I. Numerische Quadratur

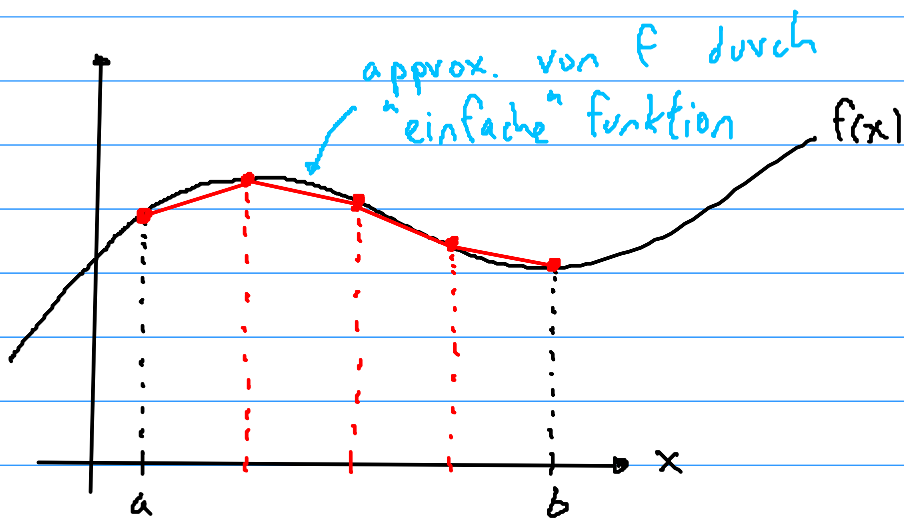
Ziele: - approximieren von bestimmten Integralen

$$Q[f] \approx \int_a^b f(x)\,dx$$

- Genauigkeit der Approximation abschätzen
- fundamentale Konzepte der Numerik kennenlernen
- Newton-Cotes, Gauss, adaptive Quadratur
- zwei-dimensionale Quadratur

Wozu: Oft ist $\int_a^b f(x)\,dx$ nicht exakt berechenbar

Idee:



$$I[f] = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_j w_j \cdot f(x_j) = Q[f]$$

I.1 Polynomiale Interpolation

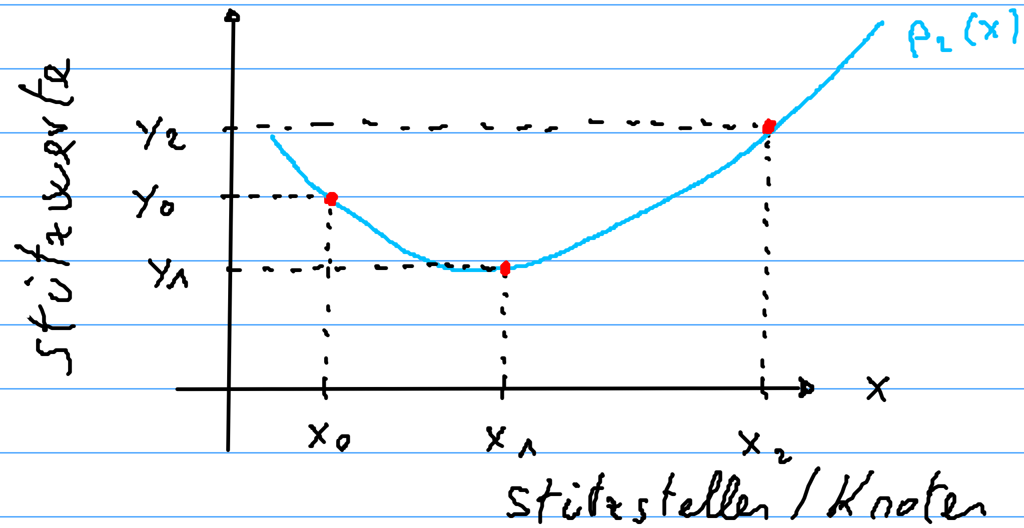
Gegeben $n+1$ paarweise verschiedene **Stützstellen / Knoten** $x_0, x_1, \dots, x_n$ und zugehörige **Stützwerte** $y_0, y_1, \dots, y_n$ finde das Polynom n-ten Grades

$$p_n(x) = a_0 + a_1 \cdot x + \dots + a_n \cdot x^n \in \mathbb{P}_n$$

welches die **Interpolationsbedingungen** (IB) erfüllt

$$p_n(x_j) = y_j \qquad (j = 0, 1, \dots, n)$$

Die $n+1$ Koeffizienten $a_0, a_1, \dots, a_n$ des sog. **Interpolationspolynom** (IP) ergeben sich aus den $n+1$ IB ($\rightsquigarrow$ lineares Gleichungssystem (LGS))



<u>Bsp.:</u> (1) Finde $p_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$

mit $(x_0, y_0) = (1, 2)$, $(x_1, y_1) = (3, 5)$ und

$(x_2, y_2) = (4, 4)$

Die IB lauten

$$p_2(x_0) = p_2(1) = a_0 + a_1 + a_2 = 2 = y_0$$
$$p_2(x_1) = p_2(3) = a_0 + 3a_1 + 9a_2 = 5 = y_1$$
$$p_2(x_2) = p_2(4) = a_0 + 4a_1 + 16a_2 = 4 = y_2$$

Oder als LGS

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Lösen ... $a_0 = -2$, $a_1 = \frac{29}{6}$, $a_2 = -\frac{5}{6}$

Stützstellen — Grad

MATLAB: - p = polyfit(x, y, n)

Stützwerte

- Einfache Auswertung mit polyval

Das IP kann man auch direkt mittels der Lagrange'schen Interpolationsformel (LI) bestimmen

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \cdot L_j^n(x)$$

wobei

$$L_j^n(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \qquad (j = 0, 1, \dots, n)$$

die sog. Lagrange-Polynome (LP) sind.

Die LP haben folgende Eigenschaften

(LP1) $L_j^n(x)$ sind Polynome n-ten Grades

(LP2) $L_j^n(x_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$

(LP2) ist der Grund wieso LI die IB erfüllt:

$$\begin{aligned} p_n(x_i) &= \sum_{j=0}^{n} y_j \cdot L_j^n(x_i) \\ &= 0 + \dots + 0 + y_i \cdot \underbrace{L_i^n(x_i)}_{1} + 0 + \dots \\ &= y_i \checkmark \end{aligned}$$

<u>Bsp.:</u> (2) Finde das IP durch $(x_0, y_0) = (1, 2)$, $(x_1, y_1) = (3, 5)$ und $(x_2, y_2) = (4, 4)$

← wie Bsp. (1)!

Berechne die LP:

$$L_0^2(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} = \frac{x-3}{1-3} \cdot \frac{x-4}{1-4}$$

$$= \frac{1}{6}(x-3)(x-4)$$

$$L_1^2(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x-1}{3-1} \cdot \frac{x-4}{3-4}$$

$$= -\frac{1}{2}(x-1)(x-4)$$

$$L_2^2(x) = \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x-1}{4-1} \cdot \frac{x-3}{4-3}$$

$$= \frac{1}{3}(x-1)(x-3)$$

Damit

$$p_2(x) = 2 \cdot L_0^2(x) + 5 \cdot L_1^2(x) + 4 L_2^2(x)$$

$$= \dots = -2 + \frac{29}{6}x - \frac{5}{6}x^2$$

($\equiv$ Bsp. (1) ✓.)

I.2 Interpolationsfehler

Nun sollen die Stützwerte y_j Werte einer Funktion f an den paarweise verschiedenen Stützstellen x_j sein und wir fragen uns wie gut das IP die Funktion f zwischen den Stützstellen approximiert.

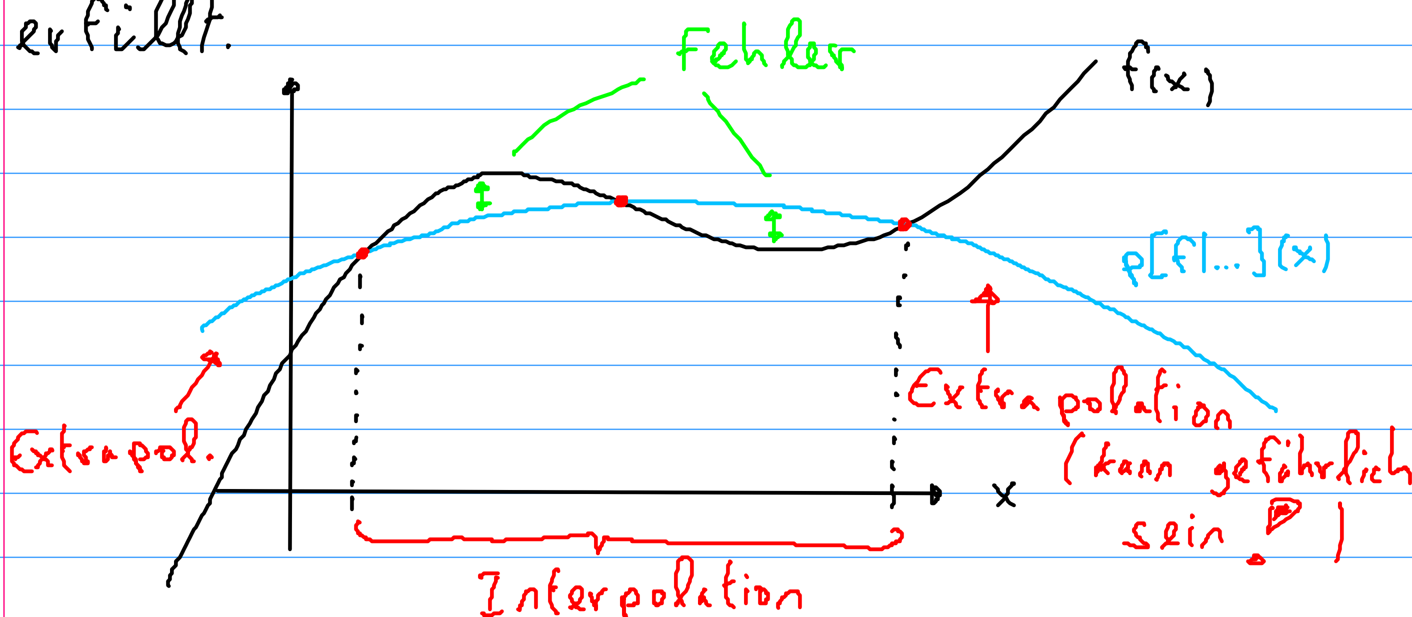
Sei also $f: I = [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ und wir bezeichnen mit

$$p[f|x_0,\dots,x_n](x) \in \mathbb{P}_n$$

das IP welches die IB

$$p[f|x_0,\dots,x_n](x_j) = f(x_j) \qquad (j=0,1,\dots,n)$$

erfüllt.



Für f $(n+1)$-mal stetig differenzierbar lässt sich zeigen, dass es für jedes $x \in I$ ein $\xi = \xi(x) \in I$ gibt mit

hängt von x ab!

$$e(x) = f(x) - p[f|x_0,\dots,x_n](x) = \underbrace{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}}_{\text{hängt von } f \text{ ab}} \underbrace{\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)}_{\text{den Stützstellen ab}}$$

$(n+1)$-te Ableitung

$e(x)$ ist eine Fehlerfunktion über das ganze Intervall I. Oft ist man (nur) am grössten Fehler über I interessiert:

$$\|e\|_\infty = \max_{x\in I} |e(x)| \qquad (\underline{\text{Maximumsnorm}})$$

$$= \max_{x\in I} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n}(x-x_j) \right|$$

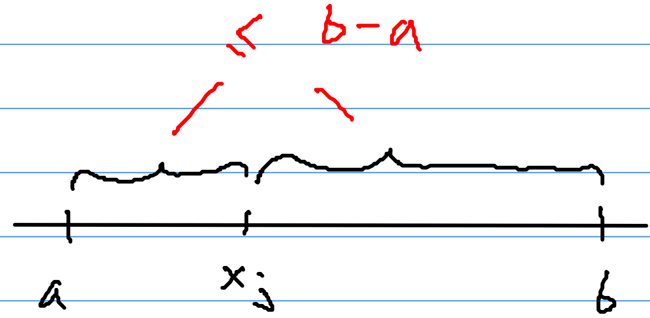
$$\leq \max_{x\in I} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \right| \cdot \max_{x\in I} \left| \prod_{j=0}^{n}(x-x_j) \right|$$

Abschätzung

$$= \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty}{(n+1)!} \Big\| \prod_{j=0}^{n} \underbrace{(x-x_j)}_{\leq\, b-a} \Big\|_\infty$$

$$\leq \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty}{(n+1)!} (b-a)^{n+1}$$

Die letzte Abschätzung kann man am besten graphisch verstehen:



Die Aussage „für f (n+1)-mal stetig differenzierbar" werden wir noch oft sehen.

