode.

Dette betyder at fejlen minimeres ved lave  $h$  værdier, antaget at den tredje afledte opfører sig "pænt".

## 4.2 Numerisk Integration

Givet en kontinuert funktion  $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$  skal vi approksimere

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

Intervallat  $[a; b]$  inddeles i  $N + 1$  ækvivalente punkter og det Lagrange interpolerende polynomium bestemmes ved

$$p(x) = \sum_{k=0}^N f(x_k) l_k(x).$$

Der udføres herefter approksimationen

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx,$$

hvilket kaldes en interpolerende kvadraturregel.

Dette udledes for ét punkt  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ . Det interpolerende polynomium er  $p(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$  og den interpolerende kvadraturregel er

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x) dx &= \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right) dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right) \int_a^b 1 dx \\ &= f\left(\frac{a+b}{2}\right) [x]_a^b = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right). \end{aligned}$$

Dette kaldes midpunktsreglen, som betyder at

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

Helt generelt for kvadraturreglen gælder:

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x) dx &= \int_a^b \sum_{k=0}^N f(x_k) l_k(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^N f(x_k) \int_a^b l_k(x) dx = \sum_{k=0}^N c_k f(x_k), \end{aligned}$$

hvor  $c_k = \int_a^b l_k(x) dx$ . Koefficienterne  $c_k$  kaldes for vægte.

For midtpunktsreglen er vægten givet ved  $c_0 = (b-a) = 2\tilde{h}$ , hvor  $\tilde{h} = \frac{b-a}{2}$  er skridtlængden.



### 4.2.1 Interpolerende Kvadraturregler

For en funktion  $f(x)$  skal integralet findes, men dette kan ikke gøres analytisk. Der findes nogen datapunkter, for hvilke det interpolerende polynomium  $p_N(x)$  opfylder

$$p_N(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, 2, \dots, N.$$

Der er  $N + 1$  datapunkter. Der udføres her approksimationen

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \int_a^b p_N(x) \, dx.$$

**Midtpunktsreglen** Når  $N = 0$  er der ét datapunkt og midtpunktssætningen anvendes, hvor  $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ ,

$$M = (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right).$$

**Trapezreglen** Når  $N = 1$  er der to datapunkter,  $(a, f(a))$  og  $(b, f(b))$  og det interpolerende polynomium har grad 1, altså en ret linje,

$$T = \frac{b - a}{2}(f(a) + f(b))$$

**Simpsonsreglen** Når  $N = 2$  er der tre datapunkter  $(a, f(a))$ ,  $(\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$  og  $(b, f(b))$  og det interpolerende polynomium har grad 2, altså et andengrads polynomium,

$$S = \frac{b - a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f(b)\right).$$

Det er de tre kvadraturregler der skal kendes samt deres grafer.

**Fejlanalyse** Midtpunktsreglen:

$$(M) \int_a^b f(x) \, dx - (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right) = \frac{(b - a)^3}{24}f^{(2)}(\xi_M) \quad \xi_M \in [a; b].$$

Trapezreglen:

$$(T) \int_a^b f(x) \, dx - \frac{b - a}{2}(f(a) + f(b)) = -\frac{(b - a)^3}{12}f^{(2)}(\xi_T) \quad \xi_T \in [a; b].$$

Simpsonsregel:

$$(S) \int_a^b f(x) \, dx - \frac{b - a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f(b)\right) = -\frac{(b - a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_S) \quad \xi_S \in [a; b].$$

### 4.3 Sammensatte Kvadraturregler

Runge effekten er problematisk når man skal bestemme det interpolerende polynomium når der er mange datapunkter. Af den årsag skal der anvendes sammensat kvadratur.

Et integrale

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

skal approximeres med sammensatte kvadraturregler. Hertil har vi midtpunktsreglen med  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ ,  $h = \frac{b-a}{N}$ , hvor integralet for et interval er  $(b-a)f\left(\frac{b+a}{2}\right)$ . Den sammensatte kvadraturregel  $M_N$  er da:

$$M_N = h \sum_{j=0}^{N-1} f\left(x_0 + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right).$$

Der er også trapezreglen med integralet for et interval  $\frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$ . Det sammensatte kvadraturregel er

$$T_N = \frac{h}{2} \left( f(x_0) + 2 \left( \sum_{j=1}^{N-1} f(x_0 + hj) \right) + f(x_N) \right).$$

Til sidst er der simpsonsregel med den sammensatte kvadraturregel givet ved

$$S_N = \frac{h}{6} \sum_{j=0}^{N-1} \left( f(x_j) + 4f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right) + f(x_{j+1}) \right).$$

Bemærk at  $N$  er antallet af delintervaller.

#### 4.3.1 Uddybende for Trapezreglen

Der anvendes et interval  $I = [a; b]$  med  $N + 1$  ækvidistante punkter, hvilket anvender skridtlængden  $h = x_{j+1} - x_j = \frac{b-a}{N}$ . Da er trapezreglen angivet som

$$T_N = \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + \frac{h}{2}(f(x_1) + f(x_2)) + \dots + \frac{h}{2}(f(x_{N-1}) + f(x_N)), \quad x_0, x_1, x_2, \dots, x_N \in I.$$

Der er en fælles faktor

$$T_N = \frac{h}{2} (f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)),$$

som skrives kort som

$$T_N = \frac{h}{2} \left( f(x_0) + 2 \left( \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right) + f(x_N) \right).$$

#### Fejlanalyse af Trapezreglen

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx - T_N &= -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_0) - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_1) - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_2) - \dots - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_{N-1}) \\ &= -\frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_j). \end{aligned}$$

Påstand: Der findes et  $\xi \in [a; b]$ , så at

$$\sum_{j=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_j) = N f^{(2)}(\xi).$$

**Proof 4.2**

$f^{(2)}(x)$  er kontinuert på  $I = [a; b]$  (antagelse). Der findes  $\alpha$  og  $\beta$  således  $\alpha \leq f^{(2)}(x) \leq \beta$  for  $x \in I$ .

$$\alpha \leq \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_j) \leq \beta,$$

så ifølge sætningen om mellemværdien af kontinuerte funktioner, findes der et  $\xi \in I$ , så  $f^{(2)}(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_j)$ .

#### 4.4 Fejlanalyse

Fejlvurderingerne er givet ved

$$\begin{aligned} I - M_N &= \frac{(b-a)h^2}{24} f^{(2)}(\xi_M) \\ I - T_N &= -\frac{(b-a)h^2}{12} f^{(2)}(\xi_T) \\ I - S_N &= -\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{(4)}(\xi_S). \end{aligned}$$

Vurdering af nødvendigt antal  $N$  for at få  $|I - M_N| < \varepsilon$  for  $\varepsilon$  værende tolerancen, bestemmes ved

$$|I - M_N| \leq \frac{(b-a)h^2}{24} |f^{(2)}(\xi_M)|.$$

Antag at vi kan finde  $M_2$ , så  $|f^{(2)}(\xi)| \leq M_2$  for alle  $\xi \in [a; b]$ . Bestem  $N$ , så at

$$\begin{aligned} \frac{(b-a)^3 M_2}{24N^2} &< \varepsilon \\ N^2 &> \frac{(b-a)^3 M_2}{24\varepsilon} \\ N &> \sqrt{\frac{(b-a)^3 M_2}{24\varepsilon}} \end{aligned}$$

**Example 4.1**

Bestem integralet af  $f(x) = \frac{x}{1+x^2}$  i intervallet  $I = [1; 2]$ .

$$\int_1^2 \frac{x}{1+x^2} dx = \left[ \frac{1}{2} \ln(1+x^2) \right]_1^2 = \ln\left(\sqrt{\frac{5}{2}}\right).$$

Det integrale skal approksimeres numerisk. Funktionens afledede er da  $f'(x) = \frac{1}{1+x^2} + x(-1)\frac{2x}{(1+x^2)^2} = \frac{1-x^2}{(1+x^2)^2}$ . Den anden afledede er

$$f^{(2)}(x) = \frac{-2x}{(1+x^2)^2} + (1-x^2)(-2)\frac{2x}{(1+x^2)^3} = \frac{(-2x(1+x^2) - 4(x-x^3))}{(1+x^2)^3} = \frac{-6x+2x^3}{(1+x^2)^3}.$$

Der skal bestemmes en  $\xi$ :

$$|f^{(2)}(x)| \leq \frac{6x+2x^3}{(1+x^2)^3},$$

som skal vurderes for  $x \in [1; 2]$ :

$$|f^{(2)}(x)| \leq \frac{6x+2x^3}{(1+x^2)^3} \leq \frac{28}{8} = \frac{7}{2}.$$

Tolerancen vælges til at være  $\varepsilon = 10^{-4}$  og vi husker på  $a = 1$ ,  $b = 2$ ,  $b - a = 1$ ,  $N$  kan da bestemmes

$$N > \sqrt{\frac{7}{2 \cdot 24 \cdot 10^{-4}}} = 10^2 \sqrt{\frac{7}{48}} \approx 54.$$

Når simpsonsregel anvendes til at approksimere et integrale  $\int_a^b f(x) dx$  med en tolerance  $\varepsilon > 0$ , gælder  $|S_{2N} - S_N| < \varepsilon$ .

### Proof 4.3

Sammenlign  $S_N$  og  $S_{2N}$ . Antallet af delintervaller er fordoblet og dvs. at ifølge fejlvurderingen er fejlen blevet en  $\frac{1}{16}$  mindre. Derfor er det rimeligt at sige at de to fejl  $I - S_N$  og  $16(I - S_{2N})$  nogenlunde er det samme.

$$\begin{aligned} I - S_N &\approx 16(I - S_{2N}) = 15(I - S_{2N}) + (I - S_{2N}) \\ S_{2N} - S_N &\approx 15(I - S_{2N}) \end{aligned}$$

hvis  $|S_{2N} - S_N| \leq \varepsilon$  så er  $|I - S_{2N}| \simeq \frac{1}{15}\varepsilon$ :

$$I \approx \frac{16S_{2N} - S_N}{15} = Q_N.$$

### Udregning:

$$S_2, \quad S_1, \quad \tilde{h} = \frac{b-a}{4}, h = \frac{b-a}{2N} \quad (\text{ændrer lidt på kvadraturreglerne})$$

Der anvendes Simpsons kvadraturregel på et interval med to delintervaller ( $S_1$ ) og på et interval med fire delintervaller ( $S_2$ ), hvortil  $x_j = x_0 + hj$ .

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{4\tilde{h}}{6} (f(x_0) + 4f(x_2) + f(x_4)) \\ S_2 &= \frac{2\tilde{h}}{6} (f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) \end{aligned}$$

Nu vil intervallet præsenteret før, beregnes.

$$\begin{aligned} 16S_2 - S_1 &= \frac{2\tilde{h}}{3} (8f(x_0) + 32f(x_1) + 16f(x_2) + 32f(x_3) + 8f(x_4)) \\ &\quad - \frac{2\tilde{h}}{3} (f(x_0) + 4f(x_2) + f(x_4)) \\ &= \frac{2\tilde{h}}{3} (7f(x_0) + 32f(x_1) + 12(f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4))) \\ Q_N &= \frac{2\tilde{h}}{45} (7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)). \end{aligned}$$

Bemærk at dette er en fempunkts kvadraturregel. Fejlvurderingen på denne kvadraturregel er

$$I - Q_N = c\tilde{h}f^{(6)}(\xi_Q),$$

og er derved en sjette ordens metode. Ved at gøre dette systematisk kaldes det Romberg integration.

