I. Numerische Quadratur

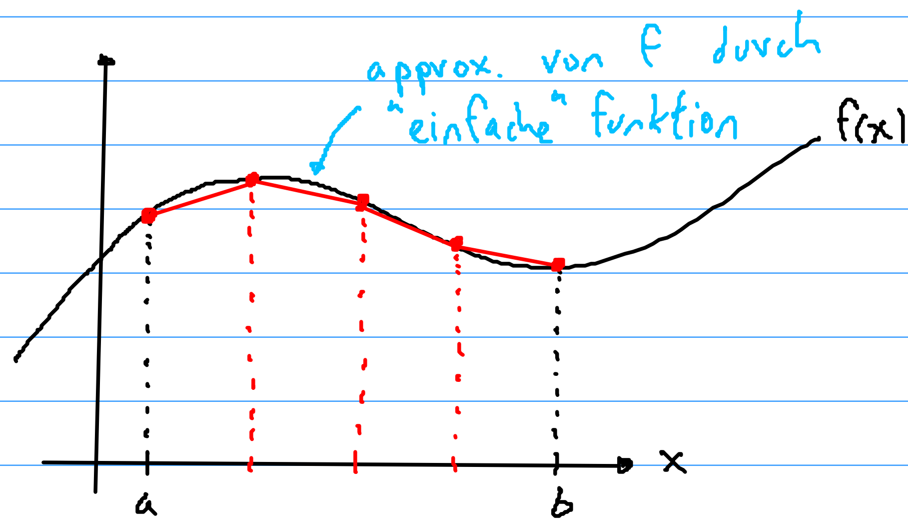
<u>Ziele:</u>
- approximieren von bestimmten Integralen

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

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

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

<u>Idee:</u>



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

I.1 Polynomiale Interpolation

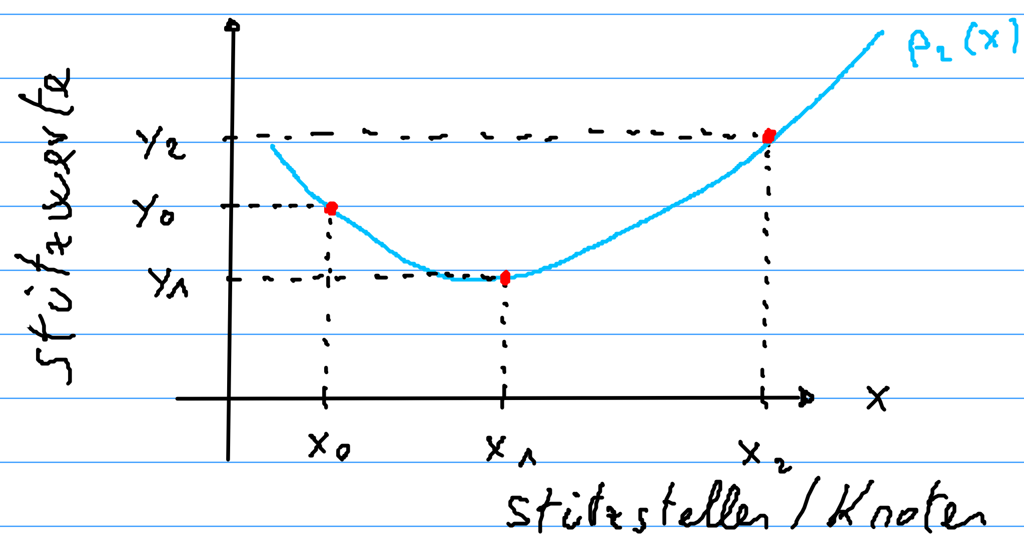
Gegeben $n+1$ paarweise verschiedene Stützstellen / Knoten $x_0, x_1, \ldots, x_n$ und zugehörige Stützwerte $y_0, y_1, \ldots, y_n$ finde das Polynom n-ten Grades

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

welches die Interpolationsbedingungen (IB) erfüllt

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

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



Bsp.: (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:

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

$$= 0 + \dots + 0 + y_i \cdot \underbrace{L_i^n(x_i)}_{1} + 0 + \dots$$

$$= y_i \; \checkmark$$

<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

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

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

$\left(\equiv \text{Bsp. (1)} \checkmark. \right)$

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.

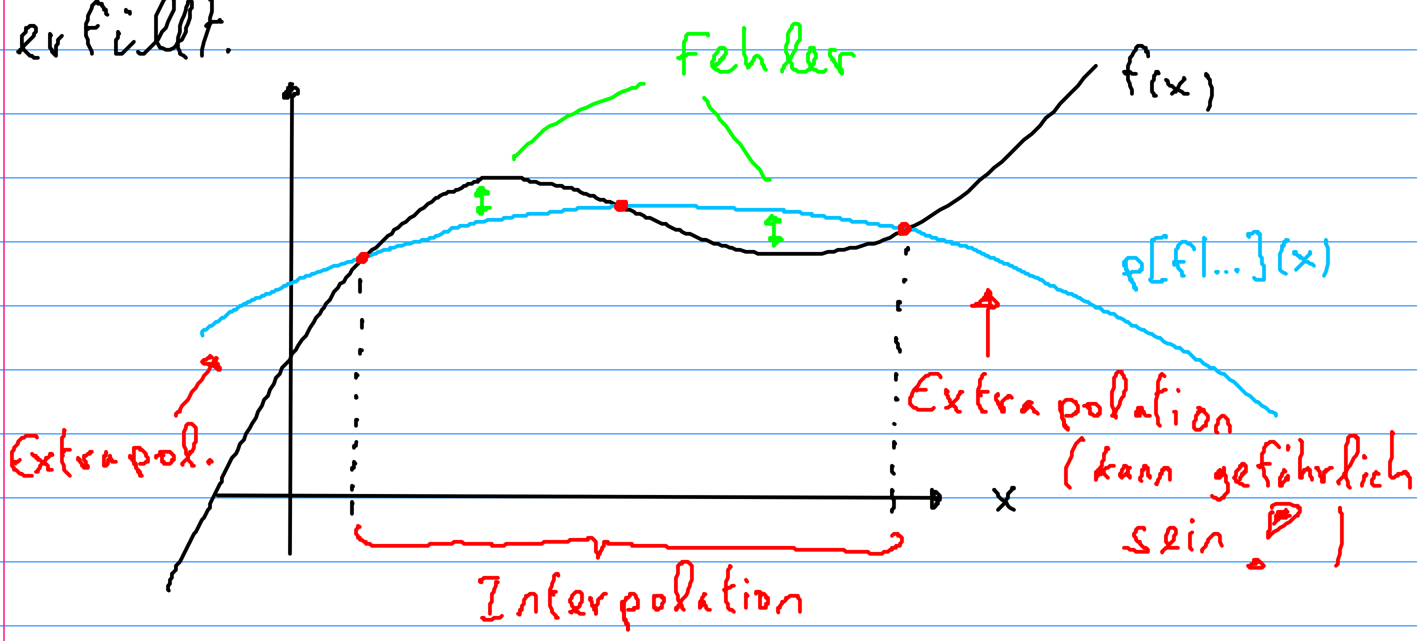
Sei also $f: I = [a,b] \to \mathbb{R}$ und wir bezeichnen mit

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

das IP welches die IB

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

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!

(n+1)-te Ableitung

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

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

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

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

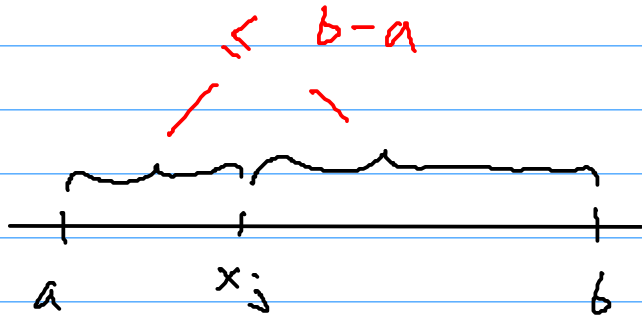
$$\leq \max_{x\in I} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \right| \cdot \max_{x\in I} \left| \prod_{j=0}^{n}(x-x_j) \right|$$

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 $p[f|x_0,\dots,x_n]$

(... 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 <u>Quadraturregel</u> (QR) oder <u>Quadraturformel</u>.
Die $x_j \in I = [a,b]$ nennt man <u>(Quadratur) Knoten</u> oder <u>Integrationsstützstellen</u> und die w_j <u>(Quadratur) Gewichte</u>.

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

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

Da das IP die Funktion approx., so gilt

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_a^b p[f|x_0,\dots,x_n](x)\,dx \\
&= \int_a^b \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\cdot L_j^n(x)\,dx \\
&= \sum_{j=0}^{n} \int_a^b \underbrace{f(x_j)}_{\text{Konstant!}}\, L_j^n(x)\,dx \\
&= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_a^b L_j^n(x)\,dx \\
&= \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\cdot w_j = Q_n[f]
\end{aligned}$$

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.

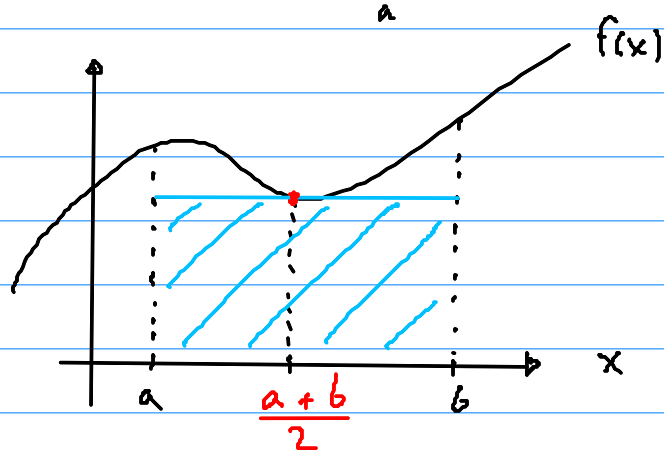
Wichtige Beispiele ...

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

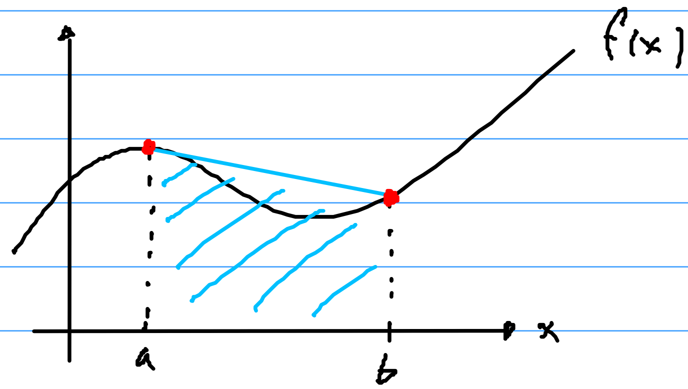
$$L_1^1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

Gewichte: $w_0 = \displaystyle\int_a^b L_0^1(x)\,dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,dx$

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

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

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



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

$L_1^2(x) = \ldots$

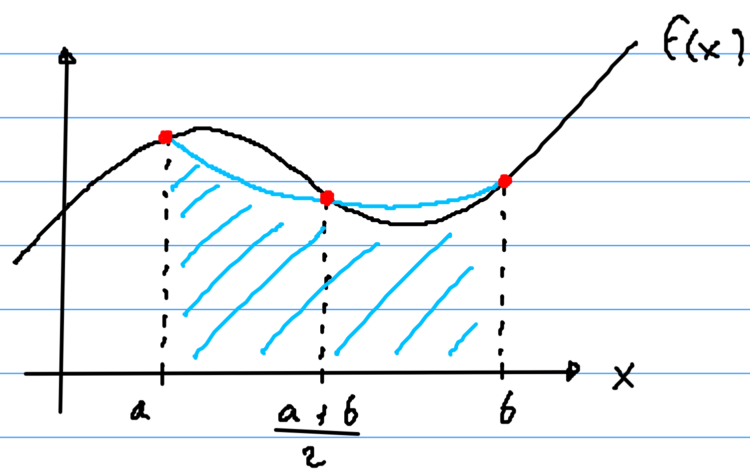
$L_2^2(x) = \ldots$

Übung

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

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

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



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

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

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

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

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

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

$Q[p] = \dots \sim$ 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:

$$\begin{aligned} I[f] &= \int_a^b f(x)\, dx \\ &= \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \right) \underbrace{\frac{b-a}{2}\, dt}_{dx} \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \right) dt \end{aligned}$$

