Methodische und Praktische Grundlagen der Informatik 4

Übungsblatt 8

mpgi4@cg.tu-berlin.de

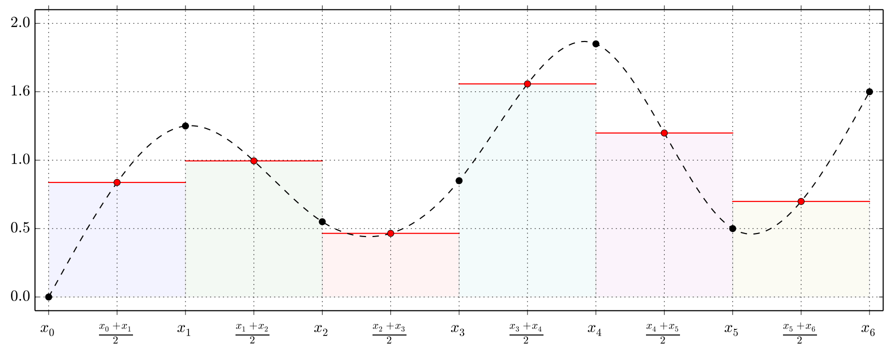
WiSe 2013/2014

Die Berechnung bzw. Approximation von Integralen spielt im wissenschaftlichen Rechnen eine wichtige Rolle. Zum Beispiel sind die Arbeit eines physikalischen Prozesses, der Erwartungswert von kontinuierlichen Zufallvariablen (wie sie im maschinellen Lernen sehr häufig benötigt werden) und die Basiskoeffizienten von Finite-Elemente-Methoden durch Integrale definiert. Bei vielen Anwendungen ist es jedoch nicht möglich eine geschlossene analytische Lösung des Integrals zu bestimmen oder dies ist zu aufwendig. Daher verwendet man in der Regel numerische Integrationsverfahren, so genannte Quadraturregeln, um die Integrale hinreichend genau zu approximieren. Für die Integration einer Funktion $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ über das Interval $[a,b]$ haben diese typischerweise die Form

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} w_i\, f(x_i) \tag{1}$$

für Stützstellen $x_i \in [a,b]$ und an den Stützstellen bekannte Funktionswerte $f(x_i)$. Die verschiedenen Verfahren unterscheiden sich dabei in der Wahl der verwendeten Koeffizienten w_i. Eine übliche Herangehensweise um geeignete w_i zu bestimmen ist dabei die Funktion $f(x)$ durch einfachere Funktionen zu approximieren oder zu interpolieren. Das Integral von $f(x)$ ergibt sich dann näherungsweise durch durch die Berechnung des Integrales der einfacheren Repräsentation.

Teil 1: Mittelpunktsregel



Für die Mittelpunktsregel wird die zu integrierende Funktion $f(x)$ (grau) zunächst mit einer Treppenfunktion (d.h. einer stückweise konstanten Funktion) $\varphi_n(x)$ (rot) interpoliert, wobei jeweils der Funktionswert von $f(x)$ am Mittelpunkt jedes Intervals als Funktionswert für $\varphi_n(x)$ verwendet wird. Wird die Anzahl n der Intervale vergrößert, so verbessert sich die Approximation und man kann zeigen, dass die Treppenfunktion $\varphi_n(x)$ für $n \to \infty$ gegen $f(x)$ konvergiert.

Als Approximation für das Integral von $f(x)$ wird nun das Integral von $\varphi_n(x)$ verwendet:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \varphi_n(x)\,\mathrm{d}x \tag{2}$$

