Dr. R. Käppeli
P. Bansal

Lösung 3

1. *3-Punkte Gauss Quadraturregel*

a) Um das Polynom $P_3(x)$ zu berechnen, benutzen wir die Formel

$$P_{j+1}(x) = \frac{2j+1}{j+1} x P_j(x) - \frac{j}{j+1} P_{j-1}(x), \qquad j \geq 1.$$

Mit $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$ und $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$, erhalten wir für $j = 2$

$$P_3(x) = \frac{5}{3} x P_2(x) - \frac{2}{3} P_1(x) = \frac{5}{6}(3x^3 - x) - \frac{2}{3} x = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) = \frac{x}{2}(5x^2 - 3).$$

Die Nullstellen von $P_3(x)$ sind dann

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \qquad x_1 = 0, \qquad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Die Gewichte berechnen wir durch

$$\omega_k = \frac{2(1 - x_k^2)}{\left((j+1) P_j(x_k)\right)^2}, \qquad k = 0, 1, 2,$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= \frac{2(1 - x_0^2)}{\left(3P_2(x_0)\right)^2} = \frac{4}{45 P_2(x_0)^2} = \frac{4}{45} \frac{25}{4} = \frac{5}{9}, \\
\omega_1 &= \frac{2(1 - x_1^2)}{\left(3P_2(x_1)\right)^2} = \frac{2}{9 P_2(x_1)^2} = \frac{8}{9}, \\
\omega_2 &= \frac{2(1 - x_2^2)}{\left(3P_2(x_2)\right)^2} = \frac{4}{45 P_2(x_2)^2} = \frac{4}{45} \frac{25}{4} = \frac{5}{9}.
\end{aligned}$$

b) Um zu bestätigen, dass die 3-Punkte Gauss Quadraturregel die Ordnung 6 besitzt müssen wir folgendes überprüfen:

$$I\left[x^l\right] = G_2\left[x^l\right] \quad \text{für} \quad l = 0, \ldots, 5 \quad \text{und} \quad I[x^6] \neq G_2[x^6].$$

Wir berechnen $I\left[x^l\right] = \int_{-1}^{1} x^l dx = \frac{1-(-1)^{l+1}}{l+1}$ und erhalten

$$G_2[1] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j = \frac{5}{9} + \frac{8}{9} + \frac{5}{9} = 2, \qquad I\,[1] = 2 \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\,[x] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{1/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{1/2} = 0, \qquad I\,[x] = 0 \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\left[x^2\right] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j^2 = \frac{5}{9}\cdot\frac{3}{5} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\cdot\frac{3}{5} = \frac{2}{3}, \qquad I\left[x^2\right] = \frac{2}{3} \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\left[x^3\right] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j^3 = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} = 0, \quad I\left[x^3\right] = 0 \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\left[x^4\right] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j^4 = \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{2} = \frac{2}{5}, \qquad I\left[x^4\right] = \frac{2}{5} \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\left[x^5\right] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j^5 = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{5/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{5/2} = 0, \quad I\left[x^5\right] = 0 \Rightarrow \checkmark,$$

$$G_2\left[x^6\right] = \sum_{j=0}^{2} \omega_j x_j^6 = \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3} = \frac{6}{25}, \qquad I\left[x^6\right] = \frac{2}{7} \Rightarrow \text{✗}.$$

c) Auf dem Intervall $[a, b]$ sind die Punkte und Gewichte gegeben durch

$$\widetilde{x}_j = \frac{b-a}{2}x_j + \frac{a+b}{2}, \qquad \widetilde{\omega}_j = \frac{b-a}{2}\omega_j,$$

$$\widetilde{x}_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}\frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2}, \qquad \widetilde{\omega}_0 = \frac{5(b-a)}{18},$$

$$\widetilde{x}_1 = \frac{a+b}{2}, \qquad \widetilde{\omega}_1 = \frac{4(b-a)}{9},$$

$$\widetilde{x}_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}\frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2}, \qquad \widetilde{\omega}_2 = \frac{5(b-a)}{18}.$$

Für den Code, siehe `summ3punktgauss.m`.

d) Siehe `summbestimmeordnung.m`. Für f_1 konvergiert die summierte Quadraturregel mit Ordnung 6, wobei für f_2 nur mit beschränkte Ordnung 3.33. Das folgt aus mangelnder Glattheit der Funktion.

2. *Konvergenz*

Siehe `Konvergenz.m` und `Konvergenz_newcot.m`.

Siehe nächstes Blatt!

a) Für f_1 beobachtet man exponentielle Konvergenz mit $q = 0.00171$. Das ist das erwartete Verhalten da die Funktion glatt ist.

Die Funktionen f_2 und f_3 sind nicht glatt genug um exponentielle Konvergenz zu erhalten. Deshalb sieht man nur algebraische Konvergenz mit $\alpha \approx 2.5$.

b) In I_3, the integrand f_3 has a singularity at $x = +1$,

$$\frac{df_3}{dx}(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \xrightarrow{x \to +1} \infty.$$

As f_3 is not smooth, the integral I_3 converges algebraically, as observed in **a)**.

