



Doctoral Thesis

Adaptive quadrature re-revisited

Author(s):

Gonnet, Pedro

Publication Date:

2009

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005861903> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 18347

Adaptive Quadrature Re-Revisited

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZÜRICH

for the degree of
DOCTOR OF SCIENCES

presented by
Pedro Gonnet

Dipl. Inf. Ing., ETH Zürich
born on January 6th, 1978
citizen of Zürich, Switzerland

Accepted on the recommendation of
Prof. Dr. W. Gander, examiner
Prof. Dr. J. Waldvogel, co-examiner
Prof. Dr. D. Laurie, co-examiner

2009

Abstract

The goal of this thesis is to explore methods to improve on the reliability of adaptive quadrature algorithms. Although adaptive quadrature has been studied for several years and many different algorithms and techniques have been published, most algorithms fail for a number of relatively simple integrands.

The most important publications and algorithms on adaptive quadrature are reviewed. Since they differ principally in their error estimates, these are tested and analyzed in detail and their similarities and differences are discussed.

In order to construct a more reliable error estimate, we start with a more complete and explicit representation of the integrand. To this extent, we **explicitly construct the interpolatory polynomial over the nodes of a quadrature rule**, which is constructed implicitly when the quadrature rule is evaluated.

The interpolatory polynomial is represented as a linear combination of orthogonal polynomials satisfying a three-term recurrence relation. Two new algorithms are presented for the efficient and numerically stable **construction, update and downdate** of such interpolations.

This representation can be easily **transformed** to any interval, thus allowing for its re-use inside the sub-intervals. The interpolation updates can be used to increase the degree of a quadrature rule by adding more nodes and the downdates can be used to remove nodes for which the integrand is not defined.

Based on this representation, **two new error estimates** based on the L_2 -norm of the difference between the interpolant and the integrand (as

opposed to using the integral of the difference between the interpolant and the integrand) are derived and shown to be more reliable than previously published error estimates. The space of possible integrands for which the new estimators will fail is shown to be smaller than that of previous error estimators.

A mechanism for the **detection of divergent integrals**, which may cause the algorithm to recurse infinitely and are usually caught by artificially limiting the number of function evaluations, is also included and tested.

These new improvements are implemented in **three new quadrature routines** and tested against several other commonly used routines. The results show that the new algorithms are **all more reliable** than previously published algorithms.

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Dissertation ist es, Verfahren zu untersuchen, um die Zuverlässigkeit von Algorithmen zur adaptiven Quadratur zu verbessern. Obwohl an der adaptiven Quadratur seit mehreren Jahren geforscht wird und eine Vielzahl von Algorithmen und Techniken schon publiziert wurden, versagen die gängigen Verfahren für zum Teil sehr einfache Integranden.

Die wichtigsten Publikationen und Algorithmen werden hier besprochen. Da sie sich hauptsächlich in der Art der Fehlerschätzung unterscheiden, werden die Verfahren zur Fehlerschätzung im Detail untersucht und getestet. Die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen den einzelnen Verfahren werden diskutiert.

Um einen genaueren Fehlerschätzer zu konstruieren, wird zuerst eine vollständige und explizite Darstellung des Integranden angefangen. Um diese zu erhalten, wird das Interpolationspolynom über die Knoten der Quadraturregel explizit konstruiert, welches sonst von dieser nur implizit berechnet wird.

Das Interpolationspolynom wird als Linearkombination einer orthogonalen Polynomialbasis dargestellt. Die Polynome dieser Basis erfüllen eine dreigliedrige Rekursionsformel. Zwei neue Algorithmen zur Berechnung, zur Erweiterung und zur Reduktion einer solchen Interpolation werden vorgestellt und getestet.

Diese Darstellung kann später auf ein beliebiges Intervall transformiert werden, was die Wiederverwertung in den Subintervallen ermöglicht. Die Interpolations-Erweiterung kann dazu benutzt werden, den Grad einer Quadraturformel zu erhöhen, indem zusätzliche Punkte zur Interpolation

hinzugefügt werden und die Reduktion kann benutzt werden, um Punkte zu entfernen an denen der Integrand nicht definiert ist.

Gestützt auf diese Darstellung werden zwei neue Fehlerschätzer konstruiert. Es wird gezeigt, dass die neuen Fehlerschätzer zuverlässiger als die bisher publizierten Verfahren funktionieren und dass der Raum aller Funktionen, für die sie nicht funktionieren, stärker eingeschränkt ist als bei anderen Verfahren.

Ein neuer Mechanismus zur Erkennung divergenter Integrale, die bei anderen Verfahren zu einer unendlichen Rekursion führen können und durch willkürliche Rekursionsbeschränkungen abgefangen werden, wird ebenfalls vorgestellt und getestet.

Diese Neuerungen werden in drei neue Quadraturverfahren implementiert und gegen mehrere etablierte Verfahren getestet. Die Resultate zeigen, dass die drei neue Algorithmen zuverlässiger sind als die anderen im Test.