

UPPSALA UNIVERSITET

FÖRELÄSNINGSANTECKNINGAR VT22

# Beräkningsvetenskap

*Rami Abou Zahra*

## CONTENTS

1. Interpolation	2
1.1. Interpolation med polynom	2
1.2. Numerisk integration	3
1.3. Numerisk kvadratur	3
1.4. Newton-Coates kvadratur	3
1.5. Sammansatta trapetsregeln	4
2. Föreläsning	6
2.1. Trapetsmetoden i python	6
2.2. Simpsons i python	6
2.3. Observation från pythonexempel	6
2.4. Nogrannhetsordning	7
2.5. Feluppskattning	7
2.6. Richardsson-extrapolation	8
3. Förtydligande/Från boken	9
3.1. Integraler	9
3.2. Riemann integralen	9
3.3. Relationen mellan Simpsons och Trapetsapprox.	9
4. Föreläsning	10
4.1. Numerisk integration med scipy	10
4.2. Vad menas med absolut resp. relativt fel?	10
4.3. Funktionsfelet	10
4.4. Nogrannhet - Sammanfattning	10
4.5. Gammal tentauppgift (2009-12-21)	11

## 1. INTERPOLATION

Givet  $n$  punkter  $(x_i, y_i) \in \mathbb{N}$  där alla  $x_i$  är olika. Då vill vi anpassa en funktion  $p(x)$  till detta data så att den går igenom alla dessa punkter, det vill säga  $p(x_i) = y_i \forall i \in \mathbb{N}$ . Detta kallas för interpolation.

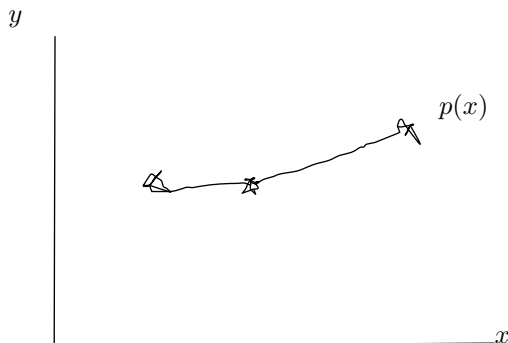


FIGURE 1. Interpolation idé

Vanliga användningsområden kan vara:

- Att läsa mellan raderna i en tabell, även om vi bara har data för  $x = 3$  och  $x = 2$  så kan vi finna värden för  $x = 2.5$
- Anpassa matematisk modell till data.
- Approximera en "svår" funktion, ex. Weierstrass, med en enklare funktion.

## 1.1. Interpolation med polynom.

- Interpolera alla datapunkter med ett enda polynom:
  - $p_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} a_i x_i$  där  $n - 1$  är polynomgraden

I allmänhet krävs det polynom av grad  $n - 1$  för att interpolera  $n$  punkter.

Vi sätter in de punkter vi vill lösa i polynomet och löser för koefficienterna. Vi kommer då få ett ekvationssystem.

Ansats med gradtal mindre än  $n - 1$  ger generellt ingen interpolationsslösning.

Vid ansats med gradtal högre än  $n - 1$  så finns ingen unik lösning.

Läs gärna vidare om Newton interpolation.

- Styckvis polynominterpolation:
  - Anpassar med polynom av låg grad (exvis grad 1 så att den blir linjär) på varje delintervall (mellan varje punkt).
  - $p_k^j(x)$  för  $x \in [x_j, x_{j+1}]$  så att  $j = 1, \dots, n - 1$  och att punkterna är ordnade så att  $x_j < x_{j+1}$ . Vanligtvis är  $k = 1$  (graden är 1, styckvis linjär) eller  $k = 3$  (styckvis kubisk).
  - Vid kubisk interpolation får vi 2 styckna "frihetsgrader", det vill säga  $x, x^2$ . Dessa brukar kombineras med en metod som kallas för *spline* för att ge en kontinuerlig första och andra derivata i hela interpolationen så att kurvan blir mer *smooth*.
  - En annan variant kallas för *pchip* som enbart ger en kontinuerlig första-deriv. Den är monoton mellan datapunkter.

