Prof. Marc Alexa, Ugo Finnendahl,
Dimitrios Bogiokas, Gabriel Dogadov

Wissenschaftliches Rechnen - Übung 7

Numerische Integration (nicht prüfungsrelevant)

12.02.2024 bis 16.02.2024

Aufgabe 1: Newton-Cotes Formeln

Im Folgenden möchten wir das Integral $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx$ mit $f(x) = \frac{\exp(x)}{x^2+1}$ berechnen. Da f nicht elementar integrierbar ist, müssen numerische Lösungen in Betracht gezogen werden. Vergleichen Sie stets die berechneten Abschätzungen mit der Annäherung $\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx 1{,}796$.

1. Was ist die grundlegende Idee hinter den Newton-Cotes Formeln? Was bedeutet die Unterscheidung in abgeschlossen und offen?

Lösung

Man approximiert die Funktion f durch ein Lagrange-Polynom L vom Grad n

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \int_a^b L(x)\, dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x) \right) = \sum_{i=0}^{n} \underbrace{f(x_i)}_{f_i} \underbrace{\int_a^b \ell_i(x)\, dx}_{w_i}$$

wobei die $n+1$ Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ (auch genannt Knoten) äquidistant im Intervall $[a, b]$ gewählt werden. Bei den abgeschlossenen Formeln sind die Intervallgrenzen stets unter den Knoten ($x_0 = a$ sowie $x_n = b$) und man erhält die Formel:

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=0}^{n} f_i w_i = \sum_{i=0}^{n} f(a + i \cdot h) w_i$$

wobei $h = \frac{b-a}{n}$ die Schrittweite ist. Da beide Intervallgrenzen unter den Stützstellen sein müssen, beginnen die abgeschlossenen Formeln bei $n = 1$. Bei den offenen Formeln sind die Intervallgrenzen nicht unter den Stützstellen. Da gibt es zwei (sinnvolle) Möglichkeiten:

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=0}^{n} f_i w_i = \sum_{i=0}^{n} f(a + (i+1) \cdot h) w_i \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n+2} \quad \text{sowie}$$

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=0}^{n} f_i w_i = \sum_{i=0}^{n} f(a + (i+1/2) \cdot h) w_i \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n+1}.$$

Letztere Möglichkeit nennt man auch Maclaurin. Die Gewichte müssen in der Praxis nicht berechnet werden; diese wurden bereits ausgerechnet und die daraus resultierenden Quadraturformeln bereits aufgestellt.

Lösung Ende

2. Zunächst möchten wir das Integral mit den abgeschlossenen Newton-Cotes Formeln für $n \in \{1, 2, 3\}$ approximieren.

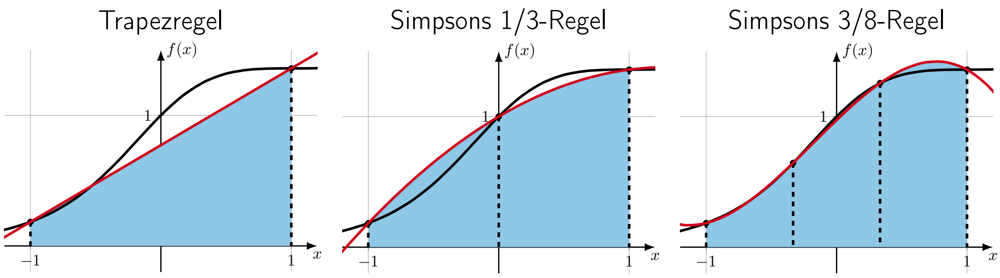
Name	n	Schrittweite h	Formel
Trapezregel	1	$b-a$	$\frac{1}{2}h(f_0 + f_1)$
Simpsons 1/3-Regel	2	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2)$
Simpsons 3/8-Regel	3	$\frac{b-a}{3}$	$\frac{3}{8}h(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$

a) Ergänzen Sie die Tabelle mit der Schrittweite.

b) Berechnen Sie alle zugehörigen Gewichte für beliebige Intervallgrenzen a und b in Abhängigkeit der Schrittweite h. Ergänzen Sie die Formeln in der Tabelle.

c) Schätzen Sie das Integral mit den Formeln ab.

d) Visualisieren Sie die Berechnung des Integrals.



Lösung

Wir berechnen zunächst die Gewichte.

$$
\begin{aligned}
w_0 &= \int_a^{a+h} \ell_0(x)\ dx \\
&= \int_a^{a+h} \frac{x-(a+h)}{a-(a+h)}\ dx \\
&= -\frac{1}{2h}\left[x^2 - 2(a+h)x\right]_a^{a+h} \\
&= -\frac{1}{2h}\left((a+h)^2 - 2(a+h)(a+h) - a^2 + 2(a+h)a\right) \\
&= -\frac{1}{2h}\left(-(a+h)^2 - a^2 + 2(a+h)a\right) \\
&= -\frac{1}{2h}\left(-a^2 - 2ah - h^2 - a^2 + 2a^2 + 2ah\right) \\
&= \frac{1}{2}h
\end{aligned}
$$

Aufgrund der Symmetrien der Lagrange-Basispolynome gilt $w_1 = w_0$.

