

Numerisches Programmieren, Übungen

Musterlösung 7. Übungsblatt: Extrapolation, Gauß-Quadratur, Quadratur nach Archimedes

1) Extrapolation: Numerische Quadratur mit hoher Ordnung

Vorbemerkung: Von Aitken-Neville zur Romberg-Quadratur – Herleitung des Algorithmus

Im Kapitel zur Polynominterpolation wurde erklärt, wie man zu n gegebenen Stützpunkten ein Polynom $n - 1$ -ten Grades aufstellt, das sämtliche Stützpunkte interpoliert. Der Algorithmus von Aitken-Neville wurde verwendet, um zu den gegebenen Stützpunkten direkt den Wert des zugehörigen Interpolationspolynoms an einer gegebenen Stelle zu berechnen.

Die Grundidee des Romberg-Verfahrens ist, zu verschiedenen h 's (h ist die Breite eines einzelnen Teilintervalls bei der Trapezsumme) die Trapezsumme zu berechnen, und dann die h 's als Stützstellen und die zugehörigen Trapezsummen als Stützwerte eines zu interpolierenden Polynoms zu interpretieren. Wenn man dieses Polynom an der Stelle $h = 0$ auswertet, so erhält man einen Näherungswert für die Trapezsumme mit $h \rightarrow 0$.

Da die Indizes des Aitken-Neville-Algorithmus und des Romberg-Algorithmus nicht übereinstimmen, müssen die Indizes zunächst umgerechnet werden. Betrachtet man die Visualisierung des Aitken-Neville-Dreiecksschemas (siehe Aufgabe 1 des 3. Übungsblatts), so stehen in der ersten Zeile alle Werte, für die i_{ait} Null ist. Diese Werte sind aber zugleich jeweils das Ende einer Gegendiagonalen im Romberg-Algorithmus. Das Ende der Gegendiagonalen bedeutet im Romberg-Verfahren aber immer, daß k_{rom} Null ist. In der n -ten Zeile der Abbildung ist $i_{ait} = k_{rom} = n - 1$. Um den Aitken-Neville-Algorithmus also in den Romberg-Algorithmus zu überführen, wird i_{ait} durch k_{rom} ersetzt:

$$i_{ait} = k_{rom} \quad (1)$$

Betrachtet man nun eine Spalte in der Abbildung, so ist k_{ait} konstant, i_{rom} und k_{rom} steigen aber linear an (in jeder Zeile um 1). In der ersten Spalte ($k_{ait} = 0$) gilt $i_{rom} = k_{rom}$, in der zweiten Spalte ($k_{ait} = 1$) gilt $i_{rom} = k_{rom} + 1$, und in der n -ten Spalte ($k_{ait} = n - 1$) gilt $i_{rom} = k_{rom} + n - 1$. Es folgt also:

$$k_{ait} = i_{rom} - k_{rom} \quad (2)$$

Damit kann man nun aus der Gleichung des Aitken-Neville-Verfahrens die entsprechende Gleichung des Romberg-Verfahrens herleiten:

$$\begin{aligned}
p[i] &= \frac{(x_{i+k} - x)}{(x_{i+k} - x_i)} \cdot p[i] + \frac{(x - x_i)}{(x_{i+k} - x_i)} \cdot p[i + 1] \\
&= \frac{(x_{i+k} - x) \cdot p[i] + (x - x_i) \cdot p[i + 1]}{(x_{i+k} - x_i)} \\
&= \frac{(x_{i+k} - x) \cdot p[i] + (x - x_i + x_{i+k} - x_{i+k}) \cdot p[i + 1]}{(x_{i+k} - x_i)} \\
&= \frac{(x_{i+k} - x) \cdot p[i] + (x_{i+k} - x_i) \cdot p[i + 1] - (x_{i+k} - x) \cdot p[i + 1]}{(x_{i+k} - x_i)} \\
&= p[i + 1] + \frac{(x_{i+k} - x)}{(x_{i+k} - x_i)} \cdot (p[i] - p[i + 1]) \\
&= p[i + 1] + \frac{(x - x_{i+k})}{(x_{i+k} - x_i)} \cdot (p[i + 1] - p[i])
\end{aligned}$$

Bis zu diesem Punkt sind die Indizes noch diejenigen aus dem Aitken-Neville-Verfahren. Wenn diese mit Hilfe der Gleichungen (1) und (2) durch die Romberg-Indizes ersetzt werden erhält man:

$$\begin{aligned}
p[k] &= p[k + 1] + \frac{(x - x_{k+i-k})}{(x_{k+i-k} - x_k)} \cdot (p[k + 1] - p[k]) \\
&= p[k + 1] + \frac{(x - x_i)}{(x_i - x_k)} \cdot (p[k + 1] - p[k])
\end{aligned}$$