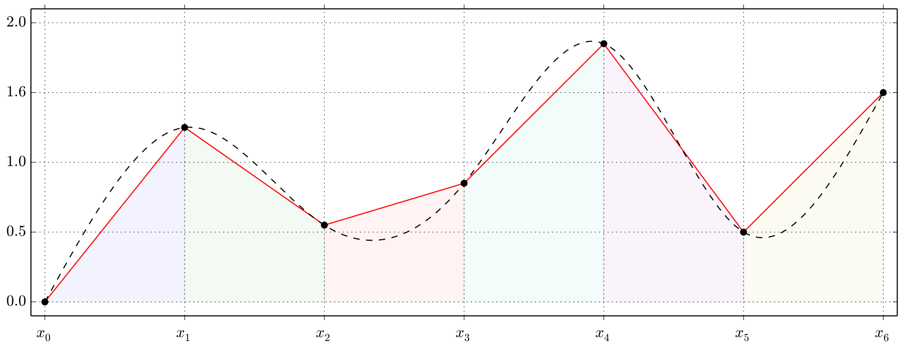
Das Integral der Treppenfunktion lässt sich aufgrund der einfachen Formsehr einfach berechnen. Bezeichnen $\{x_i\}_{i=0,\ldots,n}$ die Stützstellen, soist die Fläche jedes Rechtecks durch $(x_i - x_{i-1}) \cdot \varphi_n(\bar{x}_i)$ gegeben, wobei $\bar{x}_i$ den Mittelpunkt $\bar{x}_i = (x_{i-1} + x_i)/2$ bezeichnet. Damit erhalten wir als Quadraturregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \varphi_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) \cdot f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right). \tag{3}$$

Eine einfache Python-Implementierung ist im folgenden gegeben:

```
def quadMidpoint( signal, n_quad) :
    """
    Quadrature approximation of \int_{-1}^1 f(x) dx using midpoint rule.

    Inputs:
    signal : function f(x) whose integral is sought
    n_quad : number of quadrature points

    Return:
    integral : approximation to integral value

    """

    integral = 0.0
    xs = np.linspace( -1.0, 1.0, n_quad)

    # naive implementation; one can factor out terms
    # to obtain a substantially more efficient implementation
    for i in range(n_quad-1) :
        integral += (xs[i+1] - xs[i]) * signal((xs[i+1] + xs[i]) / 2.0)

    return integral
```

Teil 2: Trapezregel



Um die Genauigkeit der Quadratur zu steigern kann man entweder mehr Stützstellen oder bessere Quadraturverfahren verwenden. Eine sinnvolle Erweiterung der Mittelpunktsregel besteht darin, die mit stückweise konstante Interpolation durch eine stückweise lineare Interpolation zu ersetzen. Für zwei benachbarte Stützstellen x_{i-1}, x_i mit zugehörigen Funktionswerten $f(x_{i-1}), f(x_i)$ lässt sich die Funktion im Intervall $[x_{i-1}, x_i]$ durch die lineare Funktion

$$\psi_i(x) \approx f(x_{i-1})\left(1 - \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}\right) + f(x_i)\,\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \tag{4a}$$

$$= f(x_{i-1}) + \Big(f(x_i) - f(x_{i-1})\Big)\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \tag{4b}$$

approximieren. Integration der linearen Approximation ergibt:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_i(x)\,\mathrm{d}x = (x_i - x_{i-1})\,\frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \tag{5}$$

Damit erhalten wir für das Integral von $f(x)$ im Intervall $[a, b]$ die Näherung:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_i(x)\,\mathrm{d}x \tag{6a}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1})\,\frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \tag{6b}$$

Teil 3: Interpolatorische Quadraturformeln

Interpolatorische Quadraturformeln approximieren das Integral einer Funktion durch die Integration eines interpolierenden Polynoms. Sei $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ eine Funktion auf dem Intervall $[a,b]$ und seien $\{x_i \in [a,b]\}_{i=0,\dots,n}$ paarweise verschiedene Stützstellen mit $x_0 = a$ und $x_n = b$. Für das Interpolationspolynom vom Grad n, welches an den Stützstellen x_i die Funktionswerte $f(x_i)$ interpoliert, gilt dann

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j)\,, \tag{7}$$

wobei

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}} \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \tag{8}$$

das j-te Lagrange Polynom bezüglich der Stützstellen x_i bezeichnet. Für das Integral von f gilt dann:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \left(\sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j)\right)\mathrm{d}x \tag{9a}$$

$$= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x = (b-a)\sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j) \tag{9b}$$

Es stellt sich somit die Aufgabe die Integrale $w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x$ zu integrieren. Bevor wir dies weiterverfolgen, wollen wir zunächst den Fall $n = 1$ genauer betrachten. Wir haben

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x-b}{a-b} = \frac{b-x}{b-a} \quad \text{und} \quad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x-a}{b-a} \tag{10}$$

und erhalten somit:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(a)\int_a^b l_0(x)\,\mathrm{d}x + f(b)\int_a^b l_1(x)\,\mathrm{d}x \tag{11a}$$

$$= f(a)\int_a^b \frac{b-x}{b-a}\,\mathrm{d}x + f(b)\int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x \tag{11b}$$

$$= \frac{f(a)}{b-a}\int_a^b (b-x)\,\mathrm{d}x + \frac{f(b)}{b-a}\int_a^b (x-a)\,\mathrm{d}x \tag{11c}$$

$$= \frac{f(a)}{b-a}\left(b(b-a) - \frac{b^2-a^2}{2}\right) + \frac{f(b)}{b-a}\left(\frac{b^2-a^2}{2} - a(b-a)\right) \tag{11d}$$

$$= f(a)\left(b - \frac{(b+a)}{2}\right) + f(b)\left(\frac{(b+a)}{2} - a\right) \tag{11e}$$

$$= f(a)\frac{(b-a)}{2} + f(b)\frac{(b-a)}{2} \tag{11f}$$

$$= \frac{b-a}{2}\Big(f(a) + f(b)\Big) \tag{11g}$$

Dies ist genau die Trapezregel.

Teil 4: Abgeschlossene Newton-Cotes Quadraturformeln

Wir wollen nun den Fall betrachten, dass die Stützstellen für das Interpolationspolynom äquidistant gewählt werden. Es sei $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ eine Funktion auf dem Intervall $[a,b]$ und es bezeichne

$$x_i = a + ih \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n} \tag{12}$$

die $n+1$ Stützstellen. Wir wollen zunächst eine kompaktere Darstellung der Gewichte

$$w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}\,\mathrm{d}x \tag{13}$$

der allgemeinen Quadraturformel

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j) \tag{14}$$

bestimmen und dabei ausnutzen, dass die Stützpunkte äquidistant verteilt sind. Da $x_i = a + ih$ ist, gilt umgekehrt also $i = \frac{x_i - a}{n}$. Für das j-te Lagrangepolynom (bzgl. der Stützstellen x_i) erhalten wir somit:

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k} = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{\frac{x-a}{h} - \frac{x_k - a}{h}}{\frac{x_j - a}{h} - \frac{x_k - a}{h}} = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{\frac{x-a}{h} - k}{j - k} \tag{15}$$

Substitution[1] von $x = \varphi(t) = th + a$ in Gleichung (13) ergibt dann:

$$w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{b-a}\int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} l_j\big(\varphi(t)\big)\varphi'(t)\,\mathrm{d}t \tag{16a}$$

$$= \frac{1}{b-a}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t - t_k}{t_j - t_k}\cdot\frac{b-a}{n}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t-k}{j-k}\,\mathrm{d}t \tag{16b}$$

Trapezregel $n = 1$:

$$w_0 = \int_0^1 \frac{t-1}{0-1}\,\mathrm{d}t = \int_0^1 (1-t)\,\mathrm{d}t = \Big[t - \tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^1 = 1 - \tfrac{1}{2} = \tfrac{1}{2} \tag{17a}$$

$$w_1 = \int_0^1 \frac{t-0}{1-0}\,\mathrm{d}t = \int_0^1 t\,\mathrm{d}t = \Big[\tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^1 = \tfrac{1}{2} \tag{17b}$$

Zusammengefasst ergibt dies erneut die Trapezregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}\Big(f(a) + f(b)\Big) \tag{18}$$

Simpsonregel $n = 2$:

$$w_0 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\frac{t-2}{0-2}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)\,\mathrm{d}t \tag{19a}$$

$$= \frac{1}{4}\int_0^2 (t^2 - 3t + 2)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - \tfrac{3}{2}t^2 + 2t\Big]_0^2 = \frac{1}{6} \tag{19b}$$

$$w_1 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\frac{t-2}{1-2}\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{2}\int_0^2 (t^2 - 2t)\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{2}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - t^2\Big]_0^2 = \frac{2}{3} \tag{19c}$$

$$w_2 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-0}{2-0}\frac{t-1}{2-1}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\int_0^2 (t^2 - t)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - \tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^2 = \frac{1}{6} \tag{19d}$$

Zusammengefasst ergibt dies die Simpsonregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\right) \tag{20}$$

Teil 5: Summierte Quadraturformeln

Für $i = 0, \ldots, n$ seinen Stützstellen definiert wie folgt:

$$x_i = a + ih \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n} \tag{21}$$

Dann gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \tag{22}$$

Summierte Quadraturformeln approximieren die Integrale $\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x$ mittels einer geeigneten Quadraturformel, wie zum Beispiel der Trapez- oder Simpsonregel.

[1] Substitutionsregel: Sei $z = \varphi(x)$ und $\mathrm{d}z = \varphi'(x)\,\mathrm{d}x$, dann gilt: $\int_a^b f\big(\varphi(x)\big)\varphi'(x)\,\mathrm{d}x = \int_{\varphi(a)}^{\varphi(b)} f(z)\,\mathrm{d}z$

Summierte Trapezregel

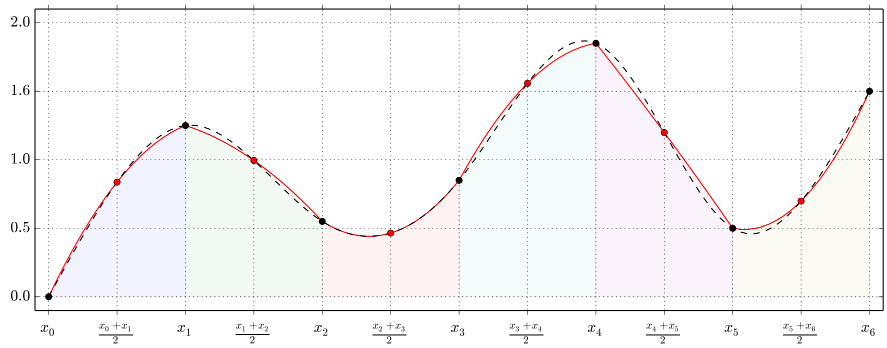
$$\int_a^b f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x_{i+1}-x_i}{2}\Big(f(x_i)+f(x_{i+1})\Big) \tag{23a}$$

$$= \frac{h}{2}\left(\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1})\right) \tag{23b}$$

$$= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=0}^{n-2} f(x_{i+1}) + f(x_n)\right) \tag{23c}$$

$$= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) \tag{23d}$$

Summierte Simpsonregel Von der summierten Simpsonregel gibt es zwei Varianten. Die erste Variante wendet die Simpsonregel für $i = 1, \ldots, n$ auf die Stützstellen x_{i-1}, $(x_{i-1}+x_i)/2$, x_i an:



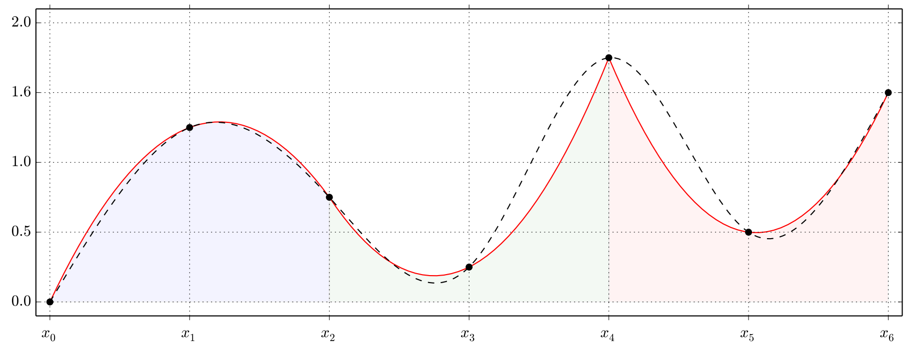
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + f(x_i)\right)\right] \tag{24a}$$

$$= \frac{h}{6}\left(\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^{n} 4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\right) \tag{24b}$$

$$= \frac{h}{6}\left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) \tag{24c}$$

$$= \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \frac{1}{2}f(x_n)\right) \tag{24d}$$

Die zweite Variante wendet die Simpsonregel für $i = 1, \ldots, n/2$ auf die Stützstellen x_{2i-2}, x_{2i-1}, x_{2i} an:



$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n/2} \left[\frac{2h}{6} \Big(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}) \Big) \right] \tag{25a}$$

$$= \frac{h}{3} \left(\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-2}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i}) \right) \tag{25b}$$

$$= \frac{h}{3} \left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + f(x_n) \right) \tag{25c}$$

$$= \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n) \right) \tag{25d}$$