Numerieke Methoden
3de Bachelor Fysica

Practicum 5: Numerieke differentiatie en integratie

Contact: jeroen.mulkers@uantwerpen.be U.305

1. Richardsons extrapolatie. In heel wat problemen, zoals numerieke differentiatie en integratie, berekenen we een benaderende waarde voor een grootheid, gebaseerd op een gekozen stapgrootte. We zouden graag de limietwaarde kennen als de stapgrootte naar nul gaat. We kunnen deze stapgrootte echter niet willekeurig klein kiezen omdat dit zou leiden tot grote 'rounding errors'. Echter, door gebruik te maken van berekende resultaten voor verschillende stapgroottes, kunnen we wel extrapoleren wat het resultaat zou zijn als de stapgrootte nul wordt.

   Noem $F(h)$ de waarde verkregen met stapgrootte h. Onderstel dat

   $$F(h) = a_0 + a_1 h^p + O(h^r).$$

   p is hier de laagste orde van de fout afschatting. We nemen aan dat we de waarden van p en r kennen ($r > p$), maar niet a_0 en a_1. Immers $F(0) = a_0$ is de grootheid die we zoeken. Stel dat we F berekend hebben voor twee stapgroottes, zeg h en h/q met q een natuurlijk getal. Dan geldt dus ook nog

   $$F(h/q) = a_0 + a_1(h/q)^p + O(h^r).$$

   Uit deze twee vergelijkingen kunnen we eenvoudig a_0 bepalen:

   $$a_0 = \frac{q^p F(h/q) - F(h)}{q^p - 1} + O(h^r) \tag{1}$$

   $$= F(h) + \frac{F(h) - F(h/q)}{q^{-p} - 1} + O(h^r). \tag{2}$$

   De nauwkeurigheid van de benadering, nl. van a_0, is nu van orde $O(h^r)$ i.p.v. $O(h^p)$. Pas nu deze techniek toe op de centraal verschil benadering voor de eerste afgeleide:

   $$F(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \tag{3}$$

   $$f'(x) = F(h) + O(h^2) \tag{4}$$

Bereken zo de afgeleide van $\sin(x)$ in $x = 1$. Neem als stapgroottes $h = 0.5$ en $h/2 = 0.25$.

2. **Je kan voor deze oefening gebruik maken van de scripts trap.m en trapsimp.m.** De Richardsons extrapolatie techniek kan ook toegepast worden op numerieke integratie. Bereken de integraal

$$\int_0^{\pi/2} \sin(x)dx$$

met de (samengestelde) trapezium regel. Neem eerst als stapgrootte $h = \pi/2$ en daarna $h/2 = \pi/4$. Bepaal hiermee het resultaat van Richardsons extrapolatie.

Definieer $T_{k,0}$ voor elk natuurlijk getal $k \geq 0$ als de benadering voor de integraal $\int_a^b f(x)dx$ via de samengestelde trapeziumregel met stapgrootte $h_k = (b-a)/2^k$. Nu kunnen we voor elk natuurlijk getal $j, j = 1, \ldots, k$ recursief de opeenvolgende geëxtrapoleerde waarden schrijven als

$$T_{k,j} = \frac{4^j T_{k,j-1} - T_{k-1,j-1}}{4^j - 1}.$$

Overtuig jezelf ervan dat dit overeenkomt met de Romberg integratie formules. Dit kunnen we noteren als

$$\begin{array}{lllll} T_{0,0} & & & & \\ T_{1,0} & T_{1,1} & & & \\ T_{2,0} & T_{2,1} & T_{2,2} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}.$$

Je hebt reeds $T_{0,0}$ en $T_{1,0}$ berekend, en de geëxtrapoleerde waarde $T_{1,1}$. Bereken nu ook de andere waarden $T_{k,j}$.

Toon (numeriek en analytisch) aan dat de tweede kolom niets anders is dan het resultaat van de samengestelde Simpson regel.

3. Schrijf een functie die de integraal berekent van numerieke data via spline interpolatie. Integreer de spline interpolatie exact.

4. Bereken de integraal

$$\int_{-1}^{3} f(x)dx = \int_{-1}^{3} (x^3 - x + 5)dx$$

exact en met de methode van Simpson (gebruik de uitdrukking voor S_2). Wat valt er op? Maak ook een figuur van de kwadratische interpolant P_2 die je gebruikt om S_2 te berekenen samen met de figuur van het integrandum $x^3 - x + 5$. Bereken het verschil

$$\int [f(x) - P_2]\, dx$$

over de eerste en tweede helft van het interval $[-1, 3]$.

5. Wat kan je doen als je integrandum oneindig wordt in een punt? Omdat we een integraal steeds kunnen opsplitsen, kunnen we het probleem reduceren tot de integraal $\int_a^b f(x)dx$ met de singulariteit in een eindpunt, zeg a. Ten eerste moeten we er ons natuurlijk van overtuigen dat de integraal bestaat. Voor een singulariteit van de vorm $f(x) \sim c(x-a)^\gamma$ als $x \to a$ moet er daarvoor gelden dat $\gamma > -1$.

   Een eerste manier om met zo'n singulariteit om te gaan is het invoeren van een nieuwe integratieveranderlijke waardoor de singulariteit verdwijnt, wat mogelijk is voor bovenstaande algebraïsche singulariteiten van de vorm $f(x) \sim c(x-a)^\gamma$. We proberen de nieuwe variabele $x = a + t^\beta$. Hiermee wordt de integraal

$$\int_a^b f(x)dx = \int_0^{(b-a)^{1/\beta}} f(a+t^\beta)\beta t^{\beta-1}dt = \int_0^{(b-a)^{1/\beta}} G(t)dt.$$

   Het nieuwe integrandum $G(t) \sim ct^{\beta\gamma}\beta t^{\beta-1}$ zal geen singulariteit bevatten als we β zo kiezen dat $\beta(\gamma+1) - 1 \geq 0$.

   Pas deze methode nu toe op de integraal

$$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt[3]{x}} dx.$$

   Deze integraal bevat een singulariteit in $x = 0$. Om goed het gedrag van het integrandum in te schatten, kijk je best naar zijn reeksontwikkeling:

$$\frac{e^x}{\sqrt[3]{x}} = \frac{1 + x + x^2/2 + \cdots}{\sqrt[3]{x}} = \frac{1}{\sqrt[3]{x}} + x^{2/3} + \cdots .$$

   Dus $f(x) \sim x^{-1/3}$ en $\gamma = -1/3$. De integraal bestaat omdat $\gamma > -1$. Kies β nu zodat de singulariteit verdwijnt en bereken de integraal. (Oplossing: 2.343591093328065)

6. Pas dezelfde methode nu toe op de integraal

$$\int_0^1 \frac{x^{7/4} e^x}{\sinh^2(x)} dx.$$

   (Oplossing: 1.913146675663268)