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)

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

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

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

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

$$\leadsto \quad \text{GG} \quad g = 1 = n + 1$$

(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)

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

$$Q_2[1] = \dots$$

$\vdots$ Übung

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

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

Für den QF lässt sich zeigen

$$E[f] \leq \frac{\| f^{(q+1)} \|_\infty}{(q+1)!} (b-a)^{q+2} \qquad (\text{QF1})$$

s, s, $s+1$ – Ordnung

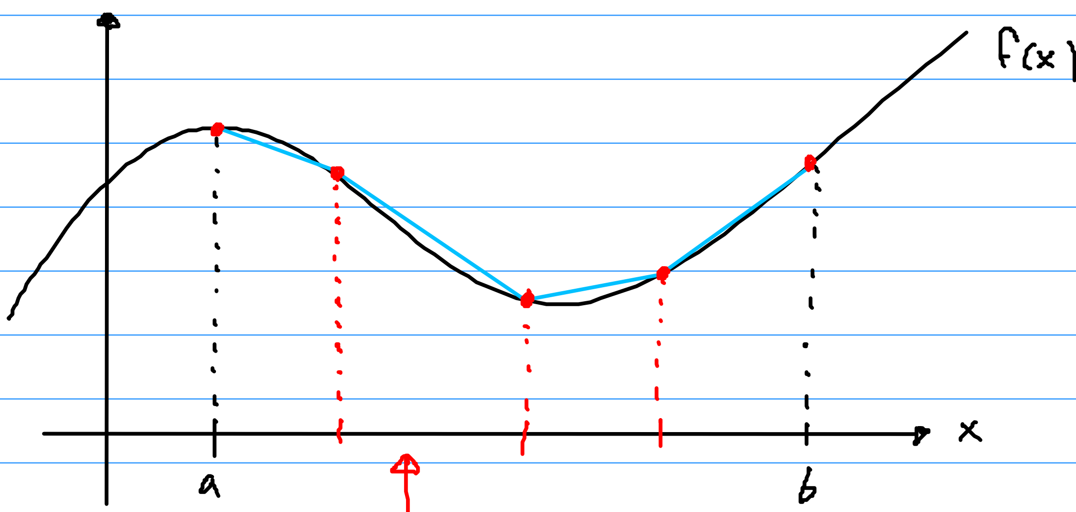
GG

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

Zusammengefasst: Je grösser der GG, desto genauer ist eine 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
~~und~~ summierte TR (STR)

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)

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

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

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

25.02.19

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

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

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

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

Falls

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

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) $\rightsquigarrow$ Slides

Bem.: (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

I.6 Gauss-Quadratur

Bei den NC QR_n wählt man $n+1$ äquidistant verteilte Knoten, legt das IP vom Grad n durch und erhält damit eine QR mit GG mindestens n (n / $n+1$ falls n ungerade/gerade).

Idee: wähle die $n+1$ Knoten so, dass der grösstmögliche GG erreicht wird (Hoffnung: GG mit $q \approx \underbrace{n}_{\text{vom IP } n\text{-ten Grades}} + \underbrace{n+1}_{\text{von den } x_j\text{'s}} = 2n+1$)

Frage: Was ist der grösstmögliche GG den man mit $n+1$ Knoten erreichen könnte?

Betrachte folgendes Polynom vom Grad $2n+2$ auf dem RI:

$$p(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - \underset{\nwarrow \text{Knoten}}{x_i})^2 \in \mathbb{P}_{2n+2}$$

Klar: $I[p] = \int_{-1}^{1} p(x)\,dx > 0$

Aber mit Quadratur

$\neq$

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

Also der grösstmögliche GG den man erreichen könnte ist $q = 2n+1$!

Diesen GG kann man auch erreichen und man stosst dabei auf einen wichtigen Begriff der linearen Algebra:

Orthogonalität

Betrachten wir hierzu den Interpolationsfehler

$$e(x) = f(x) - p[f \mid x_0, \dots, x_n] = K(x) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Sei nun $f(x) = x^m$ ein Monom mit $m \geq 0$ ganzzahlig. Dann ist

$$e(x) = \underbrace{x^m}_{\text{Polynom Grad } m} - \underbrace{p[x^m \mid x_0, \dots, x_n]}_{\text{Polynom Grad } n} = \underbrace{K(x)}_{\text{Polynom Grad } \max\{m-n-1,\, 0\}} \cdot \underbrace{\prod_{i=0}^{n} (x - x_i)}_{\text{Polynom Grad } n+1}$$

mit

$$K(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } m \leq n \\ r(x) \in \mathbb{P}_{m-n-1} & \text{für } m > n \end{cases}$$

Integrieren wir nun $e(x)$ über das RI:

$$\int_{-1}^{1} e(x)\,dx = \int_{-1}^{1} x^m\,dx - \int_{-1}^{1} p[x^m | x_0, \dots, x_n]\,dx$$

$$= I[x^m] - Q[x^m]$$

$$= \int_{-1}^{1} K(x) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\,dx$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } m \leq n \\ \int_{-1}^{1} r(x) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\,dx & \text{für } m > n \end{cases}$$

Dies bestätigt uns nocheinmal, dass eine QR mit $n+1$ Knoten GG von n hat.
Aber viel mehr noch: Wenn wir $n+1$ Knoten mit

$$\int_{-1}^{1} \underbrace{r(x)}_{\in \mathbb{P}_n} \cdot \underbrace{\prod_{i=0}^{n} (x - x_i)}_{\in \mathbb{P}_{n+1}}\,dx \overset{!}{=} 0$$

für $n < m < 2n+2$ bestimmen können, so erhalten wir ein QR mit grösstmöglichen GG!

Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^{1} f(x)\, g(x)\, dx$$

Menge der stetigen Funktion in $[-1,1]$

ein Skalarprodukt in $C[-1,1]$ definiert.
Wenn $\langle f, g \rangle = 0$, so sind f und g orthogonal zueinander.
Also

Polynome!

$$\langle r(x), \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \rangle = 0$$

sagt uns wir suchen <u>Orthogonalpolynome</u>!
Dies führt uns zu den <u>Legendre-Polynomen</u> welche durch folgende Rekursions-formel gegeben sind

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x$$

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

Die $P_j(x)$, $(j=0,1,\dots,n)$ bilden eine orthogonale Basis von $\mathbb{P}_n$:

$$\langle P_i(x), P_j(x) \rangle = \int_{-1}^{1} P_i(x) \cdot P_j(x) \, dx = 0 \,, \quad i \neq j$$

Um den maximalen GG zu erhalten wählen wir die $n+1$ Knoten so, dass

$$\prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \sim P_{n+1}(x)$$

ein (skalares) vielfaches vom $(n+1)$-ten Legendre-Polynom ist

$\rightsquigarrow$ Wähle die Knoten x_i als die Nullstellen von $P_{n+1}(x)$!

Gauss(-Legendre) Quadratur

Die $(n+1)$-Punkte Gauss(-Legendre) Quadratur (GLQ) auf dem RI $[-1, 1]$ ist gegeben durch:

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

wobei die Gauss-Punkte x_j die Nullstellen des $(n+1)$-ten Legendre-Polynoms $P_{n+1}(x)$ und die Gewichte

$$w_j = \frac{2(1-x_j^2)}{\left((n+1)\,P_n(x_j)\right)^2}, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

sind.

Sie hat den grösstmöglichen GG $q = 2n+1$ und damit Ordnung $s = 2n+2$.

Bsp.: (14) 2-Punkte GLQ $(n=1)$

① Berechne $P_{n+1}(x) = P_2(x)$ mit Rekursionsformel

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

② Berechne Nullstellen von $P_2(x)$

$$\frac{1}{2}(3x^2 - 1) \overset{!}{=} 0$$

$$x_{0,1} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}$$

③ Berechne Gewichte

$$w_0 = \frac{2(1 - x_0^2)}{(2 \cdot P_1(x_0))^2} = \frac{2(1 - 1/3)}{\left(2 \cdot \left(-1/\sqrt{3}\right)\right)^2}$$

$$= \frac{\cancel{2}\overbrace{(1 - 1/3)}^{2/3}}{\cancel{4}_{2} \cdot \frac{1}{3}} = 1$$

$$w_1 = 1$$

Also $\quad G_1[f] = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

<u>Bem.:</u> (i) Die Gewichte bei GLQ sind stets positiv

(ii) Für n "nicht zu gross" sind die GLQ tabelliert

Für grosse n werden die GLQ numerische bestimmt (z.B. wie in Übung S03 ⇝ gauleg.m)

(iii) Es gilt stets: hohe Ordnung bedeutet nicht zwingend hohe Genauigkeit!

Die gilt nur wenn f glatt genug ist.

(iv) Allgemeiner betrachtet man

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

wobei $w(x)$ eine nichtnegative Gewichts-Funktion ist:

- $w(x) = 1$ ⇝ Gauss-Legendre
- $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ ⇝ Gauss-Tschebyscheff
- $w(x) = e^{-x^2}$ ⇝ Gauss-Hermite

...

04.03.19

(v) Manchmal beginnt der Summationsindex bei 1

$$G[f] = \sum_{j=1}^{n} w_j \cdot f(x_j)$$

Dann ist GG $q = 2n-1$ und die Ordnung $s = 2n$

I.7 Adaptive Quadratur

Ziel: Berechne

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

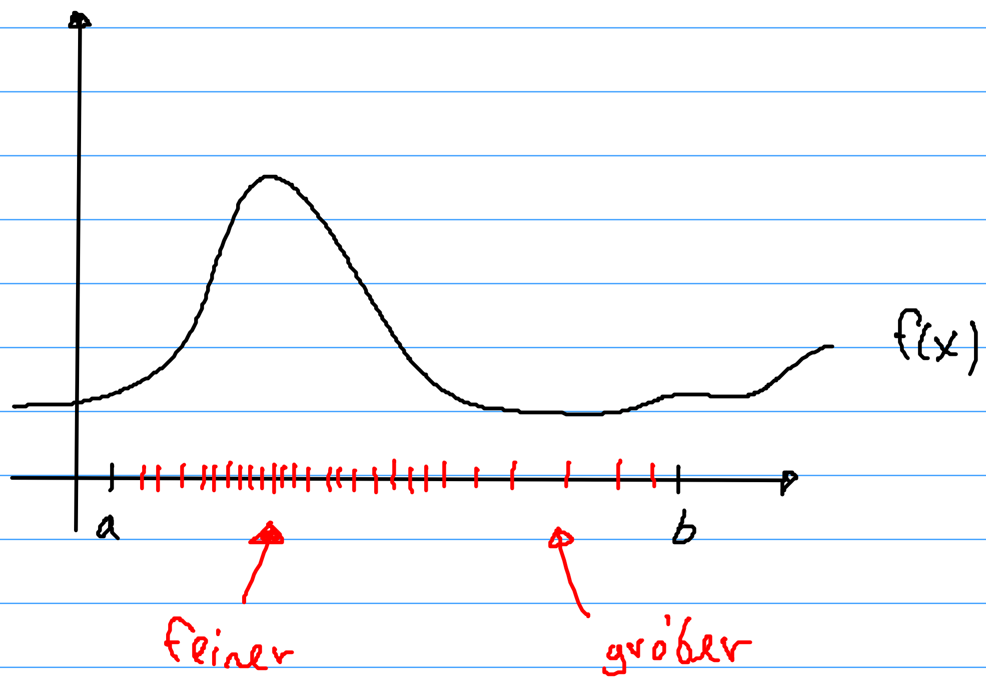
bis auf eine vorgegebene Toleranz

$$|Q[f] - I[f]| < tol$$

so effizient wie möglich

d.h. mit so wenig Funktion-Auswertungen wie möglich

<u>Idee</u>: Anstatt das Intervall $I = [a,b]$ in gleich grosse Teil-Intervalle aufzuteilen, verwende feinere oder gröbere Teil-Intervalle je nachdem wie stark die Funktion $f(x)$ variiert, oder äquivalent, wo der QF gross ist:



Dazu benötigen wir eine Schätzung des Fehlers.