Nun werden die Stützstellen x_j durch h_j^2 ersetzt und $p[j]$ durch $T[j]$ ersetzt. Außerdem wird x auf Null gesetzt:

$$\begin{aligned}
T[k] &= T[k + 1] + \frac{(0 - h_i^2)}{(h_i^2 - h_k^2)} \cdot (T[k + 1] - T[k]) \\
&= T[k + 1] + \frac{-h_i^2 \cdot \frac{1}{h_i^2}}{(h_i^2 - h_k^2) \cdot \frac{1}{h_i^2}} \cdot (T[k + 1] - T[k]) \\
&= T[k + 1] + \frac{1}{\frac{h_k^2}{h_i^2} - 1} \cdot (T[k + 1] - T[k])
\end{aligned}$$

Diese Gleichung entspricht genau der Gleichung aus dem Romberg-Verfahren. Zuletzt müssen nur noch die Schleifen des Algorithmus angepasst werden. Beim Aitken-Neville-Algorithmus aus der Vorlesung hat die erste Stützstelle den Index 0, beim Romberg-Algorithmus aber den Index 1. Passt man die Schleifen entsprechend an, so erhält man schließlich den Romberg-Algorithmus aus der Vorlesung:

```

for i=1:n
    waehle n[i];
    h[i]:=(b-a)/n[i];
    T[i]:=Trapezsumme zur Schrittweite h[i]
    for k:=i-1:-1:1
        T[k] := T[k+1] + 1/(h[k]^2/h[i]^2-1)*(T[k+1]-T[k])
    end
end
end

```

- i) Wir leiten die Formel für die Romberg-Quadratur nun über die Reihenentwicklung her. Dazu multiplizieren wir $T(h_1)$ und $T(h_2)$ mit h_2^2 bzw. h_1^2 und ziehen die beiden Gleichungen voneinander ab:

$$\begin{array}{r} T(h_1) = I(f) + \tau_1 h_1^2 + \tau_2 h_1^4 + \dots \quad | \cdot h_2^2 \\ - \quad T(h_2) = I(f) + \tau_1 h_2^2 + \tau_2 h_2^4 + \dots \quad | \cdot h_1^2 \\ \hline T(h_1) \cdot h_2^2 - T(h_2) \cdot h_1^2 = (h_2^2 - h_1^2)I(f) + h_1^2 h_2^2 (h_1^2 - h_2^2) \tau_2 + \mathcal{O}(h^6) \end{array}$$

$$\begin{aligned} I(f) &= \frac{T(h_1) \cdot h_2^2 - T(h_2) \cdot h_1^2}{h_2^2 - h_1^2} - h_1^2 h_2^2 \tau_2 + \mathcal{O}(h^4) \\ &= \frac{T(h_1) \cdot h_2^2 - T(h_2) \cdot h_1^2}{h_2^2 - h_1^2} + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

Der Fehler beträgt $\mathcal{O}(h_1^2 \cdot h_2^2)$.

Bemerkung: Um die im Algorithmus verwendete Formel zu erhalten, formen wir einfach um:

$$\begin{aligned} I(f) &\approx \frac{T(h_1) \cdot h_2^2 - T(h_2) \cdot h_1^2}{h_2^2 - h_1^2} = \frac{T(h_2) \cdot h_1^2 - T(h_1) \cdot h_2^2}{h_1^2 - h_2^2} \\ &= \frac{T(h_2) \cdot [(h_1^2 - h_2^2) + h_2^2] - T(h_1) \cdot h_2^2}{h_1^2 - h_2^2} = T(h_2) + \frac{(T(h_2) - T(h_1)) \cdot h_2^2}{h_1^2 - h_2^2} \\ &= T(h_2) + \frac{T(h_2) - T(h_1)}{(h_1^2/h_2^2) - 1} \end{aligned}$$

- ii) Es soll die Funktion $f(x) = -x^2 + 4$ mit Hilfe des Romberg-Verfahrens zwischen $a = -2$ und $b = 2$ integriert werden. Die Teilintervallbreite halbiert sich in jeden Schritt. Der analytisch korrekte Wert lautet:

$$\int_{-2}^2 f(x) dx = 10 \frac{2}{3}$$

Zunächst werden die Trapezsummen für $n = 1$, $n = 2$ und $n = 4$ berechnet:

- $h_1 = \frac{b-a}{2^0} = 4$:

$$\begin{aligned} Q_{TS}(f, h_1) &= h_1 \cdot \left(\frac{f_0}{2} + \frac{f_1}{2} \right) \\ &= 4 \cdot \left(\frac{0}{2} + \frac{0}{2} \right) = 0 \end{aligned}$$

- $h_2 = \frac{b-a}{2^1} = 2$:

$$\begin{aligned}
Q_{TS}(f, h_2) &= h_2 \cdot \left(\frac{f_0}{2} + f_1 + \frac{f_2}{2} \right) \\
&= 2 \cdot \left(\frac{f(-2)}{2} + f(0) + \frac{f(2)}{2} \right) \\
&= 2 \cdot \left(\frac{0}{2} + 4 + \frac{0}{2} \right) = 8
\end{aligned}$$

- $h_3 = \frac{b-a}{2^2} = 1$:

$$\begin{aligned}
Q_{TS}(f, h_3) &= h_3 \cdot \left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + f_3 + \frac{f_4}{2} \right) \\
&= 1 \cdot \left(\frac{f(-2)}{2} + f(-1) + f(0) + f(1) + \frac{f(2)}{2} \right) \\
&= \left(\frac{0}{2} + 3 + 4 + 3 + \frac{0}{2} \right) = 10
\end{aligned}$$

Nun wird das Romberg-Verfahren durchgeführt:

- $i = 1$:

$$T[1] = Q_{TS}(f, h_1) = 0$$

- $i = 2$:

$$T[2] = Q_{TS}(f, h_2) = 8$$

– $k = 1$

$$T[1] = T[2] + \frac{1}{\frac{h_1^2}{h_2^2} - 1} \cdot (T[2] - T[1]) = 8 + \frac{1}{\frac{16}{4} - 1} \cdot 8 = 10\frac{2}{3}$$

- $i = 3$:

$$T[3] = Q_{TS}(f, h_3) = 10$$

– $k = 2$

$$T[2] = T[3] + \frac{1}{\frac{h_2^2}{h_3^2} - 1} \cdot (T[3] - T[2]) = 10 + \frac{1}{\frac{4}{1} - 1} \cdot 2 = 10\frac{2}{3}$$

– $k = 1$

$$T[1] = T[2] + \frac{1}{\frac{h_1^2}{h_3^2} - 1} \cdot (T[2] - T[1]) = 10\frac{2}{3} + \frac{1}{\frac{16}{4} - 1} \cdot 0 = 10\frac{2}{3}$$

Dargestellt als Tableau (analog zum Schema von Aitken und Neville) sieht das Ganze wie folgt aus:

h_i	i	$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$
4	1	0		
			\searrow	
2	2	8	\rightarrow	$10\frac{2}{3}$
			\searrow	
1	3	10	\rightarrow	$10\frac{2}{3}$
				\searrow
			\rightarrow	$10\frac{2}{3}$

Das mit Hilfe des Romberg-Verfahrens berechnete Integral ist in diesem Fall exakt. Die Funktion $f(x)$ musste insgesamt nur fünf Mal ausgewertet werden. Bei der Trapezsumme mit $n = 8$ von Aufgabenblatt 6 musste die Funktion 9 mal ausgewertet werden, das Ergebnis war aber dennoch schlechter (10.5).

Hinweis:

Bei der Extrapolation mit drei Schrittweiten ist der Fehler zwischen echtem Integral und Wert der Extrapolation $O(h_1^2 \cdot h_2^2 \cdot h_3^2) = O(h^6)$.

Für Polynome vom Grad ≤ 5 liefert die Extrapolation hier das exakte Ergebnis.

Bei höheren Graden (z.B. x^8) nicht. Wenn beispielsweise die Funktion $g(x) = x^8$ von 0 bis 1 integriert werden soll, so ist das exakte Ergebnis $I(f) = \frac{1}{9} = 0, \bar{1}$

Es ergeben sich folgende Trapezsummen:

- $TS(h = 1) = 0.5$
- $TS(h = \frac{1}{2}) = 0.25195$
- $TS(h = \frac{1}{4}) = 0.15100$
- $TS(h = \frac{1}{8}) = 0.12141$

Berechnet man zu den ersten drei Trapezsummen wieder die Integration mit dem Romberg-Verfahren, so erhält man:

$$Q_{romberg} = 0.11389 \tag{3}$$

Dieses Ergebnis ist zwar nicht exakt, aber deutlich besser als die Trapezsumme mit $n = 8$, und das mit nur fünf statt neun Funktionsauswertungen.

