Wissenschaftliches Rechnen

Quadratur

wr@isg.cs.uni-magdeburg.de

SoSe 2018

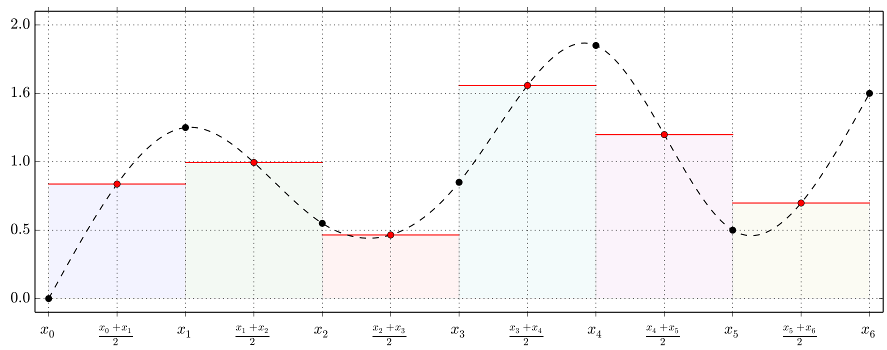
1 Motivation

Die Berechnung bzw. Approximation von Integralen spielt im wissenschaftlichen Rechnen eine wichtige Rolle. Zum Beispiel sind die Arbeit eines physikalischen Prozesses, der Erwartungswert von kontinuierlichen Zufallsvariablen (wie sie im maschinellen Lernen sehr häufig benötigt werden) und die Basiskoeffizienten von Finite-Elemente-Methoden durch Integrale definiert. Bei vielen Anwendungen ist es jedoch nicht möglich, eine analytische Lösung des Integrals zu bestimmen, oder dies ist zu aufwendig. Daher verwendet man in der Regel numerische Integrationsverfahren, sogenannte Quadraturregeln, um die Integrale hinreichend genau zu approximieren. Für die Integration einer Funktion $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ über das Interval $[a,b]$ ist eine Quadraturregel gegeben durch:

$$I = \sum_{i=1}^{n} w_i\, f(x_i) \tag{1}$$

für Stützstellen $x_i \in [a,b]$ und an den Stützstellen bekannte Funktionswerte $f(x_i)$. Die verschiedenen Verfahren unterscheiden sich dabei in der Wahl der verwendeten Gewichte w_i und Stützstellen x_i. Eine übliche Herangehensweise um geeignete w_i und x_i zu bestimmen, ist dabei die Funktion $f(x)$ durch einfachere Funktionen zu approximieren oder zu interpolieren. Das Integral von $f(x)$ ergibt sich dann genau oder näherungsweise durch die Berechnung des Integrales der stückweisen Repräsentation der Funktion.

2 Mittelpunktsregel



Für die Mittelpunktsregel wird die zu integrierende Funktion $f(x)$ (grau) zunächst mit einer Treppenfunktion $\Phi_n(x)$ interpoliert, d.h. stückweise durch Funktionen $\varphi_i(x)$ (rot), welche über jedem der gegebenen Intervallen $[x_i, x_{i+1}]$ konstant sind. Die Höhe von $\varphi_i(x)$ ist dabei durch den Funktionswert von $f(x)$ am Mittelpunkt $\bar{x}_i = (x_{i-1} + x_i)/2$ des Intervalls $[x_i, x_{i+1}]$ gegeben. Wird die Anzahl n der Intervale vergrößert, und damit deren Größe verringert, so verbessert sich die Approximation und man kann zeigen, dass die Treppenfunktion $\Phi_n(x)$ für $n \to \infty$ gegen $f(x)$ konvergiert, d.h. für hinreichend große n ist $\Phi_n(x)$ eine beliebig genaue Approximation von $f(x)$.

Als Approximation für das Integral von $f(x)$ wird nun das Integral von $\Phi_n(x)$ verwendet:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \Phi_n(x)\,\mathrm{d}x. \tag{2}$$

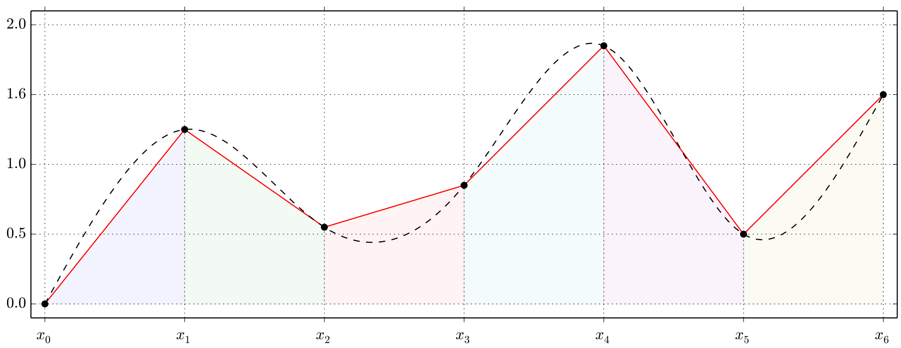
Das Integral der Treppenfunktion lässt sich sehr einfach berechnen. Bezeichnen $\{x_i\}_{i=0,\dots,n}$ die Stützstellen, so ist die Fläche jedes Rechtecks durch $(x_i - x_{i-1}) \cdot f(\bar{x}_i)$ gegeben. Damit erhalten wir als Quadraturregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \Phi_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) \cdot f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right). \tag{3}$$

Eine einfache Python-Implementierung ist:

```
def quadMidpoint( signal, n_quad) :
    """
    Quadrature approximation of \int_{-1}^1 f(x) dx using midpoint rule.

    Inputs:
    signal : function f(x) whose integral is sought
    n_quad : number of quadrature points

    Return:
    integral : approximation to integral value

    """

    integral = 0.0
    xs = np.linspace( -1.0, 1.0, n_quad)

    # naive implementation; one can factor out terms
    # to obtain a substantially more efficient implementation
    for i in range(n_quad-1) :
        integral += (xs[i+1] - xs[i]) * signal((xs[i+1] + xs[i]) / 2.0)

    return integral
```

3 Trapezregel



Um die Genauigkeit der Quadratur zu steigern, kann man entweder mehr Stützstellen oder bessere Approximationen der zu integrierenden Funktion verwenden. Eine sinnvolle Erweiterung der Mittelpunktsregel besteht darin, die mit stückweise konstante Interpolation durch eine stückweise lineare Interpolation zu ersetzen. Für zwei benachbarte Stützstellen x_{i-1}, x_i mit zugehörigen Funktