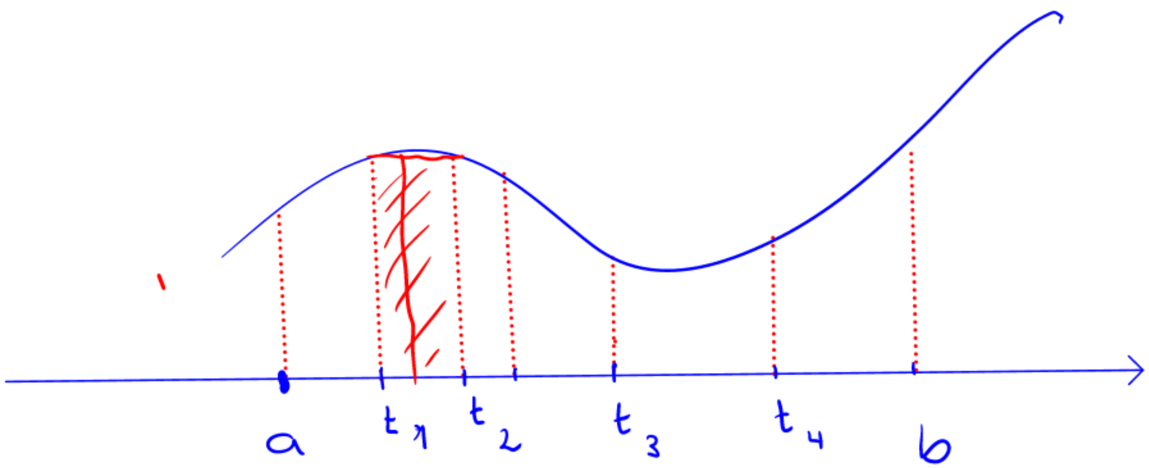
Fachbereich Mathematik der Universität Hamburg

Dr. H. P. Kiani

Vorlesungsvertretung Analysis II, H. P. Kiani, SoSe 2014

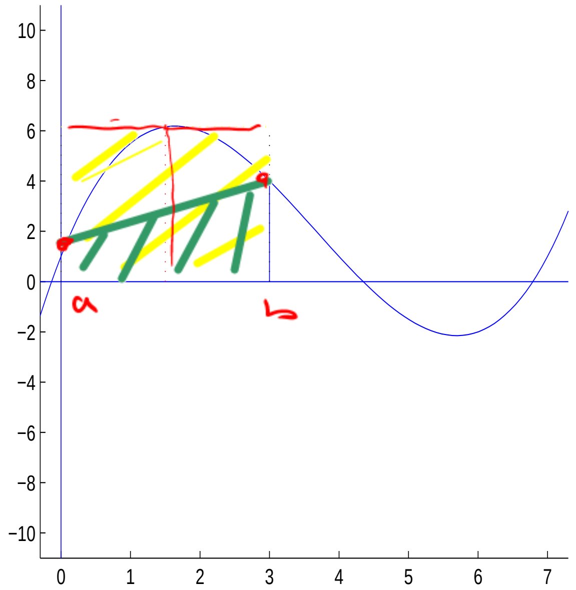
Ergänzungen/Erläuterungen zu den Folien von Prof. Iske

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



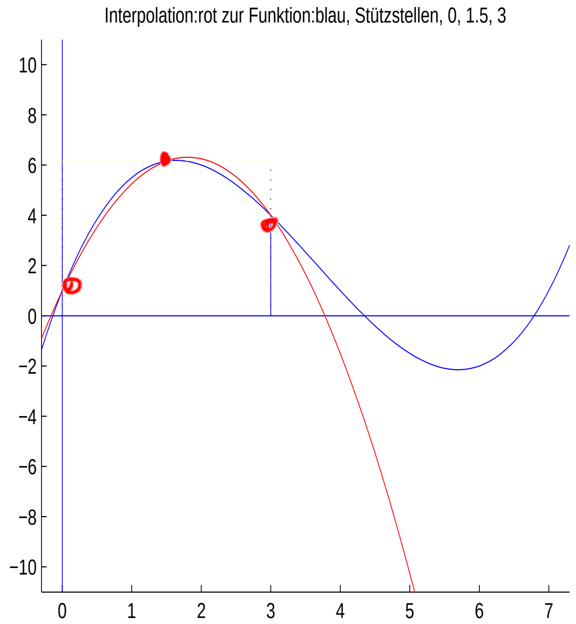
Quadratur von $f(x)$ auf $[0,3]$ Mittelpunksregel, Trapezregel, Simpson-Regel

$$\int_0^3 f(x)\,dx$$



$$I_0 = (b-a)\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$I_1 = (b-a)\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right) = \frac{(b-a)}{2}f(a) + \frac{(b-a)}{2}f(b)$$



Simpson-Regel

$$I_2 = (b-a)\cdot\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{6}f(b)\right)$$

$$= \frac{(b-a)}{6}f(a) + \frac{4(b-a)}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{(b-a)}{6}f(b)$$

⇝ Gewichte

Knoten

Analysis II für Studierende der Ingenieurwissenschaften

Prof. Dr. Armin Iske

Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg

Technische Universität Hamburg-Harburg

Sommersemester 2014

13 Numerische Quadratur

Ausgangssituation: Zu berechnen sei ein bestimmtes Integral

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

mit einem *numerischen* Algorithmus.

Verwenden Numerische Quadratur (Quadraturformel) der Form

$$I[f] \approx I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i)$$

mit

- Knoten $x_i \in [a, b]$, für $i = 0, 1, \ldots, n$;
- Gewichten g_i für $i = 0, 1, \ldots, n$.

13.1 Newton-Cotes Formeln

Grundidee: Verwende Interpolationspolynom p_n zu Daten

$$(x_i, f(x_i)) \qquad i = 0, 1, \dots, n$$

und integriere die Interpolante

$$\to \sum_{i=0}^{n} \int L_i(x) f(x_i)\, dx$$

$$\int p_n(x) = \int \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)\, dx \quad \text{mit } L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \qquad \sum f(x_i) \underbrace{\int L_i(x)\, dx}_{g_i}$$

Ergebnis: Quadraturformel

$$\boxed{I_n[f] = \int_a^b p_n(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i)}$$

mit Gewichten

$$\boxed{g_i = \int_a^b L_i(x)\, dx} \qquad \text{für } 0 \le i \le n.$$

(Zu den Folien 197-199)

$$\int_a^b p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \underbrace{\left(\int_a^b L_i(x)dx\right)}_{g_i=(b-a)\alpha_{in}} f(x_i)$$

$$\int_a^b L_i(x)dx = \int_a^b \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}dx$$

$$x_j = a + j\cdot h,\ h = \frac{b-a}{n}$$

$$= \int_a^b \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{x-(a+j\cdot h)}{\cancel{a}+i\cdot h-(\cancel{a}+j\cdot h)}dx$$

$$x = a + t\cdot h,\ dx = h\,dt$$

$$= \int_0^n \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{\cancel{a}+t\cdot h-(\cancel{a}+j\cdot h)}{(i-j)\cdot h}h\,dt = \frac{b-a}{n}\int_0^n \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{(t-j)\cdot\cancel{h}}{(i-j)\cdot\cancel{h}}dt$$

$$= \underbrace{(b-a)\cdot\frac{1}{n}\int_0^n \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{t-j}{i-j}dt}_{\alpha_{in}}$$

Zum Beispiel für die Simpson-Regel $n = 2$ und

$$I_2 = (b-a)\cdot\left(\underbrace{\frac{1}{6}}_{\alpha_{02}} f(a) + \underbrace{\frac{4}{6}}_{\alpha_{12}} f\left(\tfrac{a+b}{2}\right) + \underbrace{\frac{1}{6}}_{\alpha_{22}} f(b)\right)$$

$$\alpha_{in} = \tfrac{1}{n}\int_0^n \prod_{j=0,i\neq j}^{n} \frac{t-j}{i-j}\,dt$$

$$\alpha_{12} = \frac{1}{2}\int_0^2 \prod_{j=0,1\neq j}^{2} \frac{t-j}{1-j}dt = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\cdot\frac{t-2}{1-2}dt$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t^2-2t}{-1}dt = -\frac{1}{2}\left[\frac{t^3}{3}-t^2\right]_0^2 = -\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{8}{3}-4\right) = \frac{4}{6}\,.$$

Konstruktion der Newton-Cotes Formeln.

