Dr. R. Käppeli
L. Rueff

Lösung 3

1. *Konvergenzordnung summierter Quadraturregeln*

a) Siehe `summtrapezregel.m`.

b) Siehe `summsimpsonregel.m`.

c) Siehe `summ2punktgauss.m`.

d) Siehe `summbestimmeordnung.m`.

e) Gegeben sei eine summierte Quadraturregel (SQR) $Q^N[f]$ basierend auf einer Quadraturregel (QR) der Ordnung s (d.h. einen Genauigkeitsgrad $q = s - 1$). In der Vorlesung haben wir gesehen, dass falls der Integrand f glatt genug ist, konvergiert die SQR mit Ordnung s, d.h.

$$E^N[f] = \big|I[f] - Q^N[f]\big| \leq \frac{\|f^{(s)}\|_\infty}{s!}(b-a)h^s.$$

In unserem Fall besitzt also die summierte Trapezregel $Q_1^N[f]$ Ordnung $s = 2$, die Simsponregel $Q_2^N[f]$ Ordnung $s = 4$, und die 2-Punkte Gauss Quadraturregel $G_1^N[f]$ Ordnung $s = 4$.

In der folgenden Tabelle, zeigen wir die beobachtete Konvergenzordnungen für die verschiedenen Funktionen und summierten Quadraturregeln.

	$Q_1^N[f]$ $(s=2)$	$Q_2^N[f]$ $(s=4)$	$G_1^N[f]$ $(s=4)$
f_1	2.00	4.00	4.00
f_2	1.46	1.50	1.50
f_3	2.00	3.43	3.43
f_4	-	-	-

Die Funktion $f_1 = x^5$ ist ein einfaches Polynomom 5. Grades und damit beliebig glatt (formal $f_1 \in C^\infty[a,b]$, d.h. unendlich mal stetig differenzierbar). Deshalb erwaten wir, dass das wir die volle Ordnung der gegebenen summierten Quadraturregel beobachten. Dies ist auch der Fall in der Tabelle.

Die Funktion $f_2 = \sqrt{x-a}$ ist nicht glatt bei $x = a$ (formal $f_2 \in C^0[a,b]$ weil die Ableitung bei $x = a$ eine Singularität aufweist). Deshalb erwaten wir, dass wir *nicht* die volle Ordnung der gegebenen summierten Quadraturregel beobachten. Dies ist auch der Fall in der Tabelle.

Die Funktion $f_3 = (x-a)^{5/2}$ ist nicht ganz glatt bei $x = a$ (formal $f_3 \in C^2[a, b]$ weil die dritte Ableitung bei $x = a$ eine Singularität aufweist). Deshalb erwarten wir die volle Ordnung für $Q_1^N[f]$, aber nicht für $Q_2^N[f]$ und $G_1^N[f]$. Dies ist auch der Fall in der Tabelle.

Die beobachtete Konvergenzordnung für die in `f_4.m` definierte Funktion ist nicht obigem Begriff der Ordnung messbar. Tatsächlich beobachtet man in diesem Fall exponentielle Konvergenz. Der Unterschied zwischen sog. algebraischer (wie bis anhin) und sog. exponentielle Konvergenz wird in einer späteren Aufgabe diskutiert. Diese verbesserte Konvergenz ist eine Konsequenz der Perriodizität von der Funktion f_4. Wir werden dies aber nicht weiter in der Vorlesung diskutieren.

f) Auf jedem Teilintervall wertet die Trapezregel die Funktion zweimal aus. Wir können es jedoch besser machen. Da die Quadraturegel nur die Endpunkte benutzt, können wir die inneren Gitterpunkte nur einmal auswerten. Wir erhalten dann $(N-1)+2 = N+1$ Funktionsauswertungen für die summierte Trapezregel.

Die summierte Simpsonregel benutzt 3 punkte in jedem Teilintervall aber die Situation ist ähnlich wie bei der Trapezregel. Nur die Mittelpunkte (in jedem Teilintervall) können nicht zweimal benutzt werden. In diesem Fall erhalten wir dann $(N+1) + N = 2N + 1$ Funktionsauswertungen.

Für die summierte 2-Punkte Gauss Quadraturformel gibt es auch 2 Punkte in jedem Teilintervall aber in dieser Situation können wir nichts verbessern und wir erhalten $2N$.

2. *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

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

Siehe nächstes Blatt!

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
G_2[1] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j = \frac{5}{9}+\frac{8}{9}+\frac{5}{9} = 2, & I[1] &= 2 \Rightarrow ✓,\\
G_2[x] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{1/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{1/2} = 0, & I[x] &= 0 \Rightarrow ✓,\\
G_2\left[x^2\right] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j^2 = \frac{5}{9}\cdot\frac{3}{5} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\cdot\frac{3}{5} = \frac{2}{3}, & I\left[x^2\right] &= \frac{2}{3} \Rightarrow ✓,\\
G_2\left[x^3\right] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j^3 = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} = 0, & I\left[x^3\right] &= 0 \Rightarrow ✓,\\
G_2\left[x^4\right] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j^4 = \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{2} = \frac{2}{5}, & I\left[x^4\right] &= \frac{2}{5} \Rightarrow ✓,\\
G_2\left[x^5\right] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j^5 = -\frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{5/2} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{5/2} = 0, & I\left[x^5\right] &= 0 \Rightarrow ✓,\\
G_2\left[x^6\right] &= \sum_{j=0}^{2}\omega_j x_j^6 = \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3} + \frac{8}{9}\cdot 0 + \frac{5}{9}\left(\frac{3}{5}\right)^{3} = \frac{6}{25}, & I\left[x^6\right] &= \frac{2}{7} \Rightarrow ✗.
\end{aligned}$$

c) Zuerst transforimieren wir die Knoten und Gewichte auf das Intervall $[a,b]$ wie folgt

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

Bitte wenden!

Also erhalten wir für die die Knoten

$$\widetilde{x}_1 = \frac{a+b}{2},\ \widetilde{x}_{0,1} = \mp\sqrt{\frac{3}{5}}\frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2}$$

und für die Gweichte

$$\widetilde{\omega}_1 = \frac{4(b-a)}{9},\ \widetilde{\omega}_{0,2} = \frac{5(b-a)}{18}$$

Für den Code, siehe `summ3punktgauss.m`.

d) Siehe `summbestimmeordnung.m`. Für die glatte Funktion f_1 konvergiert die summierte Quadraturregel mit voller Ordnung 6 Für die weniger glatten Funktionen f_2 und f_3 beobachten wir auch hier eine Reduktion der Ordnung.

3. *Gauss Knoten Verteilung*

Man beobachtet in Abb. 1, dass die Gauss-Knoten nicht äquidistant im Referenz-Intervall verteilt sind: Sie sind dichter an den Intervall-Enden.

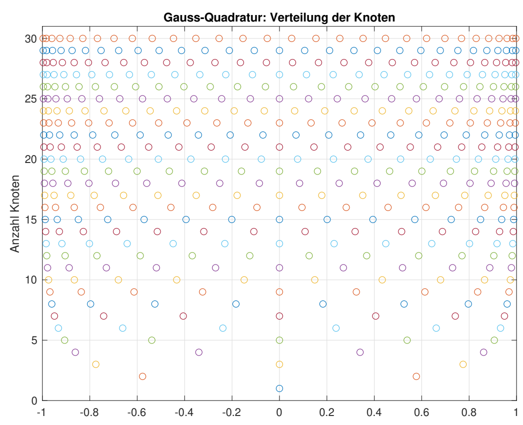


Abbildung 1: Verteilung der Gauss Quadratur Knoten im Referenz-Intervall.

4. *Konvergenz*

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

a) Siehe Abb. 2. 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 $\alpha \approx 2.5$.

Siehe nächstes Blatt!

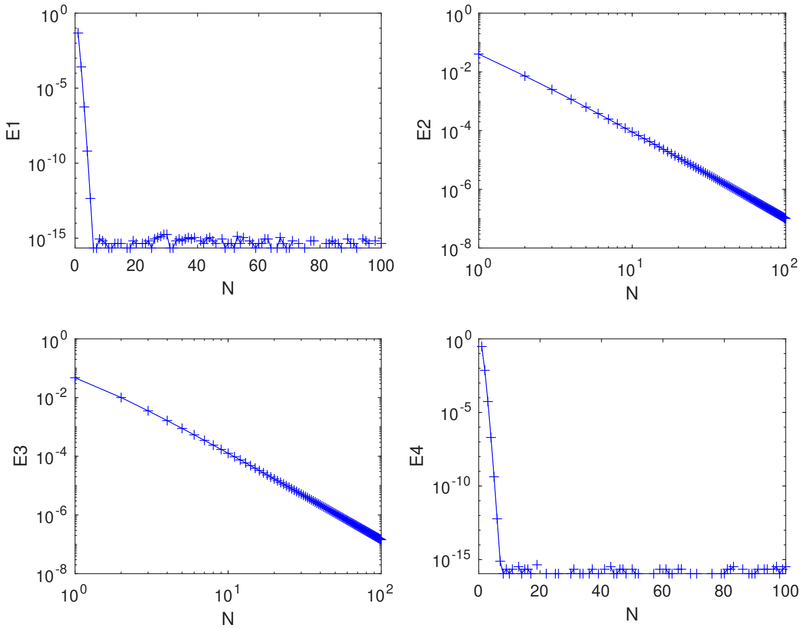


Abbildung 2: Verteilung der Gauss Quadratur Knoten im Referenz-Intervall.

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. 3(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

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

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 begrenzt 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.

Siehe nächstes Blatt!

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

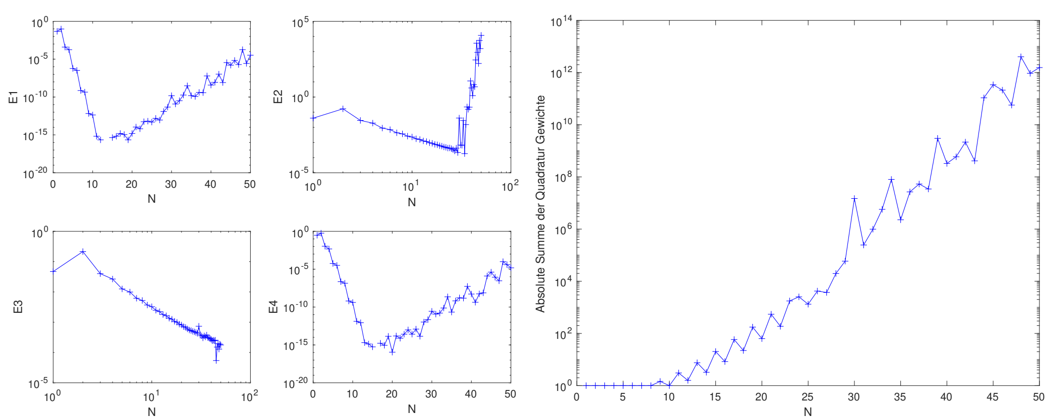
$$|R_n[f]| \leq \varepsilon(b - a).$$

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. 3(b) wo dieser Faktor für Newton-Cotes Quadraturregeln bis $n = 50$ gezeigt wird.



(a) (b)

Abbildung 3: Fehler (links) und absolute Summe der Quadratur-Gewichte (rechts) für Newton-Cotes Quadraturregeln.

Bitte wenden!

5. *Gauss Quadratur mit Gewichtsfunktionen*

a) Die gesuchten Orthogonalpolynome bezüglich dem gewichteten Skalarproukt sind

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1 \\ p_1(x) &= x - 1/3 \\ p_2(x) &= x^2 - 6/7x + 3/35. \end{aligned}$$

b) Die Nullstellen von $p_2(x)$ sind

$$x_{0,1} = \frac{15 \mp 2\sqrt{30}}{35}$$

Dann die Lagrange-Polynome bilden für die Knoten x_0, x_1:

$$\begin{aligned} L_0^1(x) &= \prod_{i=0, i\neq 0}^{1} \frac{x - x_i}{x_0 - x_i} = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = -\frac{35x - 2\sqrt{30} - 15}{4\sqrt{30}} \\ L_1^1(x) &= \prod_{i=0, i\neq 1}^{1} \frac{x - x_i}{x_1 - x_i} = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = +\frac{35x + 2\sqrt{30} - 15}{4\sqrt{30}} \end{aligned}$$

und die Gewichte berechnen, wobei $w(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$

$$w_j = \int_0^1 w(x) L_j^1(x) dx, \qquad j = 0, 1.$$

Wir bekommen

$$\begin{aligned} w_0 &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} L_0^1(x)\, dx = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\, dx \\ &= \frac{1}{x_0 - x_1} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} (x - x_1)\, dx = \frac{1}{x_0 - x_1} \left(\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} x\, dx - x_1 \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\, dx \right) \\ &= \frac{1}{x_0 - x_1} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \Big|_0^1 - x_1 2x^{1/2} \Big|_0^1 \right) = \frac{3\sqrt{30} + 5}{3\sqrt{30}} \approx 1.30429 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} w_1 &= \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} L_1^1(x)\, dx = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\, dx \\ &= \frac{1}{x_1 - x_0} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} (x - x_0)\, dx = \frac{1}{x_1 - x_0} \left(\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} x\, dx - x_0 \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\, dx \right) \\ &= \frac{1}{x_1 - x_0} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \Big|_0^1 - x_0 2x^{1/2} \Big|_0^1 \right) = \frac{3\sqrt{30} - 5}{3\sqrt{30}} \approx 0.69571. \end{aligned}$$

Siehe nächstes Blatt!

Damit erhalten wir folgende Gauss Quadraturregel

$$Q[f] = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) \approx \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} dx.$$

c) Für Funktionen der Form $\frac{f(x)}{\sqrt{x}}$ divergiert die Trapezregel beim Knoten $x = 0$, $\frac{f(0)}{\sqrt{0}}$.