

Übungsblatt 9

Numerische Integration

Aufgabe 1. Newton-Cotes-Quadratur

Die numerische Integration stellt ein essentielles Werkzeug bei der Anwendung der Finiten Elemente Methode (FEM) dar. Zunächst wollen wir einige Spezialfälle der *Newton-Cotes-Quadraturformeln* auf eindimensionale Probleme anwenden.

(a) Definieren Sie die Funktion

$$f(t) = \sin(\omega t), \quad (1)$$

sowie eine äquidistant partitioniertes Zeitintervall $T = [0, 3\pi]$ mit $(N + 1)$ Stützstellen.

(b) Berechnen sie (handschriftlich) das *exakte* Integral.

(c) Quadraturformeln basieren allgemein auf dem Ansatz

$$I(f) \approx (t_N - t_0) \sum_{i=0}^N \lambda_i f(t_i) = \hat{I}(f),$$

das heißt das Integral wird über die gewichtete Summe endlich vieler diskreter Funktionswerte approximiert. Newton-Cotes-Formeln sind spezielle Quadraturformeln, die auf dem Zeitintervall $[t_0, t_N]$ das Integral von Polynomen bis zu einem gewissen Grad exakt berechnen. Für äquidistante Partitionierungen sind diese höchstens bis zum Grad kleiner oder gleich N *exakt*. Durch geeignete Transformationsvorschriften können die Gewichte der Quadraturformeln auf einem Einheitsintervall bestimmt und auf andere Intervalle übertragen werden. Die Gewichte für eine äquidistante Partitionierung werden mit

$$\lambda_i = \frac{1}{t_N - t_0} \int_{t_0}^{t_N} \prod_{j \neq i} \frac{t - t_j}{t_i - t_j} dt = \frac{1}{N} \int_0^N \prod_{j \neq i} \frac{s - j}{i - j} ds.$$

berechnet ($i = 0, \dots, N$). Es handelt sich bei den λ_i um die Integrale der *Lagrangeschen Interpolationspolynome* mit den Stützstellen $\tau_i = i/N$ ($i = 0, \dots, N$). Berechnen Sie für $N \in \{1, 2, \dots, 8\}$ die Koeffizienten λ_i ($i = 0, \dots, N$). Entwerfen Sie zunächst eine Routine, die für einen Eingabevektor p und ein Intervall $a \dots b$ das Integral

$$\hat{I}(p) = \int_a^b p^\top \begin{pmatrix} 1 \\ t \\ t^2 \\ t^3 \\ \vdots \end{pmatrix} dt = \sum_{i=0}^N \left(p_i \left(\int_a^b t^i dt \right) \right) \quad (2)$$

exakt berechnet. Die Konstruktion des Polynoms p erfolgt sukzessive startend von $p = 1 = t^0$. Dies entspricht der Darstellung $p = [1]$. Die Multiplikation eines als Vektor gespeicherten Polynoms erfolgt durch Koeffizientenvergleich aus

$$p(t)(t + \alpha) = \sum_{i=0}^N p_i t^{i+1} + \alpha p_i t^i \stackrel{!}{=} \sum_{i=0}^{N+1} q_i t^i.$$

Es gilt also mit den temporären Vektoren $q_0(1:N+1) = \alpha p(1:N+1)$ und $q_1(2:N+2) = p(1:N+1)$ $q = q_0 + q_1$. Weitere Anweisungen entnehmen Sie der Matlab-Vorlage. Speichern Sie die Koeffizienten in einer Matrix folgender Form:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1^{(1)} & \lambda_2^{(1)} & 0 & & \dots & 0 \\ \lambda_1^{(2)} & \lambda_2^{(2)} & \lambda_3^{(2)} & 0 & \dots & 0 \\ \lambda_1^{(3)} & \lambda_2^{(3)} & \lambda_3^{(3)} & \lambda_4^{(3)} & 0 & \dots & 0 \\ \lambda_1^{(4)} & \lambda_2^{(4)} & \dots & \dots & \lambda_5^{(4)} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Sie können über den Befehl `save('filename.mat','var1','var2',...);` Variablen in *.mat Dateien exportieren. Mit `load('filename.mat');` werden die Daten wieder eingelesen.