## 1.2. Numerisk integration.

Problemet som vi vil lösa är att vi förstås vill beräkna integralen av en given funktion:

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

Speciellt när det inte går att analytiskt integrera funktionen så blir det som intressantast, eller att det är väldigt svårt, eller då  $f$ -värden endast finns som mätvärden i vissa punkter.

## 1.3. Numerisk kvadratur.

$$I \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

Där  $w_i$  är "vikter". Då är frågan hur man skall bestämma dessa vikter och vilka punkter  $x_i$  som är relevanta att ta med.

Vi gör detta baserat på de interpolerade polynomen och polynom kan vi integrera analytiskt.

## 1.4. Newton-Coates kvadratur.

Vi väljer  $x_1, x_2, \dots, x_n$  värden som ekvi-distanta punkter. Sedan approximeras integralen  $\int_a^b f(x)dx$  av  $\int_a^b p(x)dx$  där  $p(x)$  är polynomet av grad  $n - 1$  som interpolerar alla punkter  $(x_i, f(x_i)), i = 1, \dots, n$

Exempel: När jag bara har två punkter ( $n = 2$ ) kallas det för *trapetsregeln*:

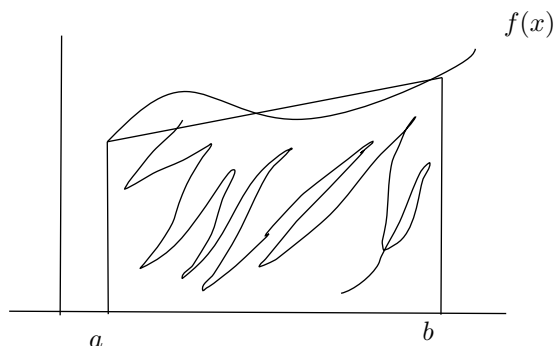


FIGURE 2. Trapetsregeln

En bättre approximering än att använda en första-gradare är simpsons formel ( $n = 3$ ):

Det som kanske verkar rimligt kanske är att ta högre grad, men det som händer är att man får starka oscillationer eftersom ju högre grad desto fler "kupor". Istället tar vi mindre intervall och kör bitvis linjär/simpsons istället.

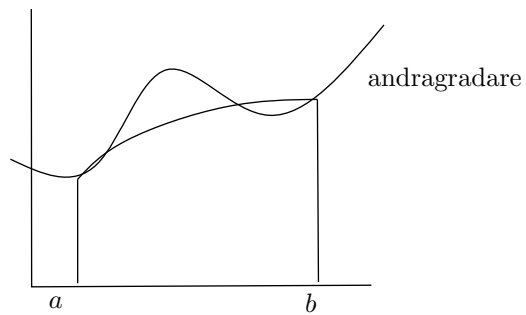


FIGURE 3. Simpsons



FIGURE 4. Exempel: 4 intervall

### 1.5. Sammansatta trapetsregeln.

Generella trapetsformeln:

$$x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{n}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx T(h) = h \left( \sum_{i=0}^n f(x_i) - \frac{f(a) + f(b)}{2} \right)$$

Simpsons formel:

$$x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{n}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx S(h) = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n))$$

$n$  måste vara jämn.

## 2. FÖRELÄSNING

Idag skall vi:

- Implementera trapetsmetoden i python
- Implementera simpsons metod i python
- Hur beror felet på  $h$  ( $E(h) = I - T(h)$ )?
- Är det skillnad p trapets eller simpsons?
- Nogrannhetsordning
- Resultat från anal.
- Konvergensstudie
- Feluppskattning i praktiken.
- Richardsson-extrapolation (ett sätt att förbättra nogrannheten på numeriska kvadraturen)

## 2.1. Trapetsmetoden i python.

```
import numpy as np

#function = funktionen vi vill integrera
#a = undre integral gräns
#b = övre
#n = antal delintervall

def trapets(func, a, b, n):

    h = (b-a)/n
    x = np.linspace(a, b, n+1) #Gå från a->b med n+1 punkter
    fx = func(x)
    T = h*(np.sum(fx)-(fx[0]+fx[-1])/2)

    return T
```

## 2.2. Simpsons i python.

```
import numpy as np

#function = funktionen vi vill integrera
#a = undre integral gräns
#b = övre
#n = antal delintervall

def simpsons(func, a, b, n):
    h = (b-a)/n
    x = np.linspace(a,b,n+1)
    fx = func(x)
    S = (h/3)*(fx[0]+4*np.sum(fx[1:-1:2])+2*np.sum(fx[2:-2:2])+fx[-1])

    return S
```

## 2.3. Observation från pythonexempel.

Vi noterade att i början var trapetsmetoden bättre (mindre fel) än simpsons, men att med finare delintervall så blev simpsons betydligt bättre. Senare tester verifierade följande:

- Trapetsmetoden:
  - Minskning av  $h$  med faktor 2  $\Rightarrow$  Minskning av felet med faktor 4
- Simpsons:
  - Minskning av  $h$  med faktor 2  $\Rightarrow$  Minskning av fel med faktor 16

## 2.4. Nogrannhetsordning.

Antag att felet beter sig som  $Ch^p$  där  $C$  är en konstant,  $h$  är steglängden,  $p$  är metodens nogrannhetsordning.

Låt  $E(h)$  beteckna felet med steglängd  $h$ . Då har vi:

$$\begin{aligned} E(h) &= Ch^p \\ E(2h) &= C2^p h^p \\ \frac{E(2h)}{E(h)} &= \frac{2^p Ch^p}{Ch^p} = 2^p \\ p &= \log_2 \frac{E(2h)}{E(h)} \end{aligned}$$

Trapetsmetoden ( $\frac{E_T(2h)}{E_T(h)} = 4$ )  $\Rightarrow p_T = \log_2(4) = 2$ , det vill säga nogrannhetsordning 2. Vad vi har gjort nu är uppskattat det med ändligt antal punkter, något som egentligen kräver oändligt antal, och sen har vi dragit en slutsats på detta. Vi säger att *diskretiseringsfelet* (eller *trunkeringsfelet*) är av storleken  $O(h^2)$

Simpsons ( $\frac{E_S(2h)}{E_S(h)} = 16$ )  $\Rightarrow p_S = \log_2(16) = 4$ , det vill säga nogrannhetsordning 4 och diskretiseringsfelet  $= O(h^4)$

Felet kan härledas analytiskt:

$$\text{Låt } I = \int_a^b f(x)dx$$

För trapetsmetoden:  $E_T(h) = I - T(h) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi_h)$  för något  $\xi \in [a, b]$  eller  $E_T(h) = Ch^2 + O(h^4)$

För simpsons:  $E_S(h) = I - S(h) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi_h)$  för något  $\xi_h \in [a, b]$

Exempelvis såg vi att  $\int_0^1 x^3 dx$  blev exakt med simpsons, detta beror på att fjärdederivatan av  $x^3 = 0$ .

## 2.5. Feluppskattning.

Trapetsregeln ges en härledning av feluppskattningen på följande:

$$\begin{aligned} I_1 &= T(h) + Ch^2 + O(h^4) \\ I_2 &= T(2h) + C(2h)^2 + O(h^4) \\ I_1 - I_2 &= 0 = T(h) - T(2h) + (1 - 2^2)Ch^2 + O(h^4) \\ Ch^2 &= \frac{T(h) - T(2h)}{3} + O(h^4) \end{aligned}$$

Uppskattning av dominerande termen i trunkeringsfelet för  $T(h)$ . "Tredjedelsregeln". Notera att vi tittar bara i ett ändligt antal punkter, alltså kan vi konstruera en funktion där felet ser ut att vara noll, men i verkliga fallet så kanske felet är jättestort.



## 2.6. Richardsson-extrapolation.

”Kostar” det något att beräkna detta? Nä, vi har ekvidistanta punkter! Att beräkna ena funktionsvärdet ger den andra.

Vi stoppar in  $Ch^2 = \frac{T(h) - T(2h)}{3} + O(h^4)$  i  $I_1$  :

$$I = T(h) + \frac{T(h) - T(2h)}{3} + O(h)$$

Övning: visa att richardsson-extrapolation tillämpat på trapetsmetoden ger simpsons

$$I_1 = Q(h) + Ch^p + O(h^{p+1})$$

$$I_2 = Q(2h) + C(2h)^p + O(h^{p+1})$$

$$Ch^p = \frac{Q(h) - Q(2h)}{2^p - 1} + O(h^{p+1})$$

## 3. FÖRTYDLIGANDE/FRÅN BOKEN

## 3.1. Integraler.

Ibland går det inte att lösa integraler analytiskt och då kan vi använda numeriska metoder för att lösa dem. Vi kan göra detta givet hela funktionen, eller så kan vi göra detta givet punkter och där vi senare använder olika metoder för att approximera grafen så att vi kan integrera den. Det finns 2 typer av beräkningsalgoritmer:

- Öppna
  - En väldigt kraftfull typ av öppen integrering är så kallad *Gaussisk kvadratur*. Här uppskattas integralen genom att evaluera den i icke-ekvidistanta punkter och genom att ansätta en "vikt" vid varje punkt som talar om hur mycket den punkten bidrar.
- Stängda
  - Evaluerar funktion i ändpunkterna av det givna intervallet. Den mest grundläggande algoritmen för detta kallas för *Romberg* integrering vilket är baserat på trapetsidén som man senare har förfinat till Simpsons formel. Romberg integrering är alltså i princip Simpsons, men med lite mer logisk koppling mellan trapetsidén och Simpsons.

## 3.2. Riemann integralen.

Vi vet från envariabelanalysen att integralens definition ser ut på följande sätt:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=0}^n f(x_i)\Delta x$$

$$\Delta x = \frac{b-a}{n}$$

Detta bildar våra rektanglar som vi sedan summerar deras area över ett intervall. Ett lite bättre sätt att approximera integralen hade varit att om vi istället för att betrakta rektanglar, att vi betraktar trapetsar, det vill säga man "ansluter"  $f(x_i)$  och  $f(x_{i+1})$ . Arean av en trapets ges av  $A = \frac{a+b}{2} \cdot h$ . Om vi låter höjden vara  $\Delta x$  och  $a$  resp.  $b$  ges av funktionsvärdena får vi istället  $\frac{f(x_i) + f(x_{i+1}))}{2} \cdot \Delta x = \Delta A$ , varpå trapetsformeln kommer ifrån.

Det visar sig att felet som uppstår i trapetsens uppskattning är proportionell mot  $\Delta x^3 f''(\xi)$ , där  $\xi$  är någon okänd punkt i intervallet. Denna metod för att räkna fram felet används sällan, ty man behöver finna andra-derivatan och inte nog med det så måste man även hitta när uttrycket antas sitt största värde (man utgår alltid från det värsta fallet, det vill säga att man har det högsta felet på intervallet).

## 3.3. Relationen mellan Simpsons och Trapetsapprox.

Eftersom både trapets och Simpsons evaluerar funktionen på precis samma mängd av punkter, bör det finnas något form av samband. De använder även samma geometriska härledning för att komma fram till formlerna, en där man använder parabler, och den andra använder vi trapetsar. Både geometriskt och algebraiskt måste det finnas någon koppling!

Simpsons behöver som absolut minst 3 datapunkter som input. Låt oss kalla dessa  $f_1, f_2, f_3$ . Vad händer om vi stoppar in samma datapunkter i trapetsen istället, kan vi härleda något algebraiskt uttryck/samband mellan de två?

$$S_k = T_k + \frac{T_k - T_{k-1}}{3}$$

## 4. FÖRELÄSNING

- Adaptiva metoder
- Numerisk integration i scipy
- Relativt och absolut fel
- Funktionsfel

Vi vill göra en figur där yaxeln motsvarar felet och x\_axeln motsvarar h.

## 4.1. Numerisk integration med scipy.

Givet en integral  $I = \int_a^b f(x)dx$  så kan vi skriva följande kod för att evaluera integralen:

```
from scipy.integrate import quad

(q, aerr) = quad(func, a, b) # Feluppskattning |q-I| ungefär lika med aerr
#Vi kan begära viss noggrannhet:

(q, aerr) = quad(func, a, b, epsabs = atol, epsrel = rtol) #scipy försöker uppfylla kraven

|q-I| <= max(atol, rtol*|I|)
```