Vereinfachung: Verwenden äquidistante Knoten

$$x_i = a + ih, \qquad 0 \le i \le n, \qquad \text{wobei } h = (b-a)/n.$$

Ergebnis: `Newton-Cotes-Quadraturformel`

$$I_n[f] = \int_a^b p_n(x)\,dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} \alpha_{in} f(x_i)$$

mit Gewichten

$$\alpha_{in} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{\overset{t}{\cancel{x}} - j}{i-j}\, d\overset{t}{\cancel{x}} \qquad \text{für } 0 \le i \le n.$$

$\square$

Die Trapezregel.

Wähle $n = 1$ und somit $x_0 = a$ und $x_1 = b$. Damit gilt

$$p_1(x) = \frac{x-a}{b-a} \cdot f(b) + \frac{b-x}{b-a} \cdot f(a)$$

und somit bekommt man die beiden Gewichte

$$\begin{aligned} \alpha_{01} &= \int_0^1 (1-x)\,dx = \frac{1}{2} \\ \alpha_{11} &= \int_0^1 x\,dx = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Daraus folgt die Trapezregel

$$I[f] \approx I_1[f] = (b-a) \cdot \frac{f(a)+f(b)}{2}.$$

Die Simpsonregel.

Wähle $n = 2$ und somit

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{b+a}{2}, \quad x_2 = b.$$

Damit bekommt man die drei Gewichte

$$\begin{aligned}
\alpha_{02} &= \frac{1}{4}\int_0^2 (x-1)(x-2)\,dx = \frac{1}{6} \\
\alpha_{12} &= \frac{1}{2}\int_0^2 x(2-x)\,dx = \frac{2}{3} \\
\alpha_{22} &= \frac{1}{4}\int_0^2 x(x-1)\,dx = \frac{1}{6}
\end{aligned}$$

Daraus folgt die Simpsonregel

$$I[f] \approx I_2[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b)\right).$$

Zwei weitere Newton-Cotes-Formeln.

- 3/8-Regel.

$$I_3[f] = \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f\left(a + \frac{b-a}{3}\right) + 3f\left(a + 2\frac{(b-a)}{3}\right) + f(b)\right)$$

- Milne-Regel.

$$\begin{aligned} I_4[f] \quad = \quad & \frac{b-a}{90}\left[7f(a) + 32f\left(a + \frac{b-a}{4}\right) + 12f\left(a + \frac{b-a}{2}\right)\right. \\ & \left. + 32f\left(a + 3\frac{(b-a)}{4}\right) + 7f(b)\right] \end{aligned}$$

Übersicht: Gewichte der Newton-Cotes Formeln.

n	α_{in}					
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				Trapezregel
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$			Simpson-Regel
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		3/8-Regel
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$	Milne-Regel

Satz:
Die Newton-Cotes-Formel $I_n[f]$ *integriert Polynome vom Grad* $\leq n$ *exakt.*

Beweis: Das Interpolationspolynom $p_n \in \mathcal{P}_n$ zu den $n+1$ Daten $(x_i, f(x_i))$, $0 \leq i \leq n$, rekonstruiert $f \in \mathcal{P}_n$ exakt, d.h. $f \equiv p_n$, und daher gilt

$$I[f] = I[p_n] = \int_a^b p_n(x)\,dx = I_n[f] \qquad \text{für alle } f \in \mathcal{P}_n. \qquad \blacksquare$$

Quadraturfehler der Newton-Cotes Formeln.

$R_n[f] := I_n[f] - I[f]$ heißt Quadraturfehler der Quadraturformel $I_n(f)$.