Man kann auch sagen:

- $f \in C_{n+1}[I]$

weniger präzis ...

- f genügend glatt (smooth)
- f genügend oft stetig differenzierbar

I.3 Numerische Integration = Quadratur

Ziel: Approximation von

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

berechnen

Idee: Verwende Polynomiale Interpolation um $f(x)$ zu approximieren und integriere $p[f|x_0, \ldots, x_n]$
(... Polynome sind einfach zu integrieren ...)

Def.: Eine endliche Rechenvorschrift der Form

$$Q[f] = \sum_{j=0}^{n} w_j \cdot f(x_j)$$

zur Approx. von $I[f]$ nennt man Quadraturregel (QR) oder Quadraturformel.
Die $x_j \in I = [a,b]$ nennt man (Quadratur) Knoten oder Integrationsstützstellen und die w_j (Quadratur) Gewichte.

Quadraturregeln können nun ganz einfach hergeleitet werden.

Seien $x_0, x_1, \dots, x_n \in I$ uns gegebene Knoten.

Dann ist das IP einer funktion f

$$p[f|x_0,\dots,x_n] = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \cdot L_j^n(x)$$

Da das IP die Funktion approx., so gilt

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p[f|x_0,\dots,x_n]\,dx$$

$$= \int_a^b \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \cdot L_j^n(x)\,dx$$

$$= \sum_{j=0}^{n} \int_a^b \underset{\text{Konstant!}}{f(x_j)}\, L_j^n(x)\,dx$$

$$= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \underbrace{\int_a^b L_j^n(x)\,dx}$$

$$= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \cdot w_j = Q_n[f]$$

20.07.17

Die Quadratur Gewichte können also ganz einfach berechnet werden:

$$w_j = \int_a^b L_j^n(x)\,dx$$

Beachte: Die w_j sind unabhängig von f!

D.h. für gegebene Knoten x_j kann man sie ein für alle Mal berechnen und tabellieren.

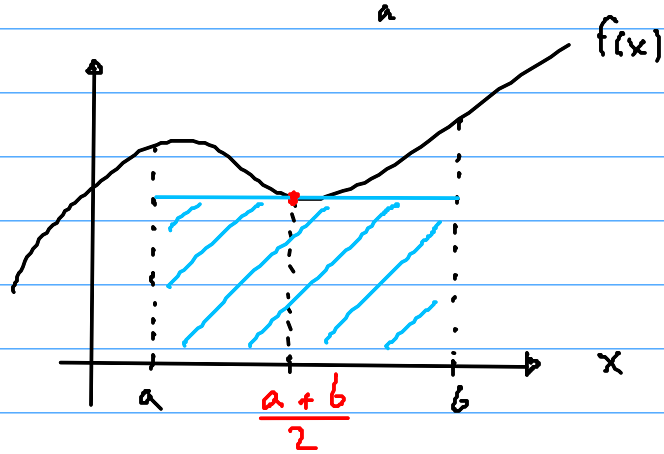
Wichtige Beispiele ...

Bsp.: (3) Mittelpunktsregel (MR) $(n=0)$

Knoten : $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$

LP : $L_0^0(x) = 1$

Gewichte: $w_0 = \int_a^b L_0^0(x)\,dx = b-a$



Damit

$$Q_0[f] = (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

(4) Trapezregel (TR) $(n=1)$

Knoten: $x_0 = a$, $x_1 = b$

LP: $L_0^1(x) = \dfrac{x-b}{a-b}$

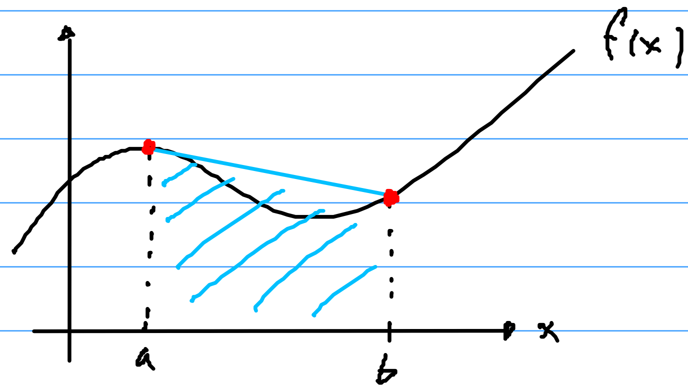
$$L_1^1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

Gewichte: $w_0 = \displaystyle\int_a^b L_j^0(x)\,dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,dx$

$$= \frac{b-a}{2}$$

$$\left[= \frac{(x-b)^2}{2(a-b)} \Big|_a^b = \right]$$

$$w_1 = \ldots = \frac{b-a}{2}$$



Damit

$$Q_1[f] = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

(5) Simpson-Regel (SR) $(n=2)$

Knoten: $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$

LP : $L_0^2(x) = \frac{x - \frac{a+b}{2}}{a - \frac{a+b}{2}} \cdot \frac{x-b}{a-b}$

$L_1^2(x) = \dots$

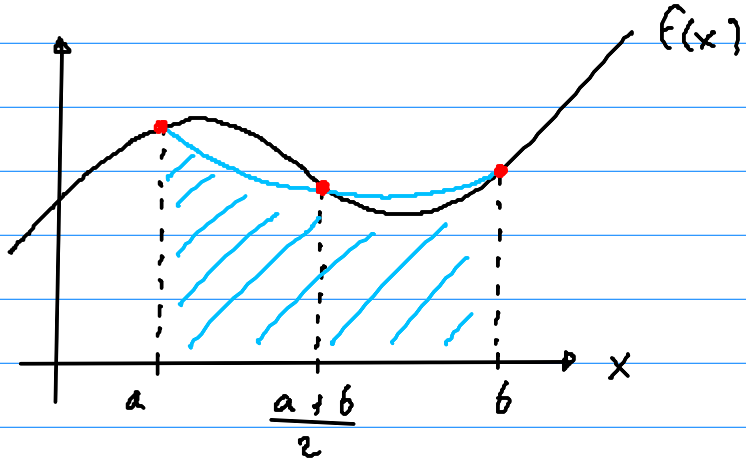
$L_2^2(x) = \dots$

Übung

Gewichte: $w_0 = \int_a^b L_0^2(x)\,dx = \dots = \frac{b-a}{6}$

$w_1 = \dots = \frac{4(b-a)}{6}$

$w_2 = \dots = \frac{b-a}{6}$



Damit

$$Q_2[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

Die MR, TR und SR sind sog.
Newton-Cotes (NC) QRn.

Bei diesen QR verteilt man die Knoten x_j äquidistant über das Intervall $I = [a, b]$

$$n = 0: \quad x_0 = \frac{a+b}{2}$$

$$n > 0: \quad x_j = a + \frac{b-a}{n} j \quad \text{für } j = 0, 1, \dots, n$$

Bem.: (i) TR und SR gehören zu den "populärsten" QR

(ii) NC QR mit $n > 6$ werden numerisch unbrauchbar (da negative Gewichte w_j auftreten)

I.4 Quadraturfehler

Nun interessieren wir uns für die Güte von QRn.

Def.: Wir nennen $E[f] = |Q[f] - I[f]|$ den Quadraturfehler (QF).

Im Prinzip könnten wir den QF mit Hilfe des Interpolationsfehler untersuchen... Dies ist jedoch (relativ) "mühsam".

Als ein Mass der Genauigkeit einer QR definieren wir:

Def.: Eine QR hat Genauigkeitsgrad (GG) $q \in \mathbb{N}$, falls sie alle Polynome bis und mit zum Grad q exakt integriert und q die grösstmögliche Zahl mit dieser Eigenschaft ist.
Manchmal auch Exaktheitsgrad.

Def.: Die Ordnung s einer QR ist definiert durch $s = q+1$.

Dank der Linearität von $I[f]$ und $Q[f]$ kann man den GG einfach bestimmen durch

$$Q[x^k] = I[x^k] \quad k = 0, 1, \dots, q$$

$$Q[x^{q+1}] \neq I[x^{q+1}]$$

$$p \in \mathbb{P}_q : \quad I[p] = \int_a^b a_0 + a_1 \cdot x + \dots + a_q \cdot x^q \, dx$$

$$= a_0 \int_a^b 1 \, dx + a_1 \int_a^b x \, dx + \dots + a_q \int_a^b x^q \, dx$$

$$= a_0 \cdot I[1] + a_1 \cdot I[x] + \dots + a_q \, I[x^q]$$

$Q[p] = \dots \sim$ gleich wie für $I[p]$

Eine weitere willkommene Vereinfachung bei der Bestimmung des GG ist, dass man es nur für das Referenz-Intervall (RI) $I = [-1,1]$ überprüfen muss. Wieso?