## 4.5 Runge-Kutta Metode: RK4

RK4:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4) \\y' &= f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \\k_1 &= f(x_n, y_n) \\k_2 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \\k_3 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2\right) \\k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3).\end{aligned}$$

Der anvendes en vægtet hældning af  $k_1, k_2, k_3$  og  $k_4$  til at beregne funktionsværdien af næste punkt. Hældningen er derved  $\frac{1}{6}(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4)$ .

Den lokale trunkeringsfejl opstår grundet approximationen og er  $\mathcal{O}(h^5)$  mens den globale trunkeringsfejl er  $\mathcal{O}(h^4)$  og det er derved en fjerde ordens metode.

### Example 4.2

Vi har to differentialligninger

$$\begin{aligned}y_1' &= f_1(x, y_1, y_2), \quad y_1(x_0) = y_{1,0} \\y_2' &= f_2(x, y_1, y_2), \quad y_2(x_0) = y_{2,0} \\ \vec{y} &= \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \quad \vec{y}(x_0) = \vec{y}_0 = \begin{bmatrix} y_{1,0} \\ y_{2,0} \end{bmatrix} \\ \vec{f}(x, \vec{y}) &= \begin{bmatrix} f_1(x, y_1, y_2) \\ f_2(x, y_1, y_2) \end{bmatrix} \\ \vec{y}' &= \vec{f}(x, y) \\ \vec{y}(x_0) &= \vec{y}_0\end{aligned}$$

RK4 algoritmen er vektoriseret.

Løsning visualiseres som en kurve i  $y_1, y_2$ -planen.

$$x \rightarrow (y_1(x), y_2(x))$$

Variablen  $x$  svarer til tiden  $t$  og derved beskrives hastigheden af dette system.

Et autonomt (tidsinvariant) system af differentialligninger opstår ikke eksplicit på højresiden:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ x_1' &= ax_1 + bx_2 \\ x_2' &= cx_1 + dx_2\end{aligned}$$

## 5 Differentialligninger

Differentialligninger kan skrives som

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y),$$

og beskriver den afledede af en ukendt funktion. Ofte er der givet et begyndelseskriterie

$$y(x_0) = y_0.$$

Typisk pålægges funktionen den betingelse at være kontinuert og have partielt afledede for at sikre eksistens.

Der kigges på differentialligningen

$$\frac{dy}{dx} = F(x)G(y),$$

hvor vi isolerer  $y$  på den ene side og  $x$  på den anden:

$$\begin{aligned}\frac{1}{G(y)} dy &= F(x) dx \\ \int G(y) dy &= \int F(x) dx + c.\end{aligned}$$

Eksempel:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dx} &= xy \\ \frac{1}{y} dy &= x dx \\ \ln(y) &= \frac{1}{2}x^2 + \tilde{c} \\ y &= e^{\frac{1}{2}x^2 + \tilde{c}} = e^{\tilde{c}} e^{\frac{1}{2}x^2} = ce^{\frac{1}{2}x^2}.\end{aligned}$$

### 5.1 Eulers Metode

Vi vil gerne finde løsningen et skridtlængde  $h$  længere fremme og vil gerne kende

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{1}{2}h^2y''(x_0) + \dots$$

givet af en Taylor udvikling. Det kan approksimeres til

$$\begin{aligned}y(x_0 + h) &\approx y(x_0) + hy'(x_0) = y_0 + hf(x_0, y_0) \\ y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0).\end{aligned}$$

Det kan gøres iterativt og giver derved formlerne

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + h \\ y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n).\end{aligned}$$

Dette er en simpel og ineffektiv metode. Det skaber typisk lokale trunkeringsfejl og efter  $n$  iterationer er der akkumuleret  $n$  fejl. Den globale fejl svarer til  $Nh^2 = (b - a)h$  med  $h = \frac{b-a}{N}$ , hvor  $a, b$  svarer til interval endepunkterne  $[a; b]$  og  $N$  er antallet af punkter i intervallet. Forveksel ikke trunkeringsfejl med afrundingsfejl. Metoden konvergerer mod den sande løsning når  $N \rightarrow \infty$ .