Schreiben Sie eine Routine, die das Integral einer Funktion $f(t)$ mit Hilfe der Newton-Cotes-Formeln approximiert. Dabei gehen Sie wie folgt vor:

- Laden Sie die im Vorfeld berechneten Koeffizienten λ_i (s.o.).
- Berechnen Sie den Vektor F der (diskreten) Funktionswerte $f(t_i)$. Lassen Sie beide Vektoren ausgeben (für feste Anzahl Stützstellen).
- Berechnen Sie für $N = 1, \dots, 9$ numerisch das Integral für $t_0 = 0$, $t_N = \frac{\pi}{2}$ und verschiedene Parameter ω durch

$$\hat{I}(f) = (t_N - t_0) \sum_{j=0}^N \lambda_j^{(N)} f(t_j).$$

(d) Was beobachten Sie für große Parameter ω ?

[Testat 2] - Abgabe per Upload auf ILIAS bis zum 11.01.2018*Gauss-Christoffel-Quadratur.*

Ein wesentlicher Nachteil der Newton-Cotes-Formeln ist, dass für $(N + 1)$ Stützstellen nicht automatisch Polynome vom Grad N exakt integriert werden können. Es ist wünschenswert, eine maximal mögliche Konsistenzordnung garantieren zu können. Die Gauss-Christoffel-Quadratur ist ein Verfahren mit optimaler Konsistenzordnungen.

Um dies zu erreichen, müssen neben den Integrationsgewichten auch die Stützstellen *optimal* gewählt werden. Nehmen wir an ein Integrationsverfahren mit den Stützstellen $\tau_0^{(N)}, \dots, \tau_N^{(N)}$ und den Gewichten $\lambda_0^{(N)}, \dots, \lambda_N^{(N)}$ sei exakt für alle Polynome vom Grade $2N + 1$. Wir definieren damit für alle N über die jeweiligen Stützstellen des Integrationsverfahrens die Polynome

$$p_{N+1}(t) = \prod_{i=0, \dots, N} (t - \tau_i^{(N)}) = (t - \tau_0^{(N)})(t - \tau_1^{(N)}) \cdots (t - \tau_N^{(N)}). \quad (3)$$

Das Produkt zwischen den Polynomen p_i und p_{N+1} mit $i \leq N$ ist ein Polynom vom Grade kleiner oder gleich $2N + 1$. Folglich berechnet die Quadraturformel $(\lambda^{(N)}, \tau^{(N)})$ das Integral exakt und es gilt

$$(p_i, p_{N+1}) = \int_0^1 p_i(t) p_{N+1}(t) dt = \sum_{i=0}^N \lambda_i^{(N)} p_i(\tau_i^{(N)}) \underbrace{p_{N+1}(\tau_i^{(N)})}_{=0} = 0. \quad (4)$$

Die Polynome p_i, p_{N+1} sind also orthogonal bezüglich des L^2 -Skalarprodukts. Damit können die Stützstellen des Verfahrens der Ordnung $2N + 1$ angegeben werden.

Erarbeiten Sie schrittweise die Gauss-Quadratur auf Basis der folgenden Anleitung:

- (a) Durch vollständige Induktion kann gezeigt werden, dass die gesuchten Polynome den sogenannten *Legendre-Polynomen* p_1, \dots, p_{N+1} entsprechen. Berechnen Sie die Legendre-Polynome. Gehen Sie wie folgt vor (Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren):

[A1] Setze $p_0(t) = 1$; initialisiere $i = 1$;

[A2] Berechne für $0 \leq j < i$: $\alpha_{ij} = \int_0^1 t^i p_j(t) dt$;

[A3] Zwischenschritt: $p_i^*(t) = t^i - \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{ij} p_j(t)$;

[A4] Normieren: $p_i(t) = \frac{p_i^*(t)}{\sqrt{\int_0^1 (p_i^*(t))^2 dt}} = \frac{p_i^*(t)}{\sqrt{\int_0^1 t^{2i} dt - \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{ij}^2}}$;

[A5] Inkrementiere $i \rightarrow i + 1$;

[A6] Gehe zu [A2];

Verwenden Sie die in Aufgabe 1 entwickelte Routine `IntegratePolynomial` mit $a = 0, b = 1$. Die Koeffizienten der N Legendre-Polynome sollen in einer Matrix `Legendre` abgelegt werden. Lassen Sie diese Matrix ausgeben.

Anmerkung: Die Schritte [A2] und [A3] nennt man auch *Gram-Schmidt-Verfahren* zur Definition einer Orthonormalbasis auf einem Vektorraum. Wichtig ist lediglich, dass die Eingangsvektoren linear unabhängig sind. Da t^i und t^j für $i \neq j$ stets linear unabhängig sind, ist dies gewährleistet.

- (b) Die Berechnung der Lage der *Stützstellen* erfordert die Bestimmung der Nullstellen der zuvor berechneten Legendre-Polynome. Das Verfahren mit k Stützstellen erfordert die Berechnung der Nullstellen des $k+1$ -ten Legendre-Polynoms. Der Matlab-Befehl `roots` berechnet die Nullstellen eines Polynoms. *Beachten Sie die Parameterübergabe beim Aufruf.* Der Befehl `roots(q)` löst das Nullstellenproblem

$$q(t) = q_1 t^N + q_2 t^{N-1} + \dots + q_{N-1} t + q_N \stackrel{!}{=} 0.$$

Speichern Sie die ermittelten Stützstellen in der Matrix `tau` (`save`-Befehl).

- (c) Zur vollständigen Definition des Quadraturverfahrens fehlen die Gewichte λ_i^n ($i = 0, \dots, N$). Da das Verfahren Polynome vom Grad N wegen $N < 2N + 1$ ebenfalls exakt integriert, müssen die Gewichte den Lagrange-Gewichten entsprechen (s.o.):

$$\lambda_i^n = \int_0^1 \prod_{j \neq i} \frac{t - \tau_j}{\tau_i - \tau_j} dt \quad (i = 1, \dots, m).$$

Legen Sie die Gewichte für die Verfahren mit $n = 1, \dots, 10$ in der Matrix `lambda` ab und speichern Sie die Matrix mit dem `save`-Befehl.

- (d) Berechnen Sie das numerische Integral der Funktion aus Aufgabe 1 über

$$\hat{I}(f) = (t_N - t_0) \sum_{i=1}^m \lambda_i^{(m)} f(\tau_i).$$

Vergleichen Sie für $m = 1, \dots, 10$ die Ergebnisse mit denen der Newton-Cotes Formeln und den exakten Ergebnissen. Berechnen Sie hierfür den Fehler mittels Newton-Cotes-Quadratur (Aufgabe 1) und speichern diesen unter `errorNC.mat` ab. Wie sieht der Unterschied für $\omega = 13.6753$, $t_0 = 0$, $t_N = \frac{\pi}{2}$ aus?

- (e) Unterteilen Sie nun das Zeitintervall durch äquidistante Knoten. Summieren Sie die Integrale auf den Teilstücken, um das Integral über das gesamte Intervall zu approximieren. Variieren Sie die Anzahl der Stützstellen und den Parameter ω . Können Sie so das Integral für sehr große ω hinreichend genau berechnen?

Anmerkung: Die Matrizen `lambda` und `tau` werden für die FEM-Übungen benötigt.

Kontakt

Dipl.-Ing. Johannes Ruck

johannes.ruck@kit.edu

M.Sc. Hannes Erdle

hannes.erdle@kit.edu

Sprechstunde Do. 13:00-14:00 Uhr (Geb. 10.23, Raum 302.3)