## 4.2. Vad menas med absolut resp. relativt fel?

Om ens chef säger ”ge mig det här med 5 siffrors noggrannhet”, men vad menar grabben egentligen? Säg att jag skall approximera 1 med 3 siffrors noggrannhet och min approximation är 0.9999999 (inga siffror är korrekt!):

## 4.3. Funktionsfelet.

$I = \int_a^b f(x)dx$ . Vi approxierar denna med numerisk kvadratur där vi antar att vi har exakta värden på funktionen. Men vad händer om vi inte har exakta funktionsvärden, det vill säga att vi har ett fel? Det kanske kommer från mätvärden där det är fel i dem, eller något som vi alltid har, avrundningsfel. Antag att vi vet att  $|f(x) - \tilde{f}(x)| \leq \varepsilon$ , för sammansatta trapets/simpson gäller  $\sum_{i=0}^n |w_i| = b - a \Rightarrow \varepsilon \sum_{i=0}^n |w_i| = \varepsilon(b - a)$

- Diskretiseringsfelet är vanligtvis större än avrundningsfelet.
- Om funktionsvärden kommer från mätningar kan de ha stor effekt på noggrannheten.

## 4.4. Noggrannhet - Sammanfattning.

Två typer av fel

- Diskretiseringsfel (trunkeringsfel)
- Fel i funktionsvärden

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx Q(h) \approx \tilde{Q}(h)$$

Totalt fel:  $I - \tilde{Q}(h) = I - Q(h) + Q(h) - \tilde{Q}(h)$  där första 2 termerna är diskret. fel och sista 2 är funktionsfel

Vi kan använda Ye Olde' triangelolikheten:

$$|I - \tilde{Q}(h)| \leq |I - Q(h)| + |Q(h) - \tilde{Q}(h)|$$

#### 4.5. Gammal tentauppgift (2009-12-21).

Om en funktion  $f(x)$  vet man dels att den för vissa  $x$ -värden antar värden enligt tabellen nedan (två korrekta decimaler):

$x$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
$f(x)$	1.89	2.07	2.89	2.18	1.74

och dels att absolutbeloppet för de 5 första derivatorna av  $f(x)$  är begränsade och mindre än 19 i intervallet. Givet denna information, approximera integralen  $I = \int_{0.1}^{0.5} f(x)dx$  så exakt som möjligt samt ge en strikt feluppskattning.

Det är trapets och simpsons som vi har gått igenom, och simpsons är den mest noggranna. Vad är det som gör att jag kan använda simpsons? Jo, jag har ekvidistanta punkter (alla  $x$ -värden skiljer sig med lika mycket) och jämt antal intervall:

$$S(h) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)]$$

Men! Funktionsvärdena är inte exakta, så jag har alltså  $\tilde{S}(h)$ :

$$\tilde{S}(h) = \frac{0.1}{3}(1.89 + 4 \cdot 2.07 + 2 \cdot 2.89 + 4 \cdot 2.18 + 1.74) \approx 0.88033$$

Vi har 2 fel som vi skall svara på, diskretiseringsfelet och funktionsfelet. Låt oss börja med trunkeringsfelet:

$$I = \int_a^b f(x)dx = S(h) - \frac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \text{ ej } \tilde{S}(h)$$

$$|I - S(h)| = \left| \frac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \right| < \frac{0.5-0.1}{180} \cdot 0.1^4 \cdot 19 \approx 4.22 \cdot 10^{-6} = \text{trunkeringsfelet}$$

Funktionsfelet:

$$|f(x) - \tilde{f}(x)| < 0.5 \cdot 10^{-2}$$

$$|S(h) - \tilde{S}(h)| \leq (b-a)\varepsilon = (0.5-0.1) \cdot 0.5 \cdot 10^{-2}$$

Totala felet:

$$|I - \tilde{S}(h)| = |I - S(h) + S(h) - \tilde{S}(h)| \leq |I - S(h)| + |S(h) - \tilde{S}(h)| \leq 4.22 \cdot 10^{-6} + 0.0002 \approx 0.0002$$

$$I \approx 0.880 \pm 0.002$$

För att minska felet, vad ska man göra då? Man kan använda flera värden eller testa trapets, men notera att funktionsfelet är 100 gånger större än trunkeringsfelet, så vi behöver mer exakta värden!