Prof. Dr. Manuel Torrilhon
Vertr.-Prof. Dr. Michael Schlottke-Lakemper
Tamme Claus
Eda Yilmaz

Mathematische Grundlagen II (CES) | SS 2023
Programmierübung 2 | 03.05.2023

Hinweis:

- Bitte melden Sie sich für das Testat in 4er Gruppen über den Moodle-Lernraum an. Die Termine werden demnächst veröffentlicht.
- Sie können eine Programmiersprache Ihrer Wahl für diese Aufgaben nutzen. Es bieten sich z.B. `python/numpy` in einem `jupyter-notebook` (`https://jupyter.rwth-aachen.de`), oder `julia` in Kombination mit `Pluto.jl`, bzw. `MATLAB` dafür an.
- Bitte bereiten Sie für das Testat eine kurze (5min) Präsentation (mündlich, ohne Folien etc.) vor, bei der Sie ihren Programmcode und sowie ihre Ergebnisse vorstellen. Jedes Gruppenmitglied sollte dabei einen Teil der Präsentation übernehmen.
- Bitte bringen Sie zum Testat einen Laptop mit ihrem lauffähigen Programm, den Skripten zur Verifizierung und den Plots zur Veranschaulichung mit.

Gauss Quadratur

In der Vorlesung wurde die Gauß-Quadratur behandelt, die ein Integral numerisch bestimmt:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i) =: Q_n,$$

mit den n Gewichten ω_i und Stützstellen x_i. Grundsätzlich kann man davon ausgehen, dass sich die Approximation mit Erhöhung der Stützstellen verbessert. Oft ist eine Approximation gefragt, die bis zu einer gewissen Fehlertoleranz ε genau ist.

Ihre Aufgabe ist es, mittels Gauß-Quadratur Integrale für eine vorgegebene Fehlertoleranz ε zu berechnen. Das bedeutet, dass sich die Anzahl der Stützstellen n entsprechend automatisiert anpassen muss. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

a) **Programmaufbau:** Im Hauptprogramm werden eine Funktion `f` und die Integralgrenzen `a`, `b` definiert. Eine Approximation `int` des Integrals kann nun einerseits durch Angabe der Stützstellen `n` berechnet werden, oder andererseits durch Angabe der Fehlertoleranz `tol`. Dies geschieht in den beiden Funktionen

```
[int] = gaussq_n(f,a,b,n),

[int] = gaussq_tol(f,a,b,tol).
```

Die Funktion `gaussq_n` berechnet für eine fest vorgegeben Anzahl `n` die Stützstellen x_i und die Gewichte ω_i und bestimmt abschließend das approximierte Integral `int` gemäß obiger Summenformel.

Die Funktion `gaussq_tol` findet die Anzahl der benötigten Stützstellen n mittels eines Fehlertoleranz-Abbruchkriteriums automatisch heraus. Liegt die Anzahl der benötigten Stützstellen n fest, kann das approximierte Integral `int` mittels der Funktion `gaussq_n` berechnet werden.

Da die Funktion `gaussq_n` in `gaussq_tol` verwendet wird, sollte die Funktion `gaussq_n` zuerst geschrieben und getestet werden.

b) **Berechnung der Stützstellen x_i:** Für eine vorgegebene Anzahl n, lassen sich die Stützstellen $x_1, \dots, x_n$ als Eigenwerte der symmetrischen tridiagonalen Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ bestimmen:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & 0 & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{wobei } \beta_k = \frac{k}{\sqrt{4k^2-1}}.$$

Hinweis: Zur Berechnung der Eigenwerte und -vektoren dürfen Sie Funktionen der Standardbibliotheken nutzen (z.B. in `python` `numpy.linalg.eig` oder in `julia` `LinearAlgebra.eigen`)

c) **Berechnung der Gewichte ω_i:** Ist $A = Z\Lambda Z^T$ die Faktorisierung von A (d.h. $\Lambda = \operatorname{diag}(x_1, \dots, x_n)$ sind die Eigenwerte und Z ist die orthonormale Eigenvektormatrix), so bekommt man die Gewichte ω_i aus der ersten Zeile von Z. Es gilt:

$$\omega_i = 2(z_{1,i})^2, \quad i = 1, \dots, n.$$

Hinweis: Beachten Sie, dass die obige Formel für Integralgrenzen $[-1, 1]$ gilt. Bei Integralgrenzen $[a, b]$ müssen die Werte für ω_i und x_i noch transformiert werden. (Transformationssatz)

d) **Abbruchkriterium durch Fehlertoleranz ε:** Der Funktion `gaussq_tol` wird eine Fehlertoleranz `tol` übergeben. Dazu wird iterativ die Anzahl der Stützstellen erhöht, bis die Toleranz erfüllt ist. Als Abbruchkriterium können Sie

$$|Q_{n+1} - Q_n| \le \texttt{tol}$$

verwenden, wobei Q_n die n-te Quadraturformel ist.

e) **Bonusaufgabe** Implementieren Sie Funktionen, die das Integral über andere Quadraturformeln approximieren (z.B. summierte Trapezregel, summierte Simpsonregel).

z.B. `[int] = sumtrapz_n(f,a,b,n)`

Vergleichen sie die Ergebnisse mit der Gauss Quadratur. Besonders der Vergleich der Fehler dieser Regeln mit dem Fehler der Gauss-Quadratur kann interessant sein.

Test des Programms
Testen Sie Ihr Programm an den folgenden Integralen

a) $\displaystyle\int_{-1}^{1} x^{10}\, dx = \frac{2}{11},$

b) $\displaystyle\int_{0}^{\pi} \sin(x)\, dx = 2,$

c) $\displaystyle\int_{-2}^{3} \frac{1}{10^{-2} + x^2}\, dx = 10 \cdot \operatorname{atan}(20) + 10 \cdot \operatorname{atan}(30).$

Verwenden Sie verschiedene Abbruchkriterien `tol`. Erstellen Sie einen Plot, in dem Sie den absoluten Fehler $|Q_n - \int f(x)dx|$ für verschiedene $n = 1, ...$ darstellen. Erstellen Sie außerdem einen Plot, in dem Sie die benötigte Anzahl an Stützstellen für Toleranzen $10^{-1}, ..., 10^{-6}$ darstellen.