Für $n = 2$:

$$
\begin{aligned}
w_0 &= \int_a^{a+2h} \ell_0(x)\ dx \\
&= \int_a^{a+2h} \frac{x-(a+h)}{a-(a+h)} \cdot \frac{x-(a+2h)}{a-(a+2h)}\ dx \\
&= \frac{1}{3}h \\
w_1 &= \int_a^{a+2h} \ell_1(x)\ dx \\
&= \int_a^{a+2h} \frac{x-a}{(a+h)-a} \cdot \frac{x-(a+2h)}{(a+h)-(a+2h)}\ dx \\
&= \frac{4}{3}h
\end{aligned}
$$

Erneut gilt aufgrund von Symmetrien, dass $w_2 = w_0$.

Für $n = 3$:

$$\begin{aligned}
w_0 &= \int_a^{a+3h} \ell_0(x)\, dx \\
&= \int_a^{a+3h} \frac{x-(a+h)}{a-(a+h)} \cdot \frac{x-(a+2h)}{a-(a+2h)} \cdot \frac{x-(a+3h)}{a-(a+3h)}\, dx \\
&= \frac{3}{8}h \\
w_1 &= \int_a^{a+3h} \ell_1(x)\, dx \\
&= \int_a^{a+3h} \frac{x-a}{(a+h)-a} \cdot \frac{x-(a+2h)}{(a+h)-(a+2h)} \cdot \frac{x-(a+3h)}{(a+h)-(a+3h)}\, dx \\
&= \frac{9}{8}h
\end{aligned}$$

Auch hier gilt aufgrund von Symmetrien $w_3 = w_0$ und $w_2 = w_1$.

- Trapezregel:
$$\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx \frac{1}{2} \cdot 2 \left(\frac{\exp(-1)}{2} + \frac{\exp(1)}{2} \right) \approx 1{,}543$$
- Simpsons 1/3-Regel:
$$\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx \frac{1}{6} \cdot 1 \left(\frac{\exp(-1)}{2} + 4\exp(0) + \frac{\exp(1)}{2} \right) \approx 1{,}848$$
- Simpsons 3/8-Regel:
$$\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx \frac{3}{8} \cdot \frac{2}{3} \left(\frac{\exp(-1)}{2} + 3\frac{9\exp(-1/3)}{10} + 3\frac{9\exp(1/3)}{10} + \frac{\exp(1)}{2} \right) \approx 1{,}812$$

Lösung Ende

3. Warum ist es im Allgemeinen keine gute Idee, die Newton-Cotes Formeln für große n zu verwenden? Welche Möglichkeit gibt es, die Genauigkeit der Approximation zu vergrößern?

Lösung

Formel für höheres n benutzen funktioniert nur bis zu einem bestimmten Polynomgrad, da die Lösung instabil wird und Runges Phänomen auftritt. Bessere Lösung ist das Unterteilen des Intervalls in weitere Intervalle und das anschließende Verwenden von Quadraturformeln mit geringen Polynomgraden.

Lösung Ende

Aufgabe 2: Gauß-Quadratur

Im Kontext der Gauß-Quadratur spricht man von orthogonalen Polynomen. Die Menge aller stetigen Funktionen $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ bilden einen reellen Vektorraum. Über diesem lassen sich verschiedene Skalarprodukte der Form

$$\langle f, g\rangle_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x)\ dx$$

definieren, wobei $w(x)$ eine nicht-negative Gewichtungsfunktion ist. Zwei Funktionen $f, g : [a, b] \to \mathbb{R}$ nennt man dann, wie man es von euklidischen Räumen kennt, orthogonal, falls $\langle f, g\rangle = 0$.

1. Was ist die Idee der Gauss-Quadratur? Was ist der grundlegende Unterschied zu den Newton-Cotes Formeln?

Lösung

Man nimmt zunächst an, dass die Funktion als $f(x) = w(x)\Phi(x)$ geschrieben werden kann, wobei w eine Gewichtungsfunktion und Φ (ungefähr) ein Polynom ist:

$$\int_a^b f(x)\ dx = \int_a^b w(x)\Phi(x)\ dx \approx \int_a^b w(x)\sum_{i=1}^{n}\Phi(x_i)\ell_i(x)\ dx = \sum_{i=1}^{n}\Phi(x_i)\underbrace{\int_a^b w(x)\ell_i(x)\ dx}_{w_i}.$$

Die Gewichtungsfunktion bestimmt die Art der Gauß-Quadratur:

- Gauß-Legendre $w(x) = 1$,
- Gauß-Tschebyscheff $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$,
- Gauß-Hermite $w(x) = \exp(-x^2)$.