Idee: Vergleiche das Resultat einer Methode mit dem Resultat einer genaueren Methode

Bsp.: (15) $I[e^x] = \int_0^1 e^x\,dx = e - 1 = 1.71828\ldots$

$$TR: Q_1[e^x] = \frac{1}{2}\left(e^0 + e^1\right) = 1.85914\ldots$$

$$SR: Q_2[e^x] = \frac{1}{6}\left(e^0 + 4\cdot e^{1/2} + e^1\right) = 1.71886\ldots$$

$$STR: Q_1^2[e^x] = \frac{1/2}{2}\left(e^0 + 2\cdot e^{1/2} + e^1\right) = 1.75393\ldots$$

Exakter Fehler : $\left|Q_1[e^x] - I[e^x]\right| = 0.14085\ldots$

Schätzung 1 : $\left|Q_1[e^x] - Q_2[e^x]\right| = 0.14027\ldots$

Schätzung 2 : $\left|Q_1[e^x] - Q_1^2[e^x]\right| = 0.10520\ldots$

Bsp. (15) zeigt, dass obige einfache Idee durchaus brauchbare Fehler-Schätzer liefert.

Untersuchen wir theoretisch die Schätzung 2, d.h. der Vergleich einer QR mit derselben QR aber mit halbierter Teil-Intervall Länge, sog. Intervall-halbierungs Fehler-Schätzer.

Betrachten wir hierzu ein Intervall $I = [a,b]$ und den QF einer QR der Ordnung s

$$\epsilon[f] = \big|Q[f] - I[f]\big| \overset{(QF1)}{\leq} \frac{\|f^{(s)}\|_\infty}{s!}(b-a)^{s+1} = K\cdot(b-a)^{s+1}$$

Dies nennt man einen a priori Fehler-Schätzer. Dieser ist natürlich nur brauchbar, wenn $\|f^{(s)}\|_\infty$ bzw. K bekannt ist (was i.A. natürlich nicht der Fall ist!).

Für den QF gilt also:

$$\epsilon^1[f] = |Q^1[f] - I[f]| \approx K\cdot(b-a)^{s+1}$$

$$\epsilon^2[f] = |Q^2[f] - I[f]| \approx K\cdot\left(\frac{b-a}{2}\right)^{s+1} + K\left(\frac{b-a}{2}\right)^{s+1}$$

Fehler auf halben Teil-Int.

$$= \frac{K}{2^s}(b-a)^{s+1} = \frac{\epsilon^1[f]}{2^s}$$

Nun

$$\epsilon^1[f] = \Big| Q^1[f] \underbrace{- Q^2[f] + Q^2[f]}^{+\,0 \text{ Trick!}} - I[f] \Big|$$

$$\overset{\Delta\text{-UG}}{\leq} \Big| Q^1[f] - Q^2[f] \Big| + \underbrace{\Big| Q^2[f] - I[f] \Big|}_{\approx \frac{\epsilon^1[f]}{2^s}}$$

$$\leadsto \quad \epsilon^1[f] \approx \frac{2^s}{2^s - 1} \Big| Q^1[f] - Q^2[f] \Big|$$

und

$$\epsilon^2[f] \approx \frac{1}{2^s - 1} \Big| Q^1[f] - Q^2[f] \Big|$$

Dies sind sog. <u>a posteriori</u> Fehler-Schätzer.

<u>Bsp.:</u> (16) TR hat Ordnung $s = 2$ und es ergibt sich für Zahlen aus Bsp. (15) (Schätzung 2):

$$\Big| Q_1[e^x] - I[e^x] \Big| = 0.14085\ldots$$
$$\approx \frac{2^2}{2^2 - 1} \cdot 0.10520\ldots$$
$$= 0.1402\ldots \quad \checkmark$$

$$\left| Q_1^2[e^x] - I[e^x] \right| = 0.0356\ldots$$
$$\approx \frac{1}{2^2-1} \cdot 0.10520\ldots$$
$$= 0.0350\ldots \quad \checkmark$$

Nun haben wir alles zur Hand um einen adaptiven Quadratur Algorithmus zu bauen!

