Vorlesung Numerische Mathematik 2

Kapitel 6: Numerische Differentiation und Integration

4. März 2017

Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften

Gliederung des Kapitels

Einführung

- Aus der Analysis sind uns die Problemstellungen der Differential- bzw. Integralrechnungen bereits bekannt.
- In diesem Kapitel werden wir nun auf einige Verfahren eingehen, mit denen diese Problemstellungen nicht analytisch, sondern numerisch angegangen werden können.

Lernziele

Lernziele:

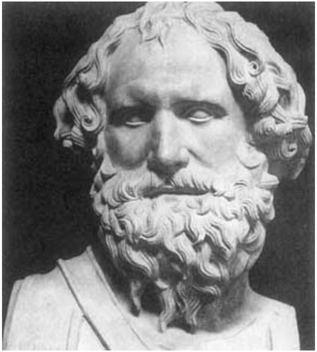
- Sie können mittels Differenzenformeln die Ableitung einer Funktion numerisch annähern und die dabei gemachten Fehler qualifizieren und mit dem Satz von Taylor auch quantifizieren.
- Sie können diese Differenzenformeln extrapolieren.
- Sie kennen die wichtigsten Verfahren der numerischen Integration und können damit bestimmte Integrale berechnen. Sie können die dabei auftretenden Fehler bestimmen.
- Sie können die Romberg-Extrapolation anwenden.
- Sie können die hier vorgestellten Verfahren in MATLAB implentieren.

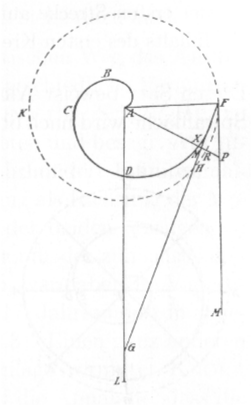
Zur historischen Entwicklung

Zur historischen Entwicklung

- Die Problemstellungen, Flächen zu berechnen oder Tangenten an geometrische Kurven zu legen, wurden bereits in der Antike untersucht.
- Archimedes $(287 - 212$ v.Chr.), einer der bedeutendsten Mathematiker der Antike, berechnete unendliche Reihen und ihm gelang die exakte Bestimmung des Flächeninhalts einer von einem Parabelbogen und einer Sekante begrenzten Fläche sowie die Konstruktion von Tangenten an die nach ihm benannte Archimedische Spirale.

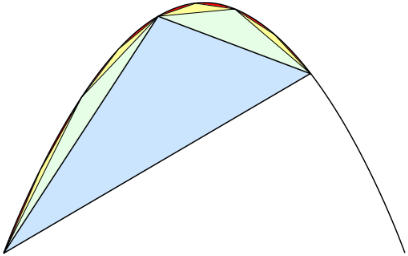
Zur historischen Entwicklung





- Archimedes und seine Tangentenkonstruktion.

Zur historischen Entwicklung



- Archimedes Berechung des Flächeninhalts A zwischen einer Sekanten und einer Parabel durch Aufsplitten der Fläche in Dreiecke.
- Er findet die folgende geometrische Reihe und ihren Summenwert (T ist die Fläche des blauen Dreiecks)

$$A = \left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} + \dots\right) T = \frac{4}{3} T$$

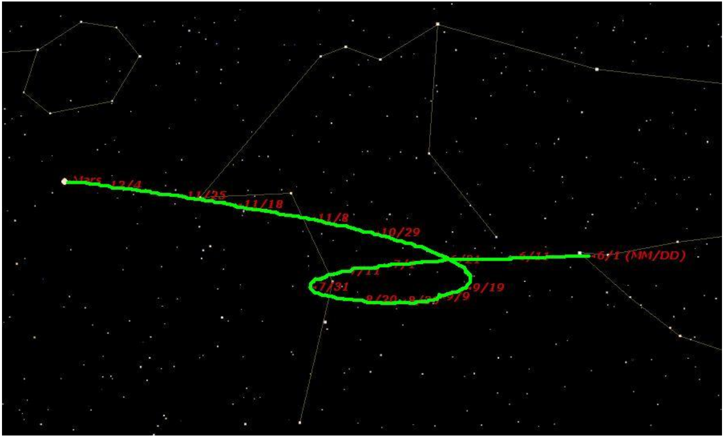
Zur historischen Entwicklung

- Das Konzept infinitesimal kleiner Grössen blieb aber über lange Zeit unvollständig und unverstanden.
- Bis ins 16. Jahrhundert gab es denn auf diesem Gebiet auch nur wenig Fortschritte.
- Der deutsche Astronom Johannes Keppler $(1571 - 1630)$ benutzte in seinem Werk Astronomia Nova (1609) bei der Berechnung der Marsbahn Methoden, die heute als numerische Integration bezeichnet würden.
- Er versuchte ab 1612, den Rauminhalt von Weinfässern zu berechnen.

Zur historischen Entwicklung

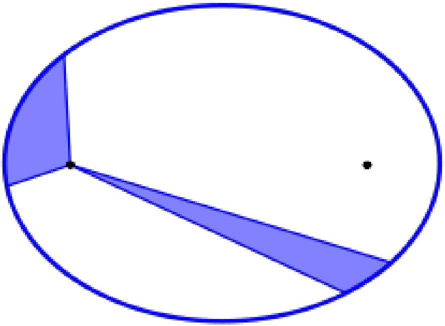
- Keppler, 1610

Zur historischen Entwicklung



- Marsbahn (Wikipedia Commons)

Zur historischen Entwicklung



- Zweites Keplersches Gesetz (Wikipedia Commons): Ein Planet auf der Umlaufbahn der Sonne überstreicht in gleichen Zeiträumen gleiche Flächen

Zur historischen Entwicklung

- Die eigentlichen Anfänge der Differentialrechnung gehen aber auf den französische Mathematiker Pierre de Fermat $(1601 - 1665)$ zurück.
- Er entwickelte 1628 die auch noch heute verwendete Methode, Extremstellen durch Nullsetzen der Tangentensteigung zu berechnen und konnte bereits Tangenten an Kegelschnitte und andere Kurven bestimmen.
- Sein Landsmann René Descartes $(1596 - 1650)$ entwickelte in La Géometrie 1637 eine Methode, Normalen zu berechnen.

Zur historischen Entwicklung

- Pierre de Format

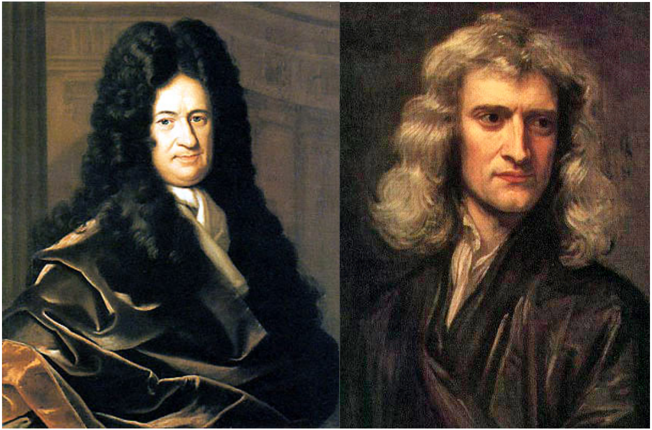
Zur historischen Entwicklung

- René Descartes, 1648

Zur historischen Entwicklung

- Ende des 17. Jahrhunderts, zur Zeit der Frühaufklärung, gelang es dann dem englischen Physiker Isaac Newton $(1643 - 1727)$ und dem deutschen Mathematiker Gottfried Wilhelm Leibniz $(1646 - 1716)$ unabhängig voneinander, widerspruchsfrei funktionierende Kalküle der Infinitesimalrechnung zu entwickeln.
- Ihre Arbeiten erlaubten das Abstrahieren von einer rein geometrischen Vorstellung.
- Leibniz entwickelte die heute gebräuchliche Notation mit dem Symbol $\int$ und dx.
- Newton benutzte sein Kalkül für bahnbrechende Berechnungen in der Mechanik. Im Jahr 1687 erschien sein Hauptwerk Philosophia Naturalis Principa Mathematica. Noch heute sprechen wir in der Physik in der klassischen Mechanik von den drei Newtonschen Gesetzen.