Weil sich jedes Intervall $[a,b]$ durch die Variabelsubstitution

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \quad , t \in [-1,1]$$

in das RI transformieren lässt:

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

$$= \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \right) \underbrace{\frac{b-a}{2}\,dt}_{dx}$$

$$= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \right) dt$$

Es ist klar, dass NCs QR_n mindestens den GG des zugrundeliegenden IPs haben. Falls der Grad n des IPs aber gerade ist, so gewinnt man einen GG gratis dazu aus Symmetriegründen:

<u>Bsp.:</u> (6) MR ($n = 0$, also gerade)

$$Q_0[f] = (b-a)\, f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$Q_0[1] = 2 \cdot 1 = I[1]$$

$$Q_0[x] = 2 \cdot 0 = I[x]$$

$$Q_0[x^2] = 2 \cdot 0^2 \neq \frac{2}{3} = I[x^2]$$

$$\rightsquigarrow \text{GG } q = 1 = n + 1$$

(7) TR ($n = 1$, also ungerade)

$$Q_1[f] = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

$$Q_1[1] = \frac{2}{2} \cdot (1 + 1) = 2 = I[1]$$

$$Q_1[x] = \frac{2}{2}\left((-1) + 1\right) = 0 = I[x]$$

$$Q_1[x^2] = \frac{2}{2}\left((-1)^2 + 1^2\right) = 2 \neq I[x^2]$$

$\leadsto$ GG $q = 1 = n$

(8) SR ($n=2$, also gerade)

$$Q_2[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

$$Q_2[1] = \ldots$$

$$\vdots \qquad \text{Übung}$$

$$Q_2[x^k] = \ldots$$

$\leadsto$ GG $q = 3 = n + 1$

Für den QF lässt sich zeigen

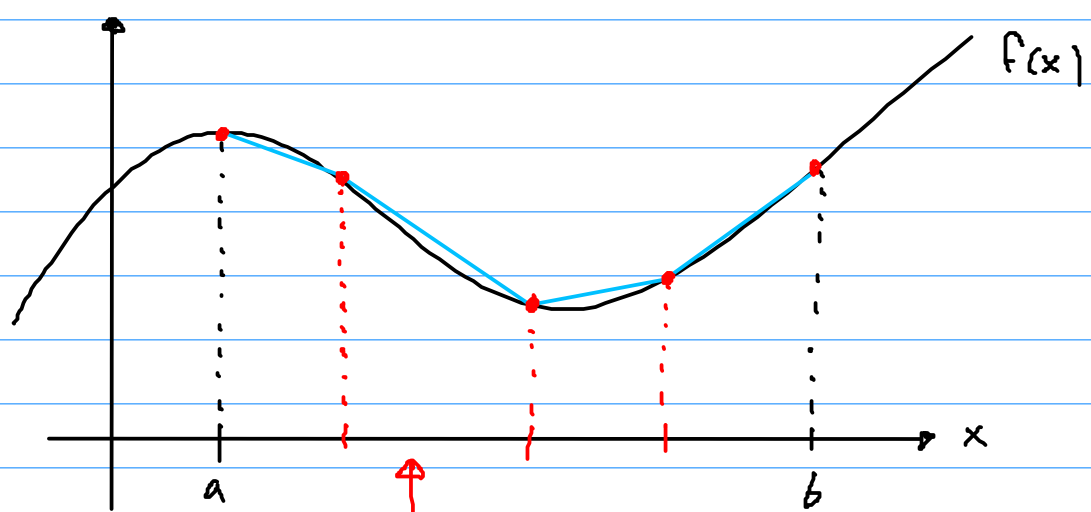
$$E[f] \leq \frac{\| f^{(\overset{s}{q+1})} \|_\infty}{(\underset{s}{q+1})!} (b-a)^{\overset{s+1 \text{ — Ordnung}}{\underbrace{q+2}_{\text{GG}}}} \qquad (\text{QF1})$$

<u>Bsp.:</u> (9) $\leadsto$ Slides

Zusammengefasst: Je grösser der GG, desto genauer ist ein QR, <u>vorausgesetzt</u>, das IP ist eine gute Approx. der Funktion f

I.5 Summierte Quadraturregeln

Um bessere Approximationen von $I[f]$ zu erhalten benutzt man i.A. eine gegebene QR nicht über das gesamte Intervall $[a,b]$. Sondern man zerteilt $[a,b]$ in eine Reihe kleinere Teil-Intervalle und wendet die QR auf diese an und summiert die so erhaltenen Näherungen für die Teil-Integrale. Die so erhaltenen Formeln nennt man summierte QR (SQR) oder zusammengesetzte QR.



