Technische Universität München
Institut für Informatik
Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz
Dipl.-Inf. Christoph Riesinger
Dipl.-Math. Jürgen Bräckle

WS 2013/2014

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 $h \to 0$.

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:

$$i_{ait} = k_{rom} \tag{1}$$

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:

$$k_{ait} = i_{rom} - k_{rom} \tag{2}$$

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 ensprechend 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
```

a) 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:

$$\begin{array}{rrcll} & T(h_1) & = & I(f) + \tau_1 {h_1}^2 + \tau_2 {h_1}^4 + \ldots & | \cdot {h_2}^2 \\ - & T(h_2) & = & I(f) + \tau_1 {h_2}^2 + \tau_2 {h_2}^4 + \ldots & | \cdot {h_1}^2 \\ \hline \end{array}$$

$$T(h_1) \cdot {h_2}^2 - T(h_2) \cdot {h_1}^2 = ({h_2}^2 - {h_1}^2) I(f) + {h_1}^2 {h_2}^2 ({h_1}^2 - {h_2}^2) \tau_2 + \mathcal{O}(h^6)$$

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

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

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

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

b) 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:

- $i = 1$:

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

- $i = 2$:

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

  - $k = 1$

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

- $i = 3$:

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

  - $k = 2$

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

  - $k = 1$

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

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

$$
\begin{array}{c|c|ccccc}
h_i & i & O(h^2) & & O(h^4) & & O(h^6) \\
\hline
4 & 1 & 0 & & & & \\
 & & & \searrow & & & \\
2 & 2 & 8 & \rightarrow & 10\frac{2}{3} & & \\
 & & & \searrow & & \searrow & \\
1 & 3 & 10 & \rightarrow & 10\frac{2}{3} & \rightarrow & 10\frac{2}{3}
\end{array}
$$

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 $I(f) = \frac{1}{9} = 0,\overline{1}$

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

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

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

b) 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

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

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

c) a) analytisch:

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

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

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

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 Erbgebnis 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 $\frac{f(0)+f(2)}{2}$

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

- 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

$$\begin{aligned} g_3^1 &= f(\frac{1}{2}) - \frac{f(0)+f(1)}{2} = \frac{15}{4} - \frac{14}{4} = \frac{1}{4} \\ g_3^2 &= f(\frac{3}{2}) - \frac{f(1)+f(2)}{2} = \frac{7}{4} - \frac{6}{4} = \frac{1}{4} \\ A_3^1 &= 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (g_3^1 \cdot h_3) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{8} \\ A_3^2 &= 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (g_3^2 \cdot h_3) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{8} \end{aligned}$$

- 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) c) von Aufgabenblatt 6 überein.