Erinnerung: Darstellung für den Interpolationsfehler:

$$\boxed{f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)}$$

Beispiel: Für den Quadraturfehler der Trapezregel $(n = 1)$ gilt

$$\begin{aligned} R_1[f] &= \int_a^b (p_1(x) - f(x))\,dx = -\int_a^b \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx \\ &= -\frac{f^{(2)}(\tilde{\xi})}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = \frac{1}{12} f^{(2)}(\tilde{\xi})(b-a)^3 \end{aligned}$$

und somit gilt für $h = (b-a)/n$ die Fehlerabschätzung

$$|R_n[f]| = |I_n[f] - I[f]| \le \frac{1}{12} \|f^{(2)}\|_\infty \cdot h^3.$$

Quadraturfehler der Newton-Cotes Formeln.

n	$R_n[f]$	
1	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	Trapezregel
2	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	Simpson-Regel
3	$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi)$	3/8-Regel
4	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	Milne-Regel

wobei jeweils

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

(Zu den Folien 204-206)

Zur Erinnerung: Interpoliert man große Datenmengen (x_0, y_0), (x_1, y_1) $\cdots$, (x_n, y_n) mit Polynomen hohen Grades, so stellt sich oft ein unerwünschtes oszillatorisches Verhalten ein. Die Interpolation der Daten

$$x_j = -5 + j, \quad y_j = \frac{1}{1 + x_j^2}, \qquad j = 0,\ 1,\ \cdot,\ 10$$

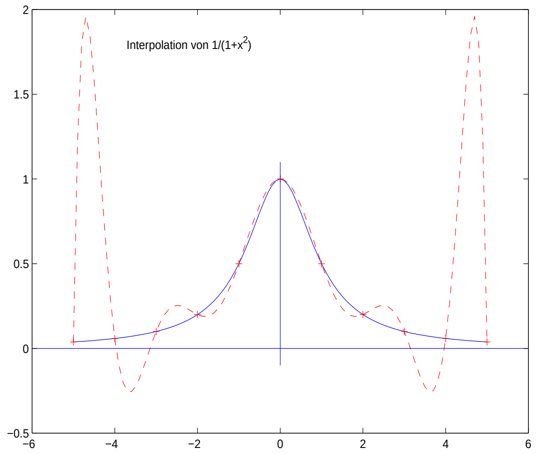


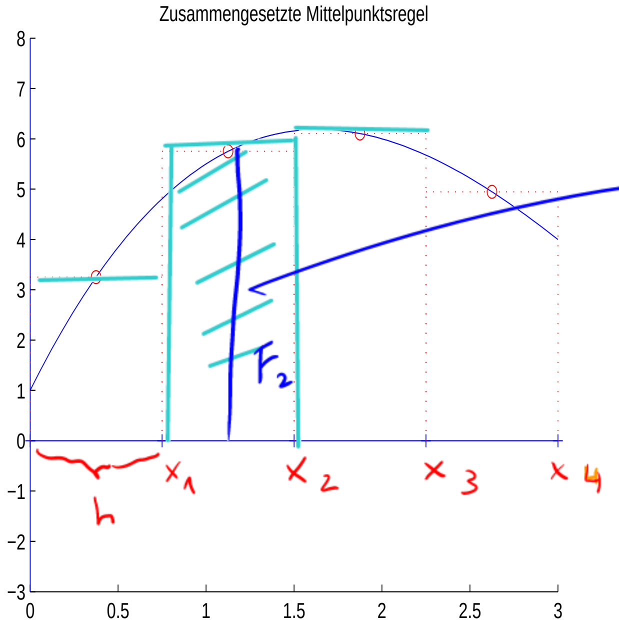
Abbildung 1: exakt: durchgezogen, Interpolation: gestrichelt

Ausweg: auf Teilintervallen je eine polynomiale Näherung niedrigen Grades

Quadratur von $f(x)$ auf $[a, b]$:

Mittelpunksregel / Trapezregel auf $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \cdots, n-1$

