Laborationstillfälle 3 – Numerisk integration

Målsättning vid labtillfälle 3: Klara av laborationsuppgift 2. Innan dessa läser man hela texten noga. I mån av tid görs övning 1, men den är ganska svår.

Numerisk integration

Ofta kan man inte bestämma integraler $\int_a^b f(x)dx$ exakt utan man får nöja sig med att beräkna approximationer. T.ex. $\int_0^1 \exp(x^2)\,dx$ kan inte beräknas exakt, eftersom det inte finns något slutet uttryck för den primitiva funktionen. Det kan också vara så att integranden bara är känd i vissa punkter, t.ex. vi har en serie med mätdata.

Den s.k. *trapetsformeln* går ut på att man ersätter integranden med ett förstagradspolynom $P_1(x)$ (rät linje) som går igenom punkterna $(a, f(a))$ och $(b, f(b))$. Om vi integrerar polynomet får vi arean av ett *parallelltrapets*

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_1(x)dx = \frac{b-a}{2}\big(f(a) + f(b)\big)$$

Man kan visa, om f'' är kontinuerlig och $|f''(x)| \leq M$ för $a \leq x \leq b$, att felet vid approximationen blir högst

$$\frac{M}{12}(b-a)^3$$

Vi får *Simpsons formel* om vi ersätter integranden med ett andragradspolynomet $P_2(x)$ som går igenom punkterna $(a, f(a)), (\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$ och $(b, f(b))$. Integration ger (efter lite kalkyler)

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_2(x)dx = \frac{b-a}{6}\big(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\big)$$

Felet vid approximationen blir, om $f^{(4)}$ är kontinuerlig och $|f^{(4)}(x)| \leq K$ $a \leq x \leq b$ högst

$$\frac{K}{2880}(b-a)^5$$

Trapetsmetoden

Låt $x_i = a + ih, i = 0, 1, \cdots, n$ med $h = \frac{b-a}{n}$ vara en indelning av $a \leq x \leq b$. Använd trapetsregeln på varje delintervall

$$T_n = \frac{h}{2}\big(f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\big)$$

För T_n får vi ett fel för varje delintervall, det totala felet blir högst

$$\frac{b-a}{12}Mh^2$$

med M enligt ovan.

Simpsons metod

Samma intervallindelning som i trapetsmetoden ger

$$S_n = \frac{h}{3}\{f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\}$$

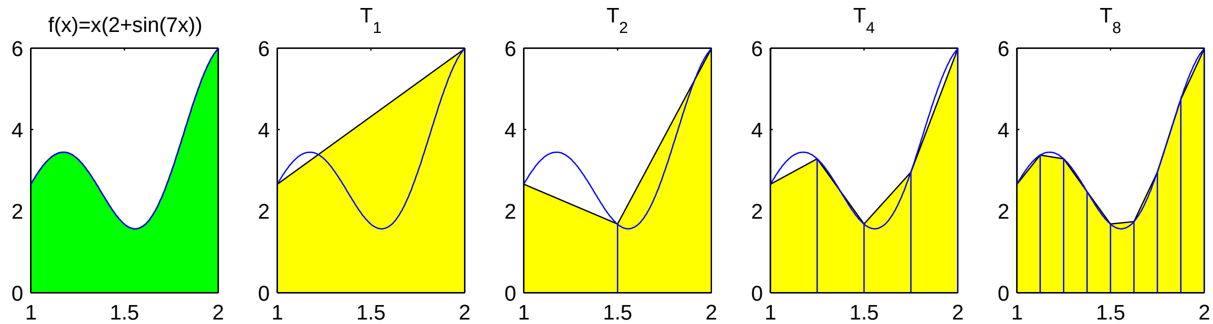
med felet högst

$$\frac{b-a}{180}Kh^4$$

med K enligt ovan.

Exempel 1. Vi skall approximera $\int_1^2 x(2+\sin(7x))\,dx$ med trapetsmetoden

```
>> a=1; b=2;
>> h=b-a; x=a:h:b; f=x.*(2+sin(7*x));
>> T1=h*(f(1)/2+f(2)/2)
T1 =
    4.3191
>> h=(b-a)/2; x=a:h:b; f=x.*(2+sin(7*x));
>> T2=h*(f(1)/2+f(2)+f(3)/2)
T2 =
    2.9998
>> h=(b-a)/4; x=a:h:b; f=x.*(2+sin(7*x));
>> T4=h*(f(1)/2+f(2)+f(3)+f(4)+f(5)/2)
T4 =
    3.0590
>> h=(b-a)/8; x=a:h:b; f=x.*(2+sin(7*x));
>> T8=h*(f(1)/2+sum(f(2:8))+f(9)/2)
T8 =
    3.0715
```




```
>> h=(b-a)/16; x=a:h:b; f=x.*(2+sin(7*x));
>> T16=h*(f(1)/2+sum(f(2:end-1))+f(end)/2)
T16 =
    3.0745
```

Ofta beräknas successivt $T_1, T_2, T_4, \cdots$ (intervallhalveringar), så att man kan återanvända redan beräknade funktionsvärden. Nu nöjer vi oss med detta enkla (men oekonomiska) sätt att räkna ut resultaten. Funktionen **sum** summerar värden i en vektor. Med **f(2:8)** bildas en vektor som består av elementen på plats 2-8 i vektorn **f**. Praktiskt är också **end** som ger sista platsnummer i en vektor.

Nu till ett exempel (från termodynamik) när integranden ges av en tabell.

Exempel 2. Den energi som behövs för att upphetta en mol metylklorid (CH_3Cl) från 300 K till 1000 K ges av

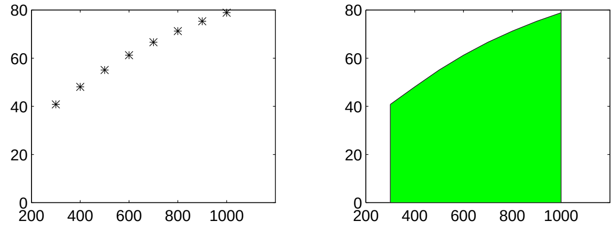
$$q_p = \int_{300}^{1000} C_p(T)dT$$

där $C_p(T)$ är värmekapaciteten per mol för metylklorid enligt

T	300	400	500	600	700	800	900	1000
C_p	40.82	48.10	55.09	61.25	66.60	71.26	75.33	78.90

Med MATLAB beräknar vi q_p och skattar absoluta felet. Det sistnämnda görs med variabeln Absfel sist i nedanstående kalkyl, och kan hoppas över. Bakgrunden är en uppskattning av största värdet av andraderivatans belopp med hjälp av andra ordningens differenser.

```
>> T=300:100:1000; h=100;
>> Cp=[40.82 48.10 55.09 61.25 66.60 71.26 75.33 78.90];
>> plot(T,Cp,'*'), axis([200 1200 0 80])
>> fill([T(end) T(end) T(1) T],[Cp(end) 0 0 Cp],'g'), axis([200 1200 0 80])
```




```
>> qp=h*(Cp(1)/2+sum(Cp(2:end-1))+Cp(end)/2)
qp =
   43749
>> Absfel=(T(end)-T(1))/12*max(abs(diff(Cp,2)))
Absfel =
   48.4167
```

Trapetsmetoden ger $\tilde{q}_p = 43749$ och felet blir högst 48.4. Mätfel inverkar med en osäkerhet på $(1000-300)\cdot 0.005 = 3.5$ som i detta fall är närmast försumbart. Med **fill** kan vi fylla ett polygonområde. Finns med här bara för att illustrera integralvärdet. Lägg märke till **diff** som bildar en approximation av $h^2 C_p''(T)$ och **max** som ger maximala värdet.

Adaptiva metoder

Det finns en mängd av andra typer av metoder, t.ex. adaptiva metoder där man inte gör en likformig indelning av intervallet, utan eftersträvar att utvärdera integranden där det är kraftigast variation i den. T.ex. **quad** och **quadl** i MATLAB bygger på en adaptiva metoder. Se help i MATLAB för närtmare information.

Exempel 3. Vi kan approximera $\int_1^2 x(2+\sin(7x))\,dx$ noggrannt med

```
>> quadl('x.*(2+sin(7*x))',1,2)
ans =
   3.07544113229678
```

Lägg märke till det enkla sätt vi beskriver integranden på, det går bra om vi har ett funktionsuttryck utan konstanter eller parametrar. Man kan också skriva

```
quadl(f,1,2) eller quad(@f,1,2)
```

om f är en inline-funktion (första fallet), respektive om f är en funktionsfil (andra fallet).
Med **quadl('x.*(2+sin(7*x))',1,2,1e-8)** kan vi sätta feltoleransen för att få ett noggrannare resultat (default för feltoleransen är 10^{-6}). Nu skall vi se på en mer komplicerad integrand som måste beskrivas med en **function**-fil.

Exempel 4. I samband med studiet av ett fysikaliskt fenomen (hålrumsstrålare) vill man beräkna

$$\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5 (e^{hc/k\lambda T} - 1)}\, d\lambda$$

för olika värden på T. Konstanterna har värdena $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$, $c = 2.9979 \cdot 10^8$ och $k = 1.3805 \cdot 10^{-23}$. Integrationsgränserna är $\lambda_a = 0.4 \cdot 10^{-6}$ och $\lambda_b = 0.7 \cdot 10^{-6}$.

```
function y=me(lambda,T)
h=6.6256e-34; c=2.9979e8; k=1.3805e-23;
y=2*pi*h*c^2./(lambda.^5.*(exp(h*c./(k*lambda*T))-1));
```

```
>> T=4500;
>> quadl(@me,0.4e-6,0.7e-6,[],[],T)
ans =
   6.2213e+06
```

Här har vi satt tomma mängden [ ] som platshållare för feltoleransen och får då default-toleransen, givetvis kan vi även sätta in önskad tolerans. Den andra platshållaren gäller en parameter som styr om det skall ske utskrift av delresultat under integrationen (default är ingen utskrift). Därefter kommer aktuellt värde på **T**.

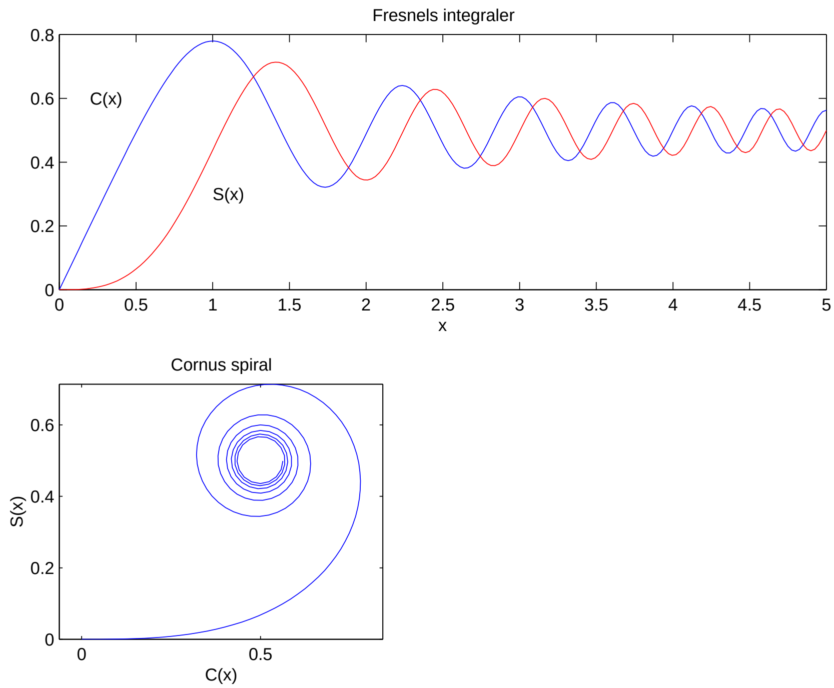
Övning 1. Rita graferna av Fresnelintegralerna

$$C(x) = \int_0^x \cos\left(\frac{\pi t^2}{2}\right)\, dt, \qquad S(x) = \int_0^x \sin\left(\frac{\pi t^2}{2}\right)\, dt$$

för $0 \le x \le 5$. (Dessa integraler uppstår i samband med studiet av ljusdiffraktion.)

Lösning till övningsuppgift 1.

```
n=200;
x=linspace(0,5,n);
c=inline('cos(pi/2*t.^2)'); s=inline('sin(pi/2*t.^2)');
C=zeros(size(x)); S=zeros(size(x));
for k=2:n
   C(k)=C(k-1)+quadl(c,x(k-1),x(k)); S(k)=S(k-1)+quadl(s,x(k-1),x(k));
end
subplot(2,1,1), plot(x,C,x,S,'r'), title('Fresnels integraler')
text(0.2,0.6,'C(x)'), text(1,0.3,'S(x)'), xlabel('x')
subplot(2,2,3), plot(C,S), axis('equal'), title('Cornus spiral')
xlabel('C(x)'), ylabel('S(x)')
```



Laborationsuppgift 2.
Tillverka en funktionsfil för beräkning av integraler med *trapetsmetoden*. Indata: en integrand (given med inline eller som funktionsfil), integrationsgränser och antal delintervall. Utdata: närmevärdet för integralen. Undvik for-loopar, använd *sum*!

a) Testa genom att beräkna

$$\int_0^\pi \frac{\sin x}{x} dx$$

För att undvika division med noll, ange nedre integrationsgränsen som *eps*, vilket ger talet $2^{-52} \approx 0$. Jämför med MATLABS eget **quadl**.

b) Plotta kurvan $x = t + 2\sin 2t,\ y = t + 2\cos 5t$ för $0 \leq t \leq 2\pi$. (Generera x och y, använd **plot(x,y)** och begär **axis equal**!) Försök att med ögonmått göra en grov uppskattning av kurvans längd. Beräkna därefter längden med en integral (läroboken sid 323). Pröva både med ditt trapetsprogram (variera antalet delintervall) och med **quadl**!

c) Till sist ger vi oss på en generaliserad integral:

$$\int_0^\infty e^{-x^2} dx$$

Uppgift: Beräkna integralen med ett fel vars absolutbelopp är högst 10^{-6}.
Dela då upp integralen i två: en från 0 till a, en från a till ∞ (med lämpligt val av a). Om a är stort nog (behövs inte så mycket!), blir den senare integralen mycket liten. Om den försummas, ger detta ett fel som kan adderas till "trapetsfelet" i beräkningen av den första. Tips: för $x > a$ är $x^2 > ax$. Pröva ett a och använd olikheten för att uppskatta den andra integralen med en som du kan räkna ut. Uppskatta sedan "trapetsfelet" med den metod som står under rubriken Trapetsmetoden på sid 1 i detta material, välj antalet delintervall tillräckligt stort. Adderat till den bortkastade integralen ska det ge ett fel av den begärda storleksordningen. Använd gärna **quadl** som kontroll!

Glöm inte att läsa på materialet för nästa veckas laborationstillfälle!

Nya **kommandon och funktioner** i MATLAB som vi använt vid detta labtillfälle.

fill – fyller ett polygonområde med en färg.
loglog, **semilogx**, **semilogy** – samma som plot, men först logaritmeras vektorerna.
text, **gtext** – skriv en textsträng i en graf.

logspace – gör en vektor med likformigt fördelade 10-exponenter.
zeros – gör en matris fylld med nollor.

size – anger antal rader och kolonner i en matris.
diff – bilda successiva differenser av elementen i en vektor.
max, **min** – tar ut största/minsta värdet ur en vektor.
sum, **prod** – summa resp. produkt av elementen i en vektor.

inline – enrads intern funktionsbeskrivning.

quad och **quadl** – integration av en funktion över ett intervall.