Zur historischen Entwicklung



- Gottfried Willhelm Leibniz (links) und Isaac Newton (rechts), um 1700

Zur historischen Entwicklung

- Nach Newton und Leibniz wurde die Infinitesimalrechnung durch die Schweizer Mathematiker und Brüder Jakob Bernoulli $(1654 - 1705)$ und Johann Bernoulli $(1667 - 1748)$ weiterentwickelt.
- Der Begriff des Integrals geht auf Johann Bernoulli zurück.
- Ebenfalls auf den Werken von Leibniz und Newton setzte der bedeutende Schweizer Mathematiker und Physiker Leonhard Euler (1707 in Basel geboren, 1783 in Petersburg gestorben) auf[1], der wegen seiner Beiträge in der Analysis und Zahlentheorie und weiteren Teilgebieten der Mathematik Berühmtheit erlangte.

[1] Von 1976-1995 auf der Schweizer 10 Franken Note abgebildet.

Zur historischen Entwicklung

- Jakob Bernoulli (links) und Johann Bernoulli (rechts)

Zur historischen Entwicklung

- Leonhard Euler, 1753

Zur historischen Entwicklung

- Im 19. Jahrhundert wurde die gesamte Analysis auf ein solideres Fundament gestellt.
- 1823 entwickelte der französische Mathematiker Augustin-Louis Cauchy (1789 – 1857) erstmals einen Integralbegriff, der den heutigen Ansprüchen an Stringenz genügt.

Zur historischen Entwicklung

- Augustin-Louis Cauchy

Numerische Differentiation

Numerische Differentiation

- In Anwendungen (z.B. dem Newton-Verfahren in Kap. 3 / Kap. 5 oder der Lösung von Differenzialgleichungen in Kap. 7) kann es notwendig werden, Funktionen zu differenzieren.
- Liegt die Funktion in Form einer differenzierbaren Funktionsgleichung $y = f(x)$ vor, kann die Ableitung $y' = f'(x)$ analytisch mit den Verfahren der Analysis berechnet werden.
- Ist dies mit einem gewissen Aufwand verbunden, kann es allerdings sinnvoller sein, eine numerische Näherung für die Ableitung zu verwenden.

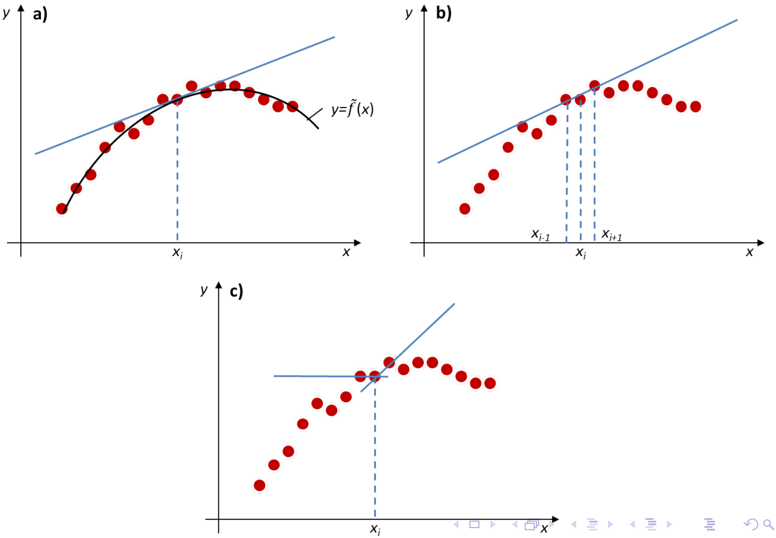
Problemstellung

- Liegt die Funktion als eine Tabelle diskreter Funktionswerte $(x_i, f(x_i))$ mit $i = 1, \ldots, m$ vor, wie das bei realen Daten i.d.R. der Fall ist, kann die Ableitung nicht analytisch berechnet werden.
- Dann gibt es zwei Optionen:

Problemstellung

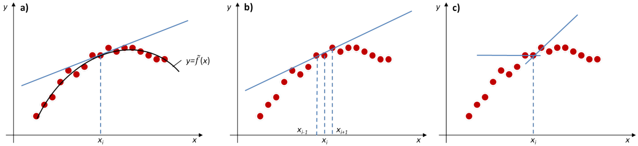
1. Die Wertepaare werden zuerst durch einen Fit angenähert und man erhält dadurch (näherungsweise) die Funktionsgleichung $y = \tilde{f}(x)$
   - Dies hat den Vorteil, dass eine allfällig vorhandene Streuung (engl. scatter) der Datenpunkte geglättet wird und der Einfluss von Fehlern und Ausreissern reduziert werden kann.
   - Anschliessend wird die Funktionsgleichung $y = \tilde{f}(x)$ entweder analytisch oder auch numerisch abgeleitet. Die Berechnung solcher Fits werden werden wir in Kap. 9 kennenlernen.
2. Man verzichtet auf einen Fit und wendet direkt numerische Verfahren an. Je nach Datenqualität und dem verwendeten Verfahren kann dies zu erheblichen Fehlern führen.

Problemstellung



Quiz 6.1

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2



Welche der Abbildungen zeigt, dass für die numerische Berechnung der Ableitung einer durch diskrete Wertepaare (x_i, y_i) definierten Funktion durch nur zwei aufeinanderfolgende Punkte zu erheblichen Abweichungen vom tatsächlichen Wert kommen kann?
Eine richtige Antwort:

a) ☐
b) ☐
c) ☐
d) ☐ weiss nicht

Vorwärtsdifferenz

- Der Einfachheit halber gehen wir in der folgenden Herleitung davon aus, dass wir es mit einer stetig differenzierbaren Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ zu tun haben mit einem beliebigen $x_0 \in [a, b]$.
- Gesucht sind Näherungswerte für die erste Ableitung $f'(x_0)$ oder auch für die k-te Ableitung $f^{(k)}(x_0)$.
- Dabei ist die (erste) Ableitung definiert als

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \\ &\approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} =: D_1 f(x_i, h). \end{aligned}$$

- Man nennt $D_1 f(x_0, h)$ eine *Differenzenformel* oder *finite Differenz erster Ordnung* oder in diesem Fall spezifisch *Vorwärtsdifferenz* (weshalb?). Sie gibt einen Näherungswert für die erste Ableitung $f'(x_0)$ sofern $h \in \mathbb{R}$ “ausreichend” klein ist.

Vorwärtsdifferenz

Bemerkung:

- Für eine stetige Funktion $f(x)$ kann h im Prinzip beliebig kleine Werte annehmen und $f(x_0 + h)$ ist berechenbar.
- Für eine diskrete, tabellierte Funktion $(x_i, f(x_i))_{1 \leq i \leq m}$ hingegen bezeichnet h die Schrittweite bzw. den Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Werten $h = x_{i+1} - x_i$.
- Bei tabellierten Funktionen machen wir in den folgenden Herleitungen der Einfachheit halber die Einschränkung, dass h konstant ist, die Funktion also an $m+1$ äquidistanten Punkten gegeben ist. Es gilt dann mit $x_{i+1} = x_i + h$:

$$D_1 f(x_i, h) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}.$$

Vorwärtsdifferenz

- Die Übertragung auf den Spezialfall einer tabellierten Funktion $(x_i, f(x_i))_{1 \le i \le m}$ ist also einfach, wenn x_0 durch x_i ersetzt wird und die Schrittweite $h = x_{i+1} - x_i$ als konstant genommen wird.

Quiz 6.2

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Für eine auf einem Intervall $[a,b]$ definierte stetige Funktion f ist die Vorwärtsdifferenz $D_1 f(x_i,h)$ für eine beliebige Schrittweite $h>0$ an der Stelle $x_i \in [a,b]$ definiert durch

$$D_1 f(x_i,h) = \frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h},$$

für eine auf dem selben Intervall durch diskrete Wertepaar $(x_i,y_i)_{1\le i\le n}$ definierte Funktion $\tilde{f}$ hingegen als

$$D_1 \tilde{f}(x_i,h) = \frac{\tilde{f}(x_{i+1})-\tilde{f}(x_i)}{x_{i+1}-x_i}.$$

Weshalb?

Eine richtige Antwort:

A. Eine nicht-stetige Funktion ist bei x_i nicht differenzierbar.

B. Bei einer stetigen Funktion kann h beliebige Werte annehmen, für eine diskrete Funktion kann h nur diskrete Werte annehmen mit $h_i = x_{i+1} - x_i$.

C. Wegen der Maschinengenauigkeit kann h nicht kleiner als die Differenz $x_{i+1} - x_i$ werden.

D. Weiss nicht.

Vorwärtsdifferenz

- Für die Herleitung von Differenzenformeln und der Abschätzung ihrer Fehler verwenden wir den Satz von Taylor.

Satz 6.1: Taylor-Entwicklung

- Die Funktion $f : [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ sei $(n+1)$-mal stetig differenzierbar, $x_0 \in [a,b]$. Dann gibt es für alle $x \in [a,b]$ ein z zwischen x_0 und x, so dass

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k + R_{n+1}(x)$$

mit dem Taylorschen Restglied

$$R_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(z)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}.$$

Vorwärtsdifferenz

- Das Restglied hat also genau die gleiche Form wie der $(n+1)-$te Summand, nur dass die Ableitung an der (unbekannten) Zwischenstelle z ausgewertet wird.
- Konkret bedeutet dies, dass wir $f(x)$ mittels $x = x_0 + h$ bzw. $h = x - x_0$ schreiben können als

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0 + h) \\ &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}h^4 + \ldots \\ &\quad + \frac{f^{(n+1)}(z)}{(n+1)!}h^{n+1}. \end{aligned}$$

Vorwärtsdifferenz

- Für die erste Ableitung ($n = 1$) erhalten wir

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(z)}{2}h^2$$

bzw.

$$f'(x_0) = \underbrace{\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}_{D_1 f(x_0, h)} - \frac{f''(z)}{2}h$$

und daraus folgt für den Fehler der Differenz erster Ordnung

$$D_1 f(x_0, h) - f'(x_0) = \frac{f''(z)}{2}h.$$

Diskretisierungsfehler

- Wir definieren den Fehler einer Differenzenformel wie folgt:

Definition 6.1 [1]: Diskretisierungsfehler / Fehlerordnung

- Sei $Df(x_0, h)$ eine Differenzenformel für die Näherung von $f'(x_0)$. Dann bezeichnet man den absoluten Fehler

$$\mid Df(x_0, h) - f'(x_0) \mid$$

als **Diskretisierungsfehler**.

- Die Differenzenformel $Df(x_0, h)$ hat die **Fehlerordnung** (oder kurz: Ordnung) k, falls es ein $C > 0$ gibt, so dass für genügend kleines h gilt:

$$\mid Df(x_0, h) - f'(x_0) \mid \leq C \cdot h^k$$

Diskretisierungsfehler

- Bemerkungen:
  1. Die obige Definition lässt sich entsprechend anwenden auf Differenzenformeln höherer Ableitungen.
  2. Man bezeichnet Ausdrücke, die für genügend kleines h durch Ch^k beschränkt werden, auch mit $O(h^k)$ und man schreibt $\mid Df(x_0, h) - f'(x_0) \mid = O(h^k)$.

Beispiel 6.1

- Bestimmen Sie die Fehlerordnung von $D_1 f(x_0, h)$.

Beispiel 6.1: Lösung

- Aus $D_1 f(x_0, h) - f'(x_0) = \frac{f''(z)}{2} h$ folgt sofort $| D_1 f(x_0, h) - f'(x_0) | \leq \frac{|f''(z)|}{2} h \leq Ch$ wobei wir $C = \frac{1}{2} \max_{x \in I} f''(x)$ für $I = [x_0, x_0 + h]$ gewählt haben.
- Also ist $k = 1$.

Quiz 6.3

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Welche Aussagen bzgl. der Taylor-Entwicklung

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k + R_{n+1}(x)$$

treffen zu? Mehrere richtige Antworten möglich.

- A. Mittels der Taylor-Entwicklung können beliebige, $(n+1)$-mal stetig differenzierbare Funktionen $f(x)$ in der Umgebung von x_0 durch ein Polynom vom Grad n angenähert werden.
- B. Die Koeffizienten a_k des Näherungspolynoms $a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)^2 + ...$ an die Funktion $f(x)$ bei x_0 berechnen sich als $a_k = [f(x_0)]^k / k!$
- C. Die Taylor-Entwicklung von $\sin(x)$ in der Umgebung von $\pi/2$ berechnet sich zu

$$\begin{aligned}
\sin(x) &= \frac{f^{(0)}(\frac{\pi}{2})}{0!}(x-\frac{\pi}{2})^0 + \frac{f^{(1)}(\frac{\pi}{2})}{1!}(x-\frac{\pi}{2})^1 + \frac{f^{(2)}(\frac{\pi}{2})}{2!}(x-\frac{\pi}{2})^2 + ... \\
&= \frac{\sin(\frac{\pi}{2})}{1}(x-\frac{\pi}{2})^0 + \frac{\cos(\frac{\pi}{2})}{1}(x-\frac{\pi}{2})^1 - \frac{\sin(\frac{\pi}{2})}{2}(x-\frac{\pi}{2})^2 + ... \\
&= 1 - \frac{1}{2}(x-\frac{\pi}{2})^2 + ...
\end{aligned}$$

- D. Die Taylor-Entwicklung kann dazu verwendet werden, um Näherungsformeln für die erste oder höhere Ableitungen zu berechnen.
- E. Die Taylor-Entwicklung kann dazu verwendet werden, um den Fehler von Näherungsformeln für die erste oder höhere Ableitungen zu berechnen.
- F. Ich kann keine der Fragen beantworten.

Aufgabe 6.1

- Testen Sie die Formel $D_1 f(x_0, h) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ für $f(x) = \sin(x)$ und $x_0 = 1$ für verschiedene Werte von h und beobachten Sie, wie sich der Diskretisierungsfehler $|\, D_1 f(x_0, h) - f'(x_0)\,|$ verhält.

Aufgabe 6.1: Lösung

h	$D_1 f(1,h)$	$\mid D_1 f(1,h) - f'(x_0) \mid$
10^{-2}		
10^{-4}		
10^{-6}		
10^{-8}		
10^{-10}		
10^{-12}		
10^{-14}		
10^{-15}		
10^{-16}		

Aufgabe 6.1: Lösung

Optimales h (?)

- Es gilt für $D_1 f(x_0, h)$ (ohne Herleitung):

$$h_{opt} \approx \sqrt{4 \cdot eps \frac{|\, f(x_0)\, |}{|\, f''(x_0)\, |}}$$

- Der grosse Nachteil dieser Faustformel ist offensichtlich, dass man $f''(x_0)$ berechnen (oder abschätzen) muss, um eine Näherung für $f'(x_0)$ zu erhalten.
- Deshalb ist diese Faustformel für die Praxis irrelevant.

+ Wichtig ist allein die Erkenntnis, dass die Schrittweite h nicht beliebig reduziert werden kann, weil sonst der ansteigende Rundungsfehler den kleiner werdenden Diskretisierungsfehler übertrifft.

Beispiel 6.2

- Berechnen Sie für Aufgabe 6.1 mit obiger Formel das optimale h für eine 52-stellige binäre Rechnung.

Beispiel 6.2: Lösung

- Lösung: mit $eps = 2^{-52}$, $f(x) = \sin(x)$ und $x_0 = 1$ ergibt sich

$$h_{opt} = \sqrt{2^{-50} \cdot \frac{|\sin(1)|}{|-\sin(1)|}} \approx 2.98 \cdot 10^{-8}$$

welches dem Schnittpunkt in der vorhergehenden Abbildung entspricht.

Zentrale Differenz

- Wir wollen versuchen, eine genauere Differenzenformeln als $D_1 f$ für die erste Ableitung von f zu berechnen, d.h. wir möchten eine höhere Fehlerordnung erzielen.
- Mit Verwendung von $x = x_0 \pm h$ und $n = 3$ erhalten wir durch einsetzen in die Taylorsche Formel

$$
\begin{aligned}
f(x_0+h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \frac{f'''(x_0)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(z_1)}{24}h^4 \\
f(x_0-h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 - \frac{f'''(x_0)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(z_2)}{24}h^4
\end{aligned}
$$

Zentrale Differenz

- Subtrahieren der beiden Ausdrücke führt zu

$$\begin{aligned} f(x_0+h)-f(x_0-h) &= 2f'(x_0)h+\frac{f'''(x_0)}{3}h^3+\dots \\ \Rightarrow f'(x_0) &= \underbrace{\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}}_{D_2f(x_0,h)}-\frac{f'''(x_0)}{6}h^2+\dots \end{aligned}$$

Zentrale Differenz

- Wir erhalten so den *zentralen Differenzenquotienten* bzw. die *zentrale Differenz* $D_2 f(x_0, h)$ als Näherung für $f'(x_0)$

$$D_2 f(x_0, h) \quad = \quad \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

mit dem Diskretisierungsfehler der Fehlerordnung $O(h^2)$:

$$\mid D_2 f(x_0, h) - f'(x_0) \mid = \frac{\mid f'''(x_0) \mid}{6} h^2 + \ldots$$

Aufgabe 6.2

- Testen Sie die Formel für $D_2 f$ für $f(x) = \sin x$ und $x_0 = 1$ mit verschiedenen Werten für h und den dabei auftretenden Diskretisierungsfehler.
- Bei welchem h wird der Fehler möglichst klein? Vergleichen Sie mit Aufgabe 6.1.

Aufgabe 6.2: Lösung

h	$D_1 f(1,h)$	$\vert D_1 f(1,h) - f'(x_0) \vert$
10^{-2}		
10^{-4}		
10^{-6}		
10^{-8}		
10^{-10}		
10^{-12}		
10^{-14}		
10^{-15}		
10^{-16}		
10^{-17}		

Rückwärtsdifferenz

Zur Vollständigkeit definieren wir in Analogie zur Vorwärtsdifferenz mit der Fehlerordnung $O(h)$

$$D_1 f(x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

und der zentralen Differenz mit der Fehlerordnung $O(h^2)$

$$D_2 f(x_0, h) \quad = \quad \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

noch die Rückwärtsdifferenz mit der Fehlerordnung $O(h)$

$$D_3 f(x_0, h) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

Rückwärtsdifferenz

- Ein Beispiel, weshalb die zentrale Differenz i.d.R. eine bessere Näherung darstellt, ist in der folgenden Abbildung gegeben.
- Auch wird ersichtlich, dass am linken Rand des Definitionsbereichs einer Funktion (bzw. der diskreten Daten) nur die Vorwärtsdifferenz berechnet werden kann, am rechten Rand nur die Rückwärtsdifferenz.

Rückwärtsdifferenz

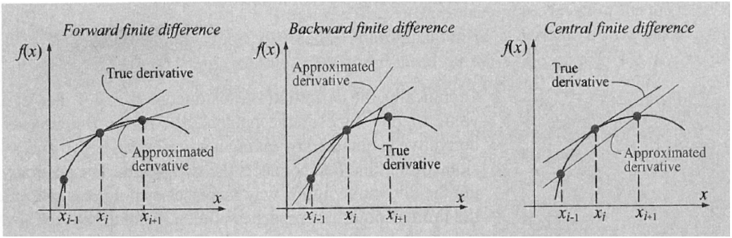


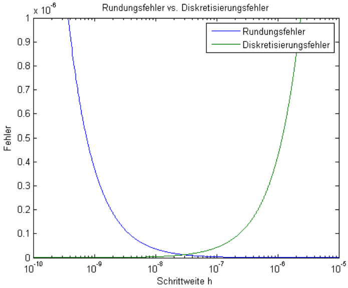
Abbildung: Vorwärtsdifferenz (links), Rückwärtsdifferenz (Mitte) und zentrale Differenz (rechts) als Näherung für die Ableitung $f'(x_i)$. Aus [9].

Quiz 6.4

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Welche Aussagen bzgl. des Rundungs- und Diskretisierungsfehler treffen zu:

- A. Der Diskretisierungsfehler $|D_1 f(x_0, h) - f'(x_0)|$ nimmt quadratisch mit der Schrittweite h ab.
- B. Es gilt $|D_1 f(x_0, h) - f'(x_0)| = O(h)$.
- C. Für $h \longrightarrow 0$ strebt der Diskretisierungsfehler $|D_1 f(x_0, h) - f'(x_0)|$ gegen Null, d.h. mit der Vorwärtsdifferenz $D_1 f(x_0, h)$ kann die erste Ableitung $f'(x_0)$ auf einem Computer beliebig genau berechnet werden.
- D. Bei der numerischen Berechnung der ersten Ableitung spielen sowohl der Diskretisierungsfehler als auch Rundungsfehler eine wichtige Rolle.
- E. Der Rundungsfehler ist für kleine h vernachlässigbar, der Diskretisierungsfehler ist für grosse h vernachlässigbar.
- F. Der Rundungsfehler nimmt für kleine h zu, der Diskretisierungsfehler nimmt für grosse h zu.
- G. Die optimale Schrittweite ergibt sich dort, wo die Summe des Rundungsfehlers und des Diskretisierungsfehlers minimal ist.
- H. Ich kann keine der Fragen beantworten.



Differenzenformeln für höhere Ableitungen

Analog zur ersten Ableitung können wir Differenzenformeln als Näherung für die zweite Ableitung $f''(x_0)$ konstruieren, zum Beispiel die

$$\begin{aligned}
\textbf{Vorwärtsdifferenz: } D_4 f(x_0,h) &= \frac{f(x_0+2h)-2f(x_0+h)+f(x_0)}{h^2} \\
\textbf{zentrale Differenz: } D_5 f(x_0,h) &= \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2} \\
\textbf{Rückwärtsdifferenz: } D_6 f(x_0,h) &= \frac{f(x_0)-2f(x_0-h)+f(x_0-2h)}{h^2}
\end{aligned}$$

Aufgabe 6.3

- Leiten Sie mittels der Gleichungen 6.1 und 6.2 die zentrale Differenz $D_5 f(x_0, h)$ her und bestimmen Sie deren Fehlerordnung.

Aufgabe 6.3: Lösung

Differenzenformeln für partielle Ableitungen

- Betrachten wir jetzt Funktionen mit mehreren Variablen.
- Für deren partielle Ableitungen wendet man die Differenzenformeln jeweils nur auf die entsprechende Variable an.
- Ein Beispiel: sei $u = u(x, y)$ eine Funktion zweier Variablen. Für die partielle erste Ableitung nach x ergibt sich dann

$$
\begin{aligned}
D_1 : \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0) &\approx \frac{u(x_0 + h, y_0) - u(x_0, y_0)}{h} \\
D_2 : \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0) &\approx \frac{u(x_0 + h, y_0) - u(x_0 - h, y_0)}{2h}
\end{aligned}
$$

Differenzenformeln für partielle Ableitungen

- Für die zweite partielle Ableitung nach x erhalten wir

$$
\begin{aligned}
D_4 : \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, y_0) &\approx \frac{u(x_0+2h, y_0) - 2u(x_0+h, y_0) + u(x_0, y_0)}{h^2} \\
D_5 : \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, y_0) &\approx \frac{u(x_0+h, y_0) - 2u(x_0, y_0) + u(x_0-h, y_0)}{h^2} \\
D_6 : \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, y_0) &\approx \frac{u(x_0, y_0) - 2u(x_0-h, y_0) + u(x_0-2h, y_0)}{h^2}
\end{aligned}
$$

- Analog geht man für die partiellen Ableitungen nach y vor.

Extrapolation von Differenzenformeln

- Wir haben gesehen, dass Differenzenformeln höherer Ordnung in der Regel genauer sind als Formeln niederer Ordnung.
- Es gibt rekursive Methoden, aus Formeln niederer Ordnung Formeln höherer Ordnung zu gewinnen.
- Diese Methoden laufen unter dem Begriff der **Extrapolation**.
- Eine Anwendung davon sind die hier vorgestellten Algorithmen zur $h-$Extrapolation bzw. h^2-Extrapolation.
- Wir wenden diese Algorithmen hier auf den Fall unserer Differenzenformeln an und werden sie auch im Zusammenhang mit der numerischen Integration erneut antreffen.

Extrapolation von Differenzenformeln

Algorithmus zur h-Extrapolation [1]:

- Sei $D(h)$ eine Formel zur Näherung von $\bar{D}$ mit der Fehlerentwicklung

$$D(h) - \bar{D} = c_1 h^1 + c_2 h^2 + c_3 h^3 + \dots$$

Sei $h > 0$ eine Ausgangsschrittweite und $D_{i0} = D(\frac{h}{2^i})$ für $i = 0, 1, \dots, m$.
Dann sind durch die Rekursion

$$D_{ik} = \frac{2^k \cdot D_{i+1,k-1} - D_{i,k-1}}{2^k - 1}$$

$$(k = 1, 2, \dots, m \text{ und } i = 0, 1, \dots, m - k)$$

Näherungen für $\bar{D}$ gegeben mit der Fehlerordnung $k + 1$.

Extrapolation von Differenzenformeln

- Dies ist in folgendem Schema abgebildet für $n = 3$, wobei nun $D_{00} = D(h)$, $D_{10} = D(\frac{h}{2})$, $D_{20} = D(\frac{h}{4})$, und $D_{30} = D(\frac{h}{8})$ darstellen und die höheren Ordnungen sich wie folgt berechnen (aus [1]):

$$
\begin{array}{llll}
D_{i0} & D_{i1} & D_{i2} & D_{i3} \\
\hline
D_{00} & & & \\
 & 2\,D_{10} - D_{00} = D_{01} & & \\
D_{10} & & \dfrac{4\,D_{11} - D_{01}}{3} = D_{02} & \\
 & 2\,D_{20} - D_{10} = D_{11} & & \dfrac{8\,D_{12} - D_{02}}{7} = D_{03} \\
D_{20} & & \dfrac{4\,D_{21} - D_{11}}{3} = D_{12} & \\
 & 2\,D_{30} - D_{20} = D_{21} & & \\
D_{30} & & &
\end{array}
$$

Bemerkungen:

- Dieses Schema lässt sich in unserem Fall für die Vorwärts- und Rückwärtsdifferenz $D_1 f$ und $D_3 f$ anwenden.
- Das Aufstellen des Schemas benötigt keine weiteren Funktionsauswertungen mehr. Der hauptsächliche Aufwand liegt darin, die erste Spalte zu berechnen.
- Wie hoch sich die Fehlerordnung schrauben lässt, hängt im wesentlichen davon ab, wie oft f differenzierbar ist.

Aufgabe 6.4

- Berechnen Sie mit der Differenzenformel $D_1 f(x_0, h) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ für $f(x) = \sin(x)$ und den Schrittweiten $h = 0.1,\ 0.05,\ 0.025,\ 0.0125$ Näherungswerte für $f'(1)$ und verbessern Sie diese Näherung anschliessend durch Extrapolation, d.h. berechnen Sie die D_{ik} für $i = 0,1,2,3$ und $k = 0,1,2,3$ mit obigem Dreiecksschema. Berechnen Sie jeweils für jeden Extrapolationsschritt den zugehörigen Fehler $E_{ik} = \mid D_{ik} - f'(1) \mid$. Was beobachten Sie?

h	D_{i0}	D_{i1}	D_{i2}	D_{i3}	E_{i0}	E_{i1}	E_{i2}	E_{i3}
0.1								
0.05								
0.025								
0.0125								

Aufgabe 6.4: Lösung

h^2-Extrapolation

- Im Falle, dass eine Differenzenformel eine Fehlerentwicklung mit nur geraden Potenzen hat (wie z.B. $D_2 f$), dann lässt sich die Extrapolation auch nach folgendem, noch effizienteren Schema berechnen:

h^2-Extrapolation

Algorithmus zur h^2-Extrapolation [1]:

- Sei $D(h)$ eine Formel zur Näherung von $\bar{D}$ mit der Fehlerentwicklung

$$D(h) - \bar{D} = c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \ldots$$

Sei $h > 0$ eine Ausgangsschrittweite und $D_{i0} = D(\frac{h}{2^i})$ für $i = 0, 1, \ldots, m$.
Dann sind durch die Rekursion

$$D_{ik} = \frac{4^k \cdot D_{i+1,k-1} - D_{i,k-1}}{4^k - 1}$$

$$(k = 1, 2, \ldots, m \text{ und } i = 0, 1, \ldots, m-k)$$

Näherungen für $\bar{D}$ gegeben mit der Fehlerordnung $2(k+1)$.

h^2-Extrapolation

Oder in der folgenden Darstellung:

$$
\begin{array}{llll}
D_{i0} & D_{i1} & D_{i2} & D_{i3} \\
\hline
D_{00} & & & \\
 & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{4\,D_{10}-D_{00}}{3} = D_{01} & & \\
D_{10} & & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{16\,D_{11}-D_{01}}{15} = D_{02} & \\
 & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{4\,D_{20}-D_{10}}{3} = D_{11} & & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{64\,D_{12}-D_{02}}{63} = D_{03} \\
D_{20} & & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{16\,D_{21}-D_{11}}{15} = D_{12} & \\
 & \searrow\!\!\!\nearrow \dfrac{4\,D_{30}-D_{20}}{3} = D_{21} & & \\
D_{30} & & &
\end{array}
$$

Aufgabe 6.5

- Wiederholen Sie Aufgabe 6.4, aber diesmal mit $D_2 f$

Aufgabe 6.5: Lösung

Quiz 6.5

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Welche Aussagen bzgl. des $h-$Algorithmus und h^2-Algorithmus treffen zu? Mehrere richtige Antworten möglich:

- A. Beide Algorithmen sind rekursiv und verwenden Differenzenformeln niederer Ordnung, um den Diskretisierungsfehler zu reduzieren.
- B. Beide Algorithmen sind für $D_1 f$ anwendbar.
- C. Der $h-$Algorithmus ist für $D_1 f$ anwendbar, der h^2-Algorithmus für $D_2 f$ anwendbar.
- D. Der h^2-Algorithmus ist für alle Differenzenformeln mit einer Fehlerentwicklung mit ungeraden Potenzen von h anwendbar, der $h-$Algorithmus für Fehlerentwicklungen mit geraden Potenzen.
- E. Ich kann keine der Fragen beantworten.

Numerische Integration

Numerische Integration

- Nach der Differentiation wollen wir uns nun den numerischen Verfahren der Integration zuwenden.
- Im Gegensatz zur Ableitung, die für alle differenzierbaren Funktionen analytisch berechnet werden kann, können Integrale für eine Vielzahl von Funktionen nicht analytisch gelöst werden.
- Verfahren zur numerischen Integration (man spricht auch von Quadratur) spielen daher eine wichtige Rolle, wie z.B. bei der numerischen Lösung von Differentialgleichungen in Kap. 7.

Problemstellung

- Für eine Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ soll das bestimmte Integral

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx$$

auf einem Intervall $[a, b]$ numerisch berechnet werden.

- Die Funktion selbst kann wieder als Funktionsgleichung $y = f(x)$ oder als Wertetabelle $(x_i, f(x_i))$ mit $i = 1, ..., m$ vorliegen.

Problemstellung

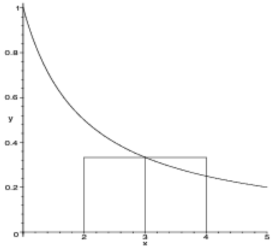
- Wir beschränken uns hier auf einige "Klassiker" unter den Quadratur- bzw. Integrationsverfahen, nämlich die **Newton-Cotes Formeln** im Rahmen der Rechtecks-, Trapez-, und Simpsonregel sowie die **Gauss-Formeln** und die **Romberg-Extrapolation**.
- Quadraturverfahren haben dabei im Allgemeinen die Form

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i).$$

Dabei nennt man die x_i die *Stützstellen* oder *Knoten* der Quadraturformel und die a_i die *Gewichte*.

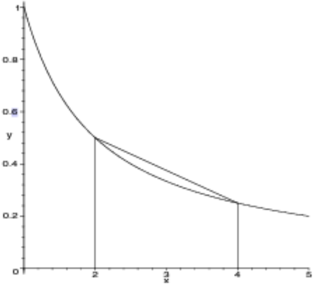
Beispiel 6.3

- Es soll $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ angenähert werden, indem $f(x) = \frac{1}{x}$ auf dem Intervall [2, 4] durch eine Konstante angenähert wird.
- Lösung: Wir wählen den Funktionswert in der Mitte des Intervalls [2, 4], also $f(3) = \frac{1}{3}$ und erhalten damit als Näherungswert $\int_2^4 \frac{1}{x} dx \approx (4-2) \cdot \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$ (vergleich Skizze unten).
  Zum Vergleich: der exakte Wert ist $\int_2^4 \frac{1}{x} dx = \ln(4) - \ln(2) = 0.6931\ldots$.



Beispiel 6.3 Fortsetzung

- Jetzt soll $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ durch ein Trapz angenähert werden.
- Lösung: $\int_2^4 \frac{1}{x} dx \approx \frac{f(2)+f(4)}{2}(4-2) = 0.75$



Rechteck- & Trapezregel

- Wir haben dabei die einfachste Form der Rechtecks- bzw. Trapezregel verwendet. Ihre Definition ist:

Definition 6.2 [1]: Rechteckregel / Trapezregel

- Die **Rechteckregel** (bzw. Mittelpunktsregel) Rf und die **Trapezregel** Tf zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

sind definiert als

$$\begin{aligned} Rf &= f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot(b-a) \\ Tf &= \frac{f(a)+f(b)}{2}\cdot(b-a) \end{aligned}$$

Rechteck- & Trapezregel

- Offensichtlich lohnt es sich, zur Steigerung der Genauigkeit das Intervall $[a, b]$ zu unterteilen in n Subintervalle der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ und anschliessend aufzusummieren.
- Dann erhalten wir die summierte Rechtecks- bzw. Trapezregel:

Rechteck- & Trapezregel

Definition 6.3 [1]: summierte Rechteckregel / summierte Trapezregel

- Sei $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ stetig, $n\in\mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i,x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ mit der konstanten Breite $h=x_{i+1}-x_i=\frac{b-a}{n}$ und $x_i=a+i\cdot h$ für $i=0,\ldots,n-1$.
  Die **summierte Rechteckregel** (bzw. summierte Mittelpunktsregel) $Rf(h)$ und die **summierte Trapezregel** $Tf(h)$ zur Approximation von $\int_a^b f(x)\,dx$ sind gegeben durch

$$Rf(h) = h\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i+\frac{h}{2})$$

$$Tf(h) = h\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$

Aufgabe 6.6

- Berechnen Sie $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ näherungsweise mit der summierten Mittelpunkts- bzw. Trapezregel mit $n = 4$.

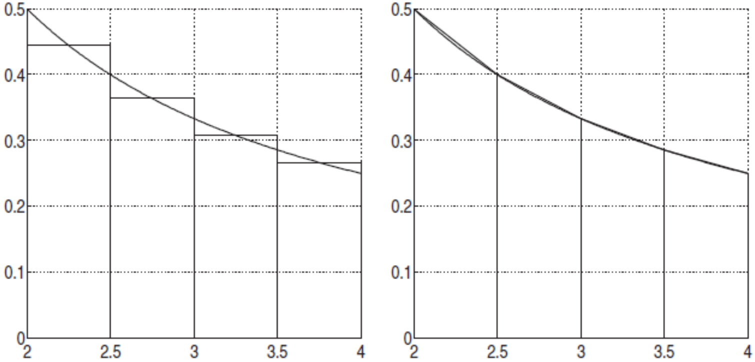


Abbildung: Summierte Rechteckregel (links) und summierte Trapezregel (rechts) für $n = 4$ zur Berechnung von $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$.

Aufgabe 6.6: Lösung

Quiz 6.6

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Für stetige Funktionen $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ kann die Anzahl $n\in\mathbb{N}$ der Anzahl Subintervalle $[x_i,x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ frei gewählt werden. Die Schrittweite ist dann konstant mit $h=x_{i+1}-x_i=\frac{b-a}{n}$ und $x_i=a+i\cdot h$ für $i=0,...,n-1$ und es gilt:

$$Tf(h) \quad = \quad h\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\right)$$

Wie lautet die korrekte Formulierung für eine tabellierte Funktion, die nur durch die Wertepaare $(x_i,y_i)_{0\le i\le n-1}$ gegeben ist mit $h_i=x_{i+1}-x_i$? Eine korrekte Antwort:

A	B
$Tf=h_i\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\right)$	$Tf=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\cdot(x_{i+1}-x_i)$

C
$Tf=h_i\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\cdot h_i\right)$

Die Simpson-Regel

- Wir erhalten die Mittelpunkts- bzw. Rechtecksregel, wenn wir $f(x)$ in $\int_a^b f(x)dx$ durch eine Konstante (Polynom 0. Grades) ersetzen.
- Wenn wir $f(x)$ durch eine Gerade (Polynom 1. Grades) ersetzen, erhalten wir analog die Trapezregel.
- Nun können wir noch einen Schritt weitergehen und $f(x)$ durch ein Polynom $p(x)$ 2. Grades ersetzen.

Die Simpson-Regel

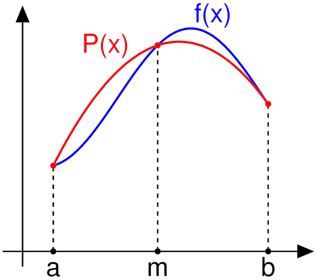


Abbildung: Die Funktion $f(x)$ wird auf dem Intervall $[a, b]$ durch ein Polynom $P(x)$ an den Stellen $x_1 = a$, $x_2 = m = \frac{b+a}{2}$ und $x_3 = b$ angenähert.

Die Simpson-Regel

- Wir machen für $p(x)$ und $x \in [a,b]$ den Ansatz

$$p(x) = \alpha + \beta(x-a) + \gamma(x-a)(x-b)$$

und fordern, dass $p(x)$ an den Stellen $x_1 = a$, $x_2 = \frac{b+a}{2}$ und $x_3 = b$ exakt mit $f(x)$ übereinstimmt, also:

$$\begin{aligned}
p(a) &= \alpha \overset{!}{=} f(a) \\
p\left(\frac{b+a}{2}\right) &= \alpha + \beta\left(\frac{b+a}{2} - a\right) + \gamma\left(\frac{b+a}{2} - a\right)\left(\frac{b+a}{2} - b\right) \\
&= \alpha + \beta\left(\frac{b-a}{2}\right) + \gamma\left(\frac{b-a}{2}\right)\left(\frac{a-b}{2}\right) \overset{!}{=} f\left(\frac{b+a}{2}\right) \\
p(b) &= \alpha + \beta(b-a) \overset{!}{=} f(b)
\end{aligned}$$

Dies ist ein einfach lösbares lineares Gleichungssystem mit den unbekannten α, β, γ.

Die Simpson-Regel

- Die Lösung ist

$$
\begin{aligned}
\alpha &= f(a) \\
\beta &= \frac{f(b) - f(a)}{b-a} \\
\gamma &= \frac{f(\frac{b+a}{2}) - f(a) - \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \cdot h}{-h^2} = \frac{f(a) - 2f(\frac{b+a}{2}) + f(b)}{2h^2},
\end{aligned}
$$

wobei wir $h = \frac{b-a}{2}$ gesetzt haben. Damit ist das Näherungspolynom $p(x)$ eindeutig bestimmt und wir können es mittels der Potenzregel einfach integrieren.

Die Simpson-Regel

- Wegen

$$f(x) \approx p(x)$$

gilt also

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

Dies ist die *Simpson-Regel*.

Die Simpson-Regel

- Nun können wir natürlich wie bei der Rechtecks- und Trapez-Regel die Genauigkeit erhöhen, indem wir das Intervall $[a, b]$ statt nur in 2 in n Intervalle mit der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ unterteilen und aufsummieren.
- Wir erhalten dann die *summierte Simpsonregel*:

$$Sf(h) \equiv \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 2\sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1}+x_k}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

wobei wir $x_k = a + k \cdot h$ gesetzt haben.

Aufgabe 6.7

- Zeigen Sie, dass die summierte Simpsonregel als gewichtetes Mittel der summierten Trapez- und Rechteckregel interpretiert werden kann:

$$Sf(h) = \frac{1}{3}\left(Tf(h) + 2Rf(h)\right)$$

Aufgabe 6.7 Lösung

Fehler der summierten Quadraturformeln

- Der Fehler einer Näherung ist wie immer definiert als der Betrag der Differenz zwischen dem exakten Wert und der Näherung.
- Für die summierte Rechtecksformel $Rf(h)$, die summierte Trapezformel $Tf(h)$ und die summierte Simpsonformel $Sf(h)$ gelten die folgenden Fehlerabschätzungen (ohne Beweis):

Fehler der summierten Quadraturformeln

Satz 6.2 [1]: Fehlerabschätzung für summierte Quadraturformeln

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Rf(h) \right| \le \frac{h^2}{24}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Tf(h) \right| \le \frac{h^2}{12}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Sf(h) \right| \le \frac{h^4}{2880}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Aufgabe 6.8

- Sie wollen
$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2}\,dx$$
näherungsweise mit der summierten Trapezregel auf einen absoluten Fehler von maximal 10^{-5} genau berechnen.
- Bestimmen Sie eine geeignete Schrittweite h und berechnen Sie entsprechend den Wert der summierten Trapezregel.

Aufgabe 6.8: Lösung

Quiz 6.7

Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Welche Aussagen bzgl. der Quadraturformeln stimmen? Mehrere richtige Antworten möglich:

- A. Die Rechtecksregel nähert die zu integrierende Funktion auf dem Integrationsintervall durch eine Konstante an, die Trapezregel durch eine Gerade, die Simpsonregel durch eine Parabel.
- B. Die summierte Trapezregel ist um einen Faktor 2 genauer als die summierte Rechtecksregel.
- C. Für die gleiche Genauigkeit benötigt die summierte Trapezregel eine kleinere Schrittweite h und damit mehr Schritte als die summierte Rechtecksregel.
- D. Die summierte Rechtecksregel ist genauer als die summierte Trapezregel, aber weniger genau als die summierte Simpsonregel.
- E. Die summierte Simpsonregel kann nicht aus der summierten Trapez- und Rechtecksregel hergeleitet werden.
- F. Ich kann keine der Fragen beantworten.

Gaussformeln

- Bisher haben wir die Stützstellen x_i äquidistant gewählt (d.h. die Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ war konstant) und damit die Rechtecks-, die Trapez- und die Simpson-Formel hergeleitet.
- Diese drei Formeln werden auch als Newton-Cotes Formeln der Ordnung $N = 0$, 1 und 2 bezeichnet (entspricht dem Grad des verwendeten Polynoms).
- Die Stützstellen x_i müssen jedoch nicht zwingend äquidistant sein, sondern können so gewählt werden, dass sie das Integral $\int_a^b f(x)dx$ 'optimal' approximieren.

Gaussformeln

- Man erhält dann die sogenannten Gauss-Formeln. Dafür werden die Stützstellen x_i und die Gewichte a_i in der generellen Quadraturformel

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$$

so gewählt, dass die 'Fehlerordnung' möglichst hoch wird bzw. der Fehler

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I(f) \right|$$

möglichst klein.

Gaussformeln

- Wir wollen an dieser Stelle auf die genaue Herleitung verzichten und begnügen uns damit, die Gaussformeln für $n = 1$, 2 und 3 anzugeben (also für eine, zwei und drei Stützstellen).

Satz 6.3 [1]: Gauss Formeln für $n = 1, 2, 3$:

- Die Gauss Formeln für $n = 1, 2, 3$ für $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$ lauten:
  - n = 1: $G_1 f = (b-a)\cdot f(\frac{b+a}{2})$
  - n = 2: $G_2 f = \frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\cdot\frac{b-a}{2}+\frac{b+a}{2}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\cdot\frac{b-a}{2}+\frac{b+a}{2}\right)\right]$
  - n = 3: $G_3 f = \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9}\cdot f\left(-\sqrt{0.6}\cdot\frac{b-a}{2}+\frac{b+a}{2}\right)+\frac{8}{9}\cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)\right]$

$$+\frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9}\cdot f\left(\sqrt{0.6}\cdot\frac{b-a}{2}+\frac{b+a}{2}\right)\right]$$

Aufgabe 6.9

- Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2}\, dx$$

mit der summierten Rechtecks-, Trapez-, und Simpsonformel für $n = 3$ und vergleichen Sie den Wert mit der Gaussformel $G_3 f$.

Aufgabe 6.9: Lösung

Romberg Extrapolation

- Analog zur Differentiation können wir auch für die Integration ein Extrapolationsschema verwenden, welches erlaubt, aus einigen Anfangsnäherungen für ein bestimmtes Integral einen genaueren Wert zu extrapolieren.
- In der Tat können wir sogar genau die gleichen Schemata verwenden, wie wir es bereits für den $h-$ bzw. den h^2-Algorithmus in Abschnitt 5.1.4 getan haben.

Romberg Extrapolation

- Voraussetzung dafür ist allerdings, dass wir zeigen können, dass die uns bekannten Quadratur-Formeln entweder eine Fehlerentwicklung in h oder aber h^2 haben, wobei h wie immer die Schrittweite angibt.
- Man kann effektiv zeigen, dass die Trapezformel eine Fehlerentwicklung in geraden Potzenzen der Schrittweite hat, d.h. der h^2- Algorithmus ist also anwendbar (ohne Beweis).

Romberg Extrapolation

- Es ist also möglich, die mit der summierten Trapezformel berechneten Werte auf einfache Weise zu verbessern:

Satz 6.4 [1]: Romberg-Extrapolation

- Für die summierte Trapezregel $Tf(h)$ zur näherungsweisen Berechnung von $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$ gilt:
  Sei $T_{i0} = Tf\left(\frac{b-a}{2^i}\right)$ für $i = 0, 1, \ldots, m$.Dann sind durch die Rekursion

$$T_{ik} = \frac{4^k \cdot T_{i+1,k-1} - T_{i,k-1}}{4^k - 1}$$

für $k = 1, 2, \ldots, m$ und $i = 0, 1, \ldots, m-k$ Näherungen der Fehlerordnung $2k+2$ gegeben. Diese Methode heisst **Romberg-Extrapolation**. Die verwendete Schrittweitenfolge $h_i = \frac{b-a}{2^i}$ heisst auch Romberg-Folge.

- Das heisst, wir können also das bereits früher verwendete Schema aus der Differentiation nochmals verwenden, indem wir die summierte Trapezformel für die Schrittweiten $h_i = \frac{b-a}{2^i}$ $(i = 0, 1, 2, ...m)$ also z.B. h, $\frac{h}{2}$, $\frac{h}{4}$, $\frac{h}{8}$ berechnen $(m = 3)$.

Romberg Extrapolation

- Damit erhalten wir T_{00}, T_{10}, T_{20}, T_{30} und können anschliessend wieder extrapolieren (denken Sie sich dafür die D_{ik} in untenstehendem Schema jetzt durch die T_{ik} ersetzt):
- Natürlich muss jeweils die Anzahl $n = 2^i$ der Intervalle für die Berechnung von T_{i0} angepasst werden.

D_{i0}	D_{i1}	D_{i2}	D_{i3}
D_{00}			
	$\frac{4\,D_{10} - D_{00}}{3} = D_{01}$		
D_{10}		$\frac{16\,D_{11} - D_{01}}{15} = D_{02}$	
	$\frac{4\,D_{20} - D_{10}}{3} = D_{11}$		$\frac{64\,D_{12} - D_{02}}{63} = D_{03}$
D_{20}		$\frac{16\,D_{21} - D_{11}}{15} = D_{12}$	
	$\frac{4\,D_{30} - D_{20}}{3} = D_{21}$		
D_{30}			

Beispiel 6.4

- Berechnen Sie
$$I = \int_2^4 \frac{1}{x} dx$$
näherungsweise mit der summierten Trapezregel und anschliessender Extrapolation ausgehend von den Schrittweiten $h_i = \frac{4-2}{2^i}$ für $i = 0, 1, 2, 3$.
- Denken Sie daran, dass sich die jeweilige Anzahl $n = 2^i$ der Intervalle in $Tf(h_i)$ jeweils verdoppelt.

Beispiel 6.4

Lösung: Wir gehen also aus von

$$T_{i0} := Tf\left(\frac{4-2}{2^i}\right) = Tf\left(\frac{1}{2^{i-1}}\right),\ h_i = \frac{1}{2^{i-1}} \text{ für } i = 0,\ 1,\ 2,\ 3 = n.$$

Mittels Romberg-Extrapolation erhalten wir das folgende Schema:

h	T_{i0}	T_{i1}	T_{i2}	T_{i3}
2	0.7500000000			
		0.6944444443		
1	0.7083333333		0.6931746033	
		0.6932539683		0.6931474775
0.5	0.6970238095		0.6931479013	
		0.6931545307		
0.25	0.6941218503			

Beispiel 6.4

Die zugehörigen Fehler $E_{ik} := |T_{ik} - I|$ sind:

h	E_{i0}	E_{i1}	E_{i2}	E_{i3}
2	0.0568528194			
		0.0012972637		
1	0.0151861527		0.0000274227	
		0.0001067877		0.0000002969
0.5	0.0038766289		0.0000007207	
		0.0000073501		
0.25	0.0009746697			

Die Fehler entwickeln sich im Dreiecksschema analog zur Extrapolation bei Differenzenformeln, vgl. Beispiel 7.6: abnehmender Fehler von oben nach unten und rechts nach links im Dreiecksschema. Auch hier sehen wir wieder, wie die Extrapolation mit geringem Aufwand einen großen Genauigkeitsgewinn bringt. Insbesondere sind, hat man erst die T_{i0} in der ersten Spalte berechnet, keine weiteren Auswertungen der zu integrierenden Funktion f nötig. ■

Quiz 6.8

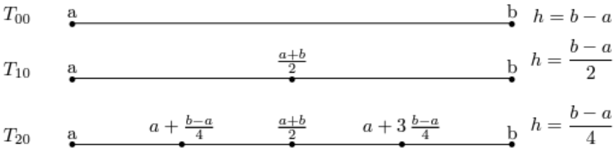
Beantworten Sie die folgende Frage auf www.socrative.com -> Student Login -> Room Name: NMIT2

Welche Aussage bzgl. der Romberg-Extrapolation stimmt? Eine korrekt Antwort:

- A. Die Romberg-Extrapolation entspricht dem $h-$Algorithmus und ist auf die Rechtecksregel anwendbar.
- B. Die Romberg-Extrapolation entspricht dem h^2-Algorithmus und ist auf die Rechtecks- und Trapezregel anwendbar.
- C. Die Romberg-Extrapolation entspricht dem h^2-Algorithmus und ist auf die Trapezregel anwendbar.
- D. Ich weiss nicht.

Romberg Extrapolation: Bemerkungen

1. Bei der Berechnung der T_{i0} in der ersten Spalte kann man Auswertungen der zu integrierenden Funktion einsparen, wie im Folgenden erläutert:
    1. für T_{00} werden nur die Funktionsauswertungen $f(a)$ und $f(b)$ benötigt
    2. für T_{10} wird zusätzlich zu $f(a)$ und $f(b)$ noch $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ benötigt
    3. für T_{20} kommen zusätzlich zu $f(a)$, $f(b)$, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ noch $f\left(a+\frac{b-a}{4}\right)$ und $f\left(a+3\frac{b-a}{4}\right)$
    4. etc.



Romberg Extrapolation: Bemerkungen

- Darauf basierend lässt sich die summierte Trapezregel zu den halbierten Schrittweiten rekursiv formulieren, d.h. man berechnet die T_{i0} allein aus dem vorhergehenden Wert von $T_{i-1,0}$ und zwar über die folgende Rekursionsformel (ohne Beweis):

$$T_{i0} = \frac{1}{2} T_{i-1,0} + h_i \sum_{k=1}^{n} f(a + (2k-1)h_i)$$

wobei gilt $n = 2^{i-1}$ und $h_i = h_{i-1}/2$.

Romberg Extrapolation: Bemerkungen

- Betrachtet man den Extrapolationsschritt von T_{00}und T_{10} nach T_{01} nochmal genauer, so findet man:

$$
\begin{aligned}
T_{01} &= \frac{4T_{10} - T_{00}}{3} \\
&= \frac{1}{3}\left(4\left(\frac{b-a}{2}\cdot\frac{f(a)+f(b)}{2} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right) - \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))\right) \\
&= \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) = Sf.
\end{aligned}
$$

Das bedeutet, dass in der zweiten Spalte des Schemas nichts anderes steht als die Simpsonregel Sf steht (die analogen Resultate erhält man für T_{02}etc.).

Aufgabe 6.10

- Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2}\, dx$$

mit der summierten Trapezformel und Extrapolation für die Schrittweiten $h_i = \frac{b-a}{2^i}$ $(i = 0, 1, 2, \dots 3)$.

Aufgabe 6.10: Lösung