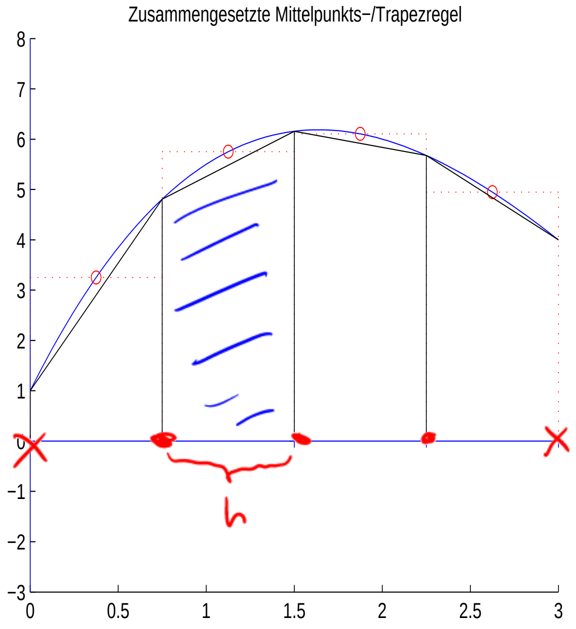
mit $h = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i \cdot h$, $i = 0, 1, \cdots, n$



$f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right)$

$F_2 = h \cdot f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right)$

$\times \quad \sum_{i=0}^{n-1} h \cdot f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$



$$T(f,h) = \sum_{i=0}^{n-1} h\cdot\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right) = h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right)$$

Zusammengesetzte Simpson-Regel: Ersetze f auf $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, $i = 1, \cdots, n$

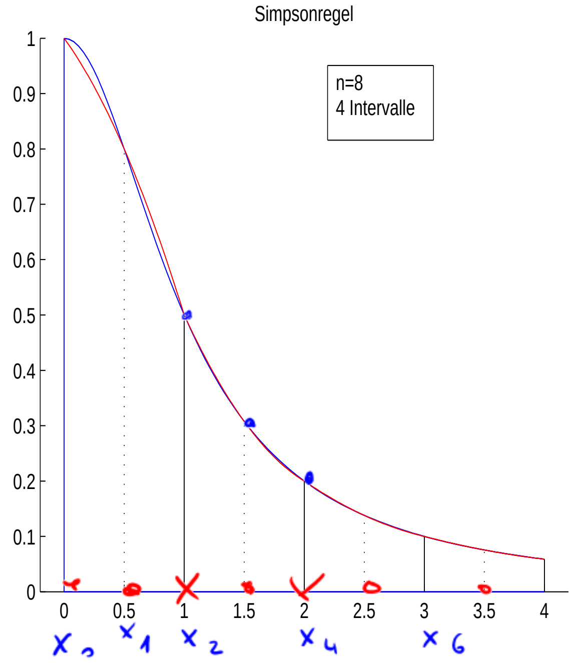
mit $h = \frac{b-a}{2n}$ und $x_i = a + i \cdot h$, $i = 0, 1, \cdots, 2n$

durch Interpolationspolynom 2. Grades durch $(x_{2i-2}, f(x_{2i-2}))$, $(x_{2i-1}, f(x_{2i-1}))$, $(x_{2i}, f(x_{2i}))$

$\frac{2h}{6}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right.$

$f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)$

$+f(x_4)$



$$S_i = \frac{b-a}{6n} \cdot \left(f(x_{2i-2}) + 4\, f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})\right)$$

$$S(f,h) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4 \cdot \sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1}) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + f(b)\right)$$

Zusammengesetzte Newton-Cotes Formeln.

Ziel: Höhere Genauigkeit durch Unterteilung des Intervalls $[a, b]$.

Gegeben sei die äquidistante Unterteilung mit den Knoten

$$t_i = a + ih \qquad i = 0, 1, \ldots, N, \quad h = \frac{b-a}{N}.$$

Verwende auf jedem Teilintervall $[t_i, t_{i+1}]$ Quadraturformel der Ordnung n.

Beispiel: Zusammengesetzte Trapezregel

$$\begin{aligned} T(h) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{2}\Big(f(t_i) + f(t_{i+1})\Big) \\ &= h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right). \end{aligned}$$

□

Fehlerabschätzung zusammengesetzte Trapezregel.