TR auf jedem Teil-Intervall ~~~~ summierte TR (STR)

27.02.17

Das Intervall $I = [a,b]$ wird in N Teil-Intervalle $I_j = [x_{j-1}, x_j]$ $(j = 1, \dots, N)$ zerteilt mit

$$x_j = a + j \cdot h \ , \quad j = 0, 1, \dots, N$$

und

$$h = \frac{b-a}{N} .$$

Nun wendet man eine gegebene QR auf die Teil-Intervalle an und summiert

<u>Bsp.:</u> (10) <u>Summierte MR</u> (SMR)

$$Q_0^N[f] = \sum_{j=1}^{N} Q_0[f \text{ auf } I_j]$$

$$= \sum_{j=1}^{N} h \cdot f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right)$$

(11) <u>Summierte TR</u> (SMR)

$$Q_1^N[f] = \sum_{j=1}^{N} Q_1[f \text{ auf } I_j]$$

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

$$= \frac{h}{2} f(\underset{=a}{x_0}) + h \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{h}{2} f(\overset{=b}{x_N})$$

$$= \frac{h}{2}\left(f(a) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + f(b)\right)$$

(12) Summierte SR (SSR)

$$Q_2^N[f] = \sum_{j=1}^{N} Q_2[f \text{ auf } I_j]$$

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

$$= \frac{h}{6}\Bigg[f(a) + 2\cdot \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + 4\cdot \sum_{j=1}^{N} f\left(\frac{x_{j-1}+x_j}{2}\right) + f(b) \Bigg]$$

Wie verhält sich der QF von SQR_n?

Der QF einer SQR ist (offensichtlich) die Summe der gemachten Fehler auf jedem Teil-Intervall:

$$E^N[f] = \left| I[f] - Q_n^N[f] \right|$$

$$= \left| \sum_{j=1}^{N} I[f \text{ auf } I_j] - Q_n[f \text{ auf } I_j] \right|$$

Δ-Ungleichung (Dreiecks) $|a+b| \leq |a|+|b|$

$$\leq \sum_{j=1}^{N} \underbrace{\left| I[f \text{ auf } I_j] - Q_n[f \text{ auf } I_j] \right|}_{E[f \text{ auf } I_j]}$$

GG von Q_n!

$$\overset{(QF1)}{\leq} \sum_{j=1}^{N} \frac{\max_{x \in I_j} \left| f^{(q+1)}(x) \right|}{(q+1)!} \underbrace{|x_j - x_{j-1}|}_{h}^{q+2}$$

∞-Norm über $I=[a,b]$!

$$\leq \frac{\| f^{(q+1)} \|_\infty}{(q+1)!} h^{q+1} \underbrace{\sum_{j=1}^{N} h}_{N \cdot h = b-a}$$

Zusammengefasst

$$E^N[f] \leq \frac{\|f^{(q+1)}\|_\infty}{(q+1)!} \cdot (b-a) \cdot h^{\overset{\text{GG}}{q+1}} = \frac{\|f^{(s)}\|_\infty}{s!} \cdot (b-a) \cdot h^{\overset{\text{Ordnung}}{s}}$$

Solche Abschätzung sind typisch und dazu verwendet man das Landau-Symbol. Man schreibt:

$$e = \mathcal{O}(h^p)$$

Falls

$$|e| \leq c \cdot h^p$$

c & p hängen nicht von h ab!

für positive <u>Konstanten</u> c und p gilt für alle h > 0 klein genug.

Für den SQR Fehler gilt also

$$E^N[f] = \mathcal{O}(h^{q+1}) = \mathcal{O}(h^s).$$

<u>Bsp.:</u> (13) ⇝ Slides

<u>Bem.:</u> (i) Die Ordnung s kann man sehr einfach in einem log-log plot ablesen

(ii) Um die volle Ordnung zu erhalten muss die zu integrierende Funktion genügend glatt sein