2) Gauß-Quadratur

i) $n = 2 \Rightarrow$ Genauigkeitsgrad $= 2n - 1 = 3$

$$\begin{aligned} \omega_2(x) &= \frac{2!}{4!} \cdot D^2((x^2 - 1)^2) = \frac{2!}{4!} \cdot D^1(4x(x^2 - 1)) = x^2 - \frac{1}{3} \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow x_1 &= -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

- ii) Sei $p(x) \in \mathbb{P}_{2n-1}$ Interpolant der Funktion f mit $p(x_i) = f(x_i)$. Wir stellen $p(x)$ mit Hilfe der Lagrange-Polynome dar und integrieren:

$$I(p) = \int_{-1}^1 p(x) dx = \int_{-1}^1 \sum_{i=1}^n p(x_i) \cdot L_i(x) dx = \sum_{i=1}^n p(x_i) \cdot \underbrace{\int_{-1}^1 L_i(x) dx}_{g_i} = \sum_{i=1}^n g_i p(x_i)$$

$$I(f) \approx I(p) = \sum_{i=1}^n g_i p(x_i) = \sum_{i=1}^n g_i f(x_i)$$

Für $n = 2$ und $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ erhalten wir

$$g_1 = \int_{-1}^1 L_1(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx = \int_{-1}^1 \frac{x - \frac{1}{\sqrt{3}}}{-\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}} dx = \int_{-1}^1 -\frac{1}{2}(\sqrt{3}x - 1) dx = 1$$

$$g_2 = \int_{-1}^1 L_2(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx = \dots = 1$$

- iii) a) analytisch:

$$I(f) = \int_{-1}^1 (x+1)(x^2+1) dx = \frac{8}{3}$$

- b) numerisch (2-Punkte-Gauß-Quadratur):

$$I(f) = \int_{-1}^1 (x+1)(x^2+1) dx \approx \sum_{i=1}^2 g_i f(x_i) = 1 \cdot f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + 1 \cdot f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = \frac{8}{3}$$

Die Näherung $I(f)$, die man durch Gauß-Quadratur mit 2 Gauß-Punkten erhält, ist wegen $f \in \mathbb{P}_3$ exakt.

3) Quadratur nach Archimedes

Da $f(x)$ symmetrisch zur y-Achse ist, genügt es die Integration für x zwischen 0 und 2 zu berechnen und das Ergebnis mit 2 zu multiplizieren.

- Fläche der rechten Seite des Startdreiecks:

$$\frac{A_1}{2} = \frac{1}{2} \cdot (g_1 \cdot h_1) = \frac{1}{2} \cdot (f(0) \cdot 2) = \frac{1}{2} \cdot (4 \cdot 2) = 4$$

- Fläche des ersten verfeinerten Dreiecks: Das erste verfeinerte Dreieck besteht aus zwei Dreiecken, die jeweils die Grundseite g_2 und die Höhe h_2 haben.

g_2 ist die Differenz zwischen der $f(1)$ und $\frac{f(0)+f(2)}{2}$

$$A_2 = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (g_2 \cdot h_2) = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\left(3 - \frac{4+0}{2} \right) \cdot 1 \right) = 1$$

- zweite Verfeinerung: beide Dreiecke A_2^1 und A_2^2 bestehen jeweils aus zwei Dreiecken mit Grundseite g_3^1 bzw. g_3^2 und Höhe h_3

$$g_3^1 = f\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{f(0) + f(1)}{2} = \frac{15}{4} - \frac{14}{4} = \frac{1}{4}$$

$$g_3^2 = f\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{f(1) + f(2)}{2} = \frac{7}{4} - \frac{6}{4} = \frac{1}{4}$$

$$A_3^1 = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (g_3^1 \cdot h_3) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{8}$$

$$A_3^2 = 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (g_3^2 \cdot h_3) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{8}$$

- gesamte rechte Seite:

$$A_r = \frac{A_1}{2} + A_2 + A_3^1 + A_3^2 = 4 + 1 + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} = 5\frac{1}{4}$$

- Gesamtergebnis:

$$A = 2 \cdot A_r = 2 \cdot 5\frac{1}{4} = 10\frac{1}{2}$$

Das Ergebnis stimmt mit dem der Trapezsumme aus Aufgabe 2) iii) von Aufgabenblatt 6 überein.