## 5.2 Runge-Kutta Metoder

Givet er en differentialligning

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \\ y(x_0 + h) &= y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{1}{2}h^2y''(x_0) + \mathcal{O}(h^3)\end{aligned}$$

Vi vælger  $\alpha \in [0; 1]$  og kan derved approksimere den dobbelt afledede:

$$y''(x_0) \approx \frac{y'(x_0 + \alpha h) - y'(x_0)}{\alpha h}.$$

Herved kan vi forsøge at opstille et udtryk for  $y$ :

$$y(x_0 + h) = y_0 + hf(x_0, y_0) + ? \quad (5)$$

For at løse det anvender vi

$$\begin{aligned}y'(x_0) &= f(x_0, y_0) = k_1 \text{ (bemærk at der er forskel på konstanterne } k) \\ y'(x_0 + \alpha h) &= f(x_0 + \alpha h, y(x_0 + \alpha h)),\end{aligned}$$

så vi approksimerer  $y(x_0 + \alpha h) \approx y_0 + \alpha h k_1$  og danner en ny konstant

$$\begin{aligned}f(x_0 + \alpha h, y_0 + \alpha h k_1) &= k_2 \\ y''(x_0) &\approx \frac{k_2 - k_1}{\alpha h}.\end{aligned}$$

Nu kan differentialligningen fra ligning (5) bestemmes som:

$$y_1 = y_0 + k_1 + \frac{1}{2}h^2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha h} = y_0 + h \left( k_1 \left( 1 - \frac{1}{2\alpha} \right) + \frac{1}{2\alpha} k_2 \right).$$

Hvilket er en god metode.

$\alpha = \frac{1}{2}$  kaldes for korrigeret Eulers metode, da nogle led går ud og den da vil være

$$y_{n+1} = y_n + hk_2, \quad k_2 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}hk_1\right).$$

$\alpha = 1$  kaldes for modificeret Eulers metode som giver

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2), \quad k_2 = f(x_0 + h, y_0 + hk_1).$$

$\alpha = \frac{2}{3}$  kaldes for Heuns metode og giver

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{4}h(k_1 + 3k_2), \quad k_2 = f\left(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + \frac{2}{3}hk_1\right).$$

Den lokale fejl er  $h^3$  men den globale trunkeeringsfejl er  $h^2$  og de er derved en anden ordens metode.

Anden ordens runge-kutta metoder er baseret på at lave anden ordens trunkeeret Taylor approksimationer.



### 5.3 Integration og Differentialligninger

$$y' = g(x)$$

Hvor højresiden ikke afhænger af  $y$  ved vi at

$$y_1 = y_0 + \int_{x_0}^{x_0+h} g(s) \, ds \approx y_0 + hg\left(x_0 + \frac{1}{2}h\right) \text{ Midtpunktsreglen}$$

som svarer til korrigeret Eulers metode. Korrigeret Eulers metode er en generaliseret version af midtpunktsreglen.

Hvis Trapezreglen anvendes får man

$$y_1 = y_0 + \int_{x_0}^{x_0+h} g(s) \, ds \approx y_0 + h \frac{g(x_0 + h) + g(x_0)}{2}$$

som er det samme som modificeret Eulers metode. Modificeret Euler er da en generaliseret version af trapezreglen.

En højere ordens Runge-Kutta metode kaldes **RK4** og er givet ved

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4) \end{aligned}$$

hvor konstanterne udover  $k_1$  betyder noget andet end de tidligere:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_0, y_0) \\ k_2 &= f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}hk_2\right) \\ k_4 &= f(x_0 + h, y_0 + hk_3). \end{aligned}$$

RK4 er en fjerde ordens metode og er en generaliseret version af Simpsonsreglen.