Mathematically, I_3 and I_4 are equivalent. However, we observe that the reformulated integral I_4 converges exponentially with $q = 0.005943$. The integrand function $y\cos(y)$ in I_4 is smooth, therefore, the exponential convergence of Gauss-Legendre quadrature is restored.

Remark: An appropriate formulation of the integrand can improve the performance of your quadrature approximation. However, it is not always possible to find a tranformation which removes singularities from the integrand.

c) In Abb. 1(a) wurde **b)** wiedeholt jedoch mittels Newton-Cotes Quadraturregeln. Wir beobachten, dass bei geringer Anzahl von Quadratur-Knoten der Quadraturfehler zunächst (wie zu erwarten ist) abnimmt. Jedoch gibt es einen Punkt, wo bei wachsender Anzahl von Quadratur-Knoten der Quadraturfehler massiv ansteigen kann.

Wie in der Vorlesung erwähnt sind Newton-Cotes Quadraturregeln mit $n+1$-Knoten praktisch unbrauchbar für $n \gtrsim 6$ da negative Gewichte auftreten. Dies hat auch damit zu tun, dass diese Quadraturregeln auf Interpolation mit äquidistanten Stützstellen/Knoten basieren. Da diese Wahl der Stützstellen/Knoten nicht unbedingt eine gute Approximation liefert (s. Aufgabe 3 aus Serie 1!) ist intuitiv klar, dass es für grosse n zu Problemen kommen kann.

Da alle Rechnungen auf dem Computer fehlerbehaftet sind (endliche Genauigkeit der Fliesskommazahlen führen auf sog. Rundungsfehler!) wollen wir uns überlegen was dies für die Quadratur bedeutet. Sei also $\tilde{f}(x)$ die fehlerbehaftete Auswertung der Funktion $f(x)$

$$\tilde{f}(x) = f(x) + \varepsilon(x)$$

wobei $\varepsilon(x)$ diesen Fehler bezeichne. Beachte, dass er i.A. von x abhängen kann. Der Quadraturfehler hat nun folgende Form

$$\tilde{E}_n[f] = I[f] - Q_n[\tilde{f}]$$

Bitte wenden!

wobei zu beachten ist, dass in die Quadraturregel die fehlerbehaftete Funktion $\tilde{f}(x)$ eingeht. Dies untersuchen wir nun wie folgt etwas genauer

$$\begin{aligned}\tilde{E}_n[f] &= I[f] - Q_n[\tilde{f}]\\ &= I[f] - Q_n[f+\varepsilon]\\ &= \underbrace{I[f] - Q_n[f]}_{E_n[f]} + \underbrace{Q_n[\varepsilon]}_{R_n[f]}.\end{aligned}$$

Hier ist nun der Term $E_n[f]$ der "übliche" Quadraturfehler wenn f exakt ausgewertet wird und Term $R_n[f]$ der neue Anteil wegen den Rundungsfehlern, d.h. die fehlerbehaftete Auswertung von f.

Den neuen Term können wir nun wie folgt abschätzen

$$\begin{aligned}|R_n[f]| &= |Q_n[\varepsilon]|\\ &= \left|\sum_{j=0}^{n} \omega_j \varepsilon_j\right|\\ &\leq \varepsilon \left|\sum_{j=0}^{n} \omega_j\right|\\ &\leq \varepsilon \sum_{j=0}^{n} |\omega_j|\end{aligned}$$

wobei wir in der zweiten Zeile berücksichtigt haben, dass der Fehler $\varepsilon_j = \varepsilon(x_j)$ für jeden Quadratur-Knoten verschieden sein kann. In der dritten Zeile nehmen wir an, dass diese ε_j begrentzt sind durch ein gewisses ε mit $|\varepsilon_j| \leq \varepsilon$ für $j = 0, ..., n$. Zum Schluss haben wir in der letzten Zeile die Dreiecksungleichung verwendet.

Weiter wissen wir, dass Newton-Cotes Quadraturregeln einen Genauigkeitsgrad von (mindestens) n haben und damit auch die Konstante Funktion $f(x) = 1$ exakt integrieren, also:

$$\int_a^b 1dx = Q_n[1] = \sum_{j=0}^{n} \omega_j = b - a.$$

Sind die Quadratur-Gewichte nun alle positiv, so ist

$$\sum_{j=0}^{n} |\omega_j| = \sum_{j=0}^{n} \omega_j = b - a$$

und damit erhalten wir für $|R_n[f]|$ folgenden Ausdruck

$$|R_n[f]| \leq \varepsilon(b - a).$$

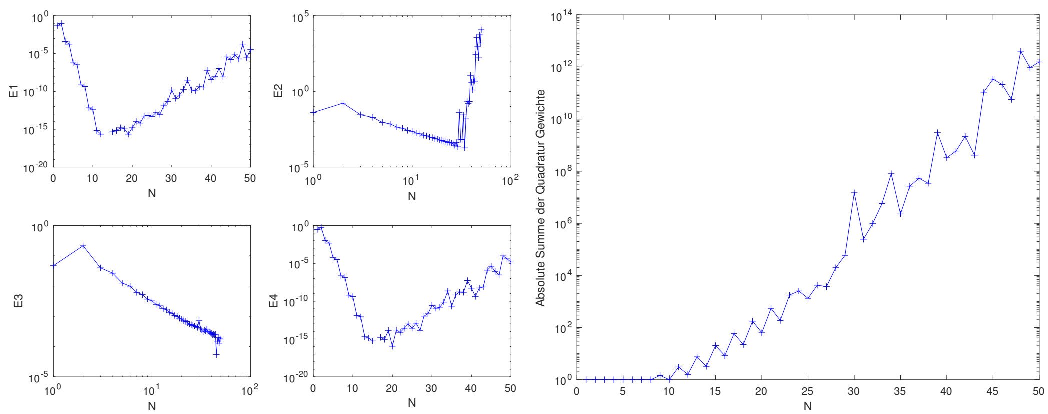
Siehe nächstes Blatt!

Dies bedeutet: *Sind alle Quadratur-Gewichte positiv, so ist der Fehler wegen der fehlerbehafteten Auswertung der Funktion f beschränkt durch ε.*

Anderseits, sind die Quadratur-Gewichte nicht alle positiv, so gilt

$$\sum_{j=0}^{n} |\omega_j| > \left| \sum_{j=0}^{n} \omega_j \right| = b - a$$

und damit kann der maximale gemachte Fehler ε bei der Auswertung von f durch den Faktor $\sum_{j=0}^{n} |\omega_j|$ verstärkt werden! Dies ist illustriert in Abb. 1(b) wo dieser Faktor für Newton-Cotes Quadraturregeln bis $n = 50$ gezeigt wird.



(a) (b)

Abbildung 1: Fehler (links) und absolute Summe der Quadratur-Gewichte (rechts) für Newton-Cotes Quadraturregeln.

3. a) Wir müssen nur die Gewichte der 1D-Gauss-Legendre Quadratur mit $n = 2$ in der richtigen Reihenfolge multiplizieren, und Vektoren von Knoten mit der gleichen Folge basteln. Eine Möglichkeit ist

(i,j)	$(0,0)$	$(0,1)$	$(0,2)$	$(1,0)$	$(1,1)$	$(1,2)$	$(2,0)$	$(2,1)$	$(2,2)$
$\widehat{w}_{i,j}$	$\frac{25}{81}$	$\frac{40}{81}$	$\frac{25}{81}$	$\frac{40}{81}$	$\frac{64}{81}$	$\frac{40}{81}$	$\frac{25}{81}$	$\frac{40}{81}$	$\frac{25}{81}$
$\mathbf{x}_{i,j}$	$\binom{-a}{-a}$	$\binom{-a}{0}$	$\binom{-a}{a}$	$\binom{0}{-a}$	$\binom{0}{0}$	$\binom{0}{a}$	$\binom{a}{-a}$	$\binom{a}{0}$	$\binom{a}{a}$

wobei $a = \sqrt{3/5}$.

b) Es gilt

$$\int_0^2 \int_0^1 f(x,y)\,dx\,dy = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{x}{2} + \frac{1}{2}, y+1\right)\,dx\,dy\,.$$

Bitte wenden!

Es folgt, dass die Gewichte mit $1/2$ multipliziert werden, und dass die Knoten durch die Abbildung $T(x,y) = (x/2 + 1/2, y + 1)$ skaliert und verschoben werden. Wir erhalten

(i,j)	$(0,0)$	$(0,1)$	$(0,2)$	$(1,0)$	$(1,1)$	$(1,2)$
$\tilde{w}_{i,j}$	$\frac{25}{162}$	$\frac{40}{162}$	$\frac{25}{162}$	$\frac{40}{162}$	$\frac{64}{162}$	$\frac{40}{162}$
$\mathbf{x}_{i,j}$	$\binom{-a/2+1/2}{-a+1}$	$\binom{-a/2+1/2}{1}$	$\binom{-a/2+1/2}{a+1}$	$\binom{1/2}{-a+1}$	$\binom{1/2}{1}$	$\binom{1/2}{a+1}$

(i,j)	$(2,0)$	$(2,1)$	$(2,2)$
$\tilde{w}_{i,j}$	$\frac{25}{162}$	$\frac{40}{162}$	$\frac{25}{162}$
$\mathbf{x}_{i,j}$	$\binom{a/2+1/2}{-a+1}$	$\binom{a/2+1/2}{1}$	$\binom{a/2+1/2}{a+1}$

wobei $a = \sqrt{3/5}$.