Aber im Allgemeinen kann jede nicht-negative Funktion als Gewichtungsfunktion verwendet werden. Anders als bei den Newton-Cotes Formeln werden hier die Knoten $x_1, \ldots, x_n$ nicht äquidistant gewählt, sondern als Nullstellen eines orthogonalen Polynoms P_n vom Grad n (zu den Vorgängerpolynomen $P_0, \ldots, P_{n-1}$ und ihrer Linearkombinationen bezüglich des Skalarproduktes mit der gewählten Gewichtungsfunktion). Die Gewichte werden so gewählt, dass man das Polynom Φ, falls es einen von $2n - 1$ hat, mit n Stützstellen fehlerfrei integrieren kann. Hier ist nochmal zu beachten, dass die orthogonalen Polynome, neben der Gewichtungsfunktion, ebenso vom Intervall $[a, b]$ abhängen.

Lösung Ende

2. Für die Gauß-Legendre Quadratur nutzt man als Gewichtungsfunktion $w(x) = 1$ und die daraus resultierenden Legendre-Polynome. Die ersten beiden sind $P_0(x) = 1$ und $P_1(x) = x$. Berechnen Sie mithilfe des Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahrens alle Polynome zweiten Grades, welche orthogonal zu P_0, P_1 und ihren Linearkombinationen, also allen Polynomen vom Grad höchstens eins, sind, wobei Sie x^2 als Startfunktion verwenden können[1].

Lösung

$$\begin{aligned}
P_2'(x) &= x^2 - \frac{\langle x^2, x\rangle}{\langle x, x\rangle}x - \frac{\langle x^2, 1\rangle}{\langle 1, 1\rangle}1 \\
&= x^2 - \frac{\int_{-1}^{1} x^3\ dx}{\int_{-1}^{1} x^2\ dx}x - \frac{\int_{-1}^{1} x^2\ dx}{\int_{-1}^{1} 1\ dx}1 \\
&= x^2 - \frac{0}{\frac{2}{3}}x - \frac{\frac{2}{3}}{2}1 \\
&= x^2 - \frac{1}{3}
\end{aligned}$$

[1] Das Legendre-Polynom P_2 ist jenes, für welches zusätzlich $P_2(1) = 1$ gilt.

Die Menge der zu 1 und x orthogonalen Polynome ist also $\mathrm{Span}\{x^2 - \frac{1}{3}\}$. Das Polynom P_2, das zusätzlich $P_2(1) = 1$ erfüllt, ist $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$.

Lösung Ende

3. Das nächste Legendre-Polynom ist $P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$. Schätzen Sie das Integral aus der vorherigen Aufgabe mit der Gauß-Legendre-Quadratur mit $n = 3$ Stützstellen ab. Berechnen Sie dazu die Nullstellen x_1, x_2, x_3 von P_3. Die zugehörigen Gewichte sind dabei $w_1 = \frac{5}{9}$, $w_2 = \frac{8}{9}$ und $w_3 = \frac{5}{9}$.

Lösung

Die Nullstellen des Polynoms P_3 sind $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $x_2 = 0$ und $x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Es gilt:

$$\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx \frac{5}{9} \frac{5\exp\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)}{8} + \frac{8}{9}\exp(0) + \frac{5}{9} \frac{5\exp\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)}{8} \approx 1{,}802$$

Lösung Ende

4. Approximieren Sie das Integral aus der vorherigen Aufgabe nun mithilfe der Gauß-Tschebyscheff-Quadratur (Gewichtungsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$) erneut mit $n = 3$ Stützstellen. Das dritte Tschebyscheff-Polynom ist $T_3(x) = 4x^3 - 3x$, die zugehörigen Gewichte sind $w_1 = w_2 = w_3 = \frac{\pi}{3}$.

Lösung

Für die Nullstellen der Tschebyscheff-Polynome kennen wir bereits eine Formel (mit dem Kosinus), jedoch berechnen wir sie ohne die Formel. Die Nullstellen sind $x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}$, $x_2 = 0$ sowie $x_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}$. Dann gilt:

$$\int_{-1}^{1} \frac{\exp(x)}{x^2+1}\, dx \approx \frac{\pi}{3}\sqrt{1-\frac{3}{4}}\,\frac{4\exp\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)}{7} + \frac{\pi}{3}\exp(0) + \frac{\pi}{3}\sqrt{1-\frac{3}{4}}\,\frac{4\exp\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)}{7} \approx 1{,}884$$

Lösung Ende