Satz: *Für die zusammengesetzte Trapezregel gilt die Fehlerabschätzung*

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)\|f^{(2)}\|_\infty .$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| &= \left| \sum_{j=0}^{N-1} \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^{(j)}[f] \right) \right| \\
&\leq \sum_{j=0}^{N-1} \left| \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^{(j)}[f] \right| \\
&\leq \sum_{j=0}^{N-1} \frac{(t_{j+1}-t_j)^3}{12} \|f^{(2)}\|_\infty \\
&\leq \frac{N}{12} h^3 \|f^{(2)}\|_\infty \overset{*}{=} \frac{h^2}{12}(b-a)\|f^{(2)}\|_\infty \qquad \blacksquare
\end{aligned}$$

$* \; h = \frac{b-a}{N}$

Die zusammengesetzte Simpson-Regel.

Wende die Simpson-Regel auf die Teilintervalle $[t_{2i}, t_{2i+2}]$ an, mit Knoten

$$t_{2i}, \quad t_{2i+1}, \quad t_{2i+2} \qquad \text{für } 0 \leq i \leq N/2 - 1,$$

wobei N gerade. Dann bekommt man die zusammengesetzte Simpson-Regel

$$\begin{aligned} S(h) &= \frac{h}{3} \sum_{i=0}^{N/2-1} \left(f(t_{2i}) + 4f(t_{2i+1}) + f(t_{2i+2})\right) \\ &= \frac{h}{3} \left(f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + \ldots + 4f(b-h) + f(b)\right) \end{aligned}$$

Satz: *Für die zusammengesetzte Simpson-Regel gilt die Fehlerabschätzung*

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - S(h) \right| \leq \frac{h^4}{180}(b-a)\|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis: analog wie bei der zusammengesetzten Trapezregel. □

13.2 Gauß-Quadratur

Erinnerung: Mit der Newton-Cotes Quadratur

$$I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i) \approx I[f] = \int_a^b f(x)\,dx$$

werden Polynome vom Grad n exakt integriert.

Dabei sind die Knoten x_i, $0 \le i \le n$, äquidistant auf $[a, b]$ verteilt.

Grundidee der Gauß-Quadratur: Variiere die Knoten $x_0, \dots, x_n$.

Grundidee der Gauß-Quadratur.

Ziel:

Variiere Knoten, um Polynome möglichst hohen Grades exakt zu integrieren.

Genauer:

Approximiere für eine feste positive Gewichtsfunktion $w : (a, b) \longrightarrow (0, \infty)$ Integrale der Form

$$I[f] = \int_a^b f(x)w(x)\,dx$$

durch Quadratur der Form

$$\boxed{I[f] \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i)w_i}$$

mit einer speziellen Wahl von Stützstellen x_i und positiven Gewichten w_i.

Ergebnis: Gaußsche Quadraturformeln mit $(n + 1)$ Knoten integrieren Polynome vom Grad $2n + 1$ exakt. □

Beispiel: Gauß-Tschebyscheff-Quadratur.

- **Integrationsintervall:** $I = [-1, 1]$
- **Gewichtsfunktion:** $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$.
- **Knoten:** Nullstellen

$$x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right) \qquad \text{für } 0 \le i \le n$$

des $(n+1)$-ten Tschebyscheff-Polynoms

$$T_{n+1}(x) = \cos((n+1)\arccos(x)) \in \mathcal{P}_{n+1} \qquad \text{für } x \in [-1, 1].$$

- **Konstante Gewichte:** $w_i \equiv \pi/(n+1)$.
- Gauß-Tschebyscheff Quadratur:

$$I_n[f] = \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \approx I_w[f] = \int_{-1}^{1} f(x)w(x)\,dx.$$

Eigenschaften der Tschebyscheff-Polynome.