<u>Adaptive Quadratur</u> (~ Pseudo-MATLAB-Code)

Toleranz

```
function Q = adapt_quad(f, a, b, tol)
           fehler-Schätzer
  if   E  <  tol
      Q = quad(f, a, b)
               zugrundeliegende QR
  else
      Q1 = adapt_quad(f, a, (a+b)/2, tol/2)
REKURSIV!
      Q2 = adapt_quad(f, (a+b)/2, b, tol/2)
      Q = Q1 + Q2
                                     halbiere
  end                 Fehler-Toleranz, da nun
                      halbiertes Int.-Intervall!
```

Bsp.: (17) Adaptive Simpson Quadratur

$\rightsquigarrow$ Slides

Bem.: (i) Adaptive Quadratur kann oft sehr effizient Integrale approximieren

(ii) Adaptive Quadratur kann auch schief gehen!

(iii) In MATLAB gibt es die Befehle quad und integral

I.8 Zwei-dimensionale Quadratur

Bis jetzt haben wir nur ein-dimensionale Quadratur behandelt. Diese simplen Methoden kann man relativ einfach auf zwei oder drei Dimensionen verallgemeinern (im Prinzip auch mehr, aber dann wird es sehr schnell sehr teuer!).

In zwei Dimensionen:

$$I[f] = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\, dx\, dy$$

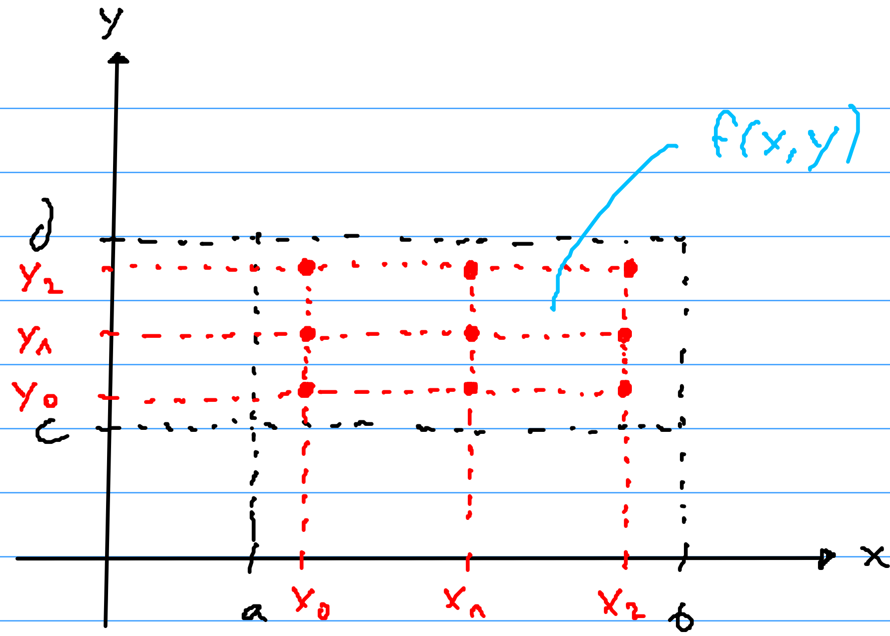
$$\approx \sum_{i=0}^{n} w_i^x \cdot \int_c^d f(x_i, y)\, dy$$

Gewichte & Knoten in x-Koordinate

$$\approx \sum_{i=0}^{n} w_i^x \sum_{j=0}^{m} w_j^y \cdot f(x_i, y_j)$$

Gewichte & Knoten in y-Koord.

$$= \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} w_i^x \cdot w_j^y \cdot f(x_i, y_j)$$



Dies kann man auch einfach auf den Fall variabler Grenzen verallgemeinern:

$$I[f] = \int_a^b \int_{\phi_1(x)}^{\phi_2(x)} f(x,y)\, dx\, dy$$

Hier gab es einen Fehler... Es stand

$$\int_a^b \int_{\phi_1(y)}^{\phi_2(y)} f(x,y)\, dx\, dy$$

was keinen Sinn macht!

11.03.19