Satz: *Die Tschebyscheff-Polynome* $T_0, \ldots, T_n$ *bilden eine orthogonale Basis des Polynomraums* $\mathcal{P}_n$ *bezüglich des gewichteten Skalarprodukts*

$$(f, g)_w := \int_{-1}^{1} f(x)g(x)w(x)\,dx.$$

Genauer gilt:

$$(T_k, T_j)_w = \begin{cases} \pi & \textit{für } k = j = 0 \\ \pi/2 & \textit{für } k = j > 0 \\ 0 & \textit{für } j \neq k \end{cases}$$

Beweis: Übung (mit Substitution $t = \cos(x)$) $\square$

Satz: *Für die Tschebyscheff-Polynome gilt die Rekursionsformel*

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x) \qquad \textit{für } k \geq 1,$$

wobei $T_0 \equiv 1$ *und* $T_1(x) = x$. $\square$

Legendre-Polynome.

Satz: *Für die Gewichtsfunktion* $w \equiv 1$ *auf dem Intervall* $I = [-1, 1]$ *sind die* Legendre-Polynome

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n \in \mathcal{P}_n$$

Orthogonalpolynome. Genauer gilt:

$$(L_n, L_m) = \begin{cases} \frac{2}{2n+1} & \text{für } n = m \geq 0 \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases}$$

■

Beweis: Übung (per Induktion). □

Satz: *Für die Legendre-Polynome gilt die Rekursionsformel*

$$L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1} \qquad \text{für } n \geq 1,$$

wobei $L_0 \equiv 1$ *und* $L_1(x) = x$. □

Weitere Eigenschaften der Legendre-Polynome.

Die ersten Legendre-Polynome sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
L_0(x) &\equiv 1 \\
L_1(x) &= x \\
L_2(x) &= (3x^2-1)/2 \\
L_3(x) &= (5x^3-3x)/2 \\
L_4(x) &= (35x^4-30x^2+3)/8
\end{aligned}$$

Deren jeweilige Nullstellen sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
L_1 &: \quad x_0 = 0 \\
L_2 &: \quad x_{0/1} = \pm\sqrt{1/3} \\
L_3 &: \quad x_0 = 0, x_{1/2} = \pm\sqrt{3/5} \\
L_4 &: \quad x_{0/1/2/3} = \pm\sqrt{\frac{3}{7} \pm \frac{1}{7}\sqrt{\frac{24}{5}}}
\end{aligned}$$

Zur Konstruktion der Gauß-Legendre-Quadratur.

- **Integrationsintervall:** $I = [-1, 1]$
- **Gewichtsfunktion:** $w(x) \equiv 1$.
- **Knoten:** $n + 1$ Nullstellen $x_0, \ldots, x_n$ des Legendre-Polynoms $L_{n+1} \in \mathcal{P}_{n+1}$.
- **Gewichte:** Mit festen Knoten $x_0, \ldots, x_n$ zu berechnen aus

$$w_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\, dx > 0.$$

- Gauß-Legendre Quadratur:

$$I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \approx I[f] = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx.$$

Weitere Spezialfälle der Gauß-Quadratur.

Name	Intervall	Gewicht
Gauß-Legendre	$[-1, 1]$	$w \equiv 1$
Gauß-Tschebyscheff	$[-1, 1]$	$w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$
Gauß-Jacobi	$[-1, 1]$	$w(x) = (1-x)(1+x)$
Gauß-Laguerre	$[0, \infty)$	$w(x) = e^{-x}$
Gauß-Hermite	$(-\infty, \infty)$	$w(x) = e^{-x^2}$

Zur Konstruktion von Gauß-Quadraturformeln.

- Konstruiere zu festem Intervall $[a, b]$ und Gewichtsfunktion w eine Folge

$$p_0, p_1, \ldots, p_n, p_{n+1}$$

ONS

  von Orthogonalpolynomen, wobei $p_k \in \mathcal{P}_k$ und $(p_k, p_j)_w = \delta_{jk}$.

- Verwende Nullstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n$ von p_{n+1} als Knoten.
- Berechne (positive) Gewichte

$$w_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \, dx \qquad \text{für } 0 \leq i \leq n.$$

- **Ergebnis:** Gauß-Quadraturformel

$$I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \approx I[f] = \int_a^b f(x) w(x) \, dx$$

  mit $I_n[f] = I_n[p]$ für alle $p \in \mathcal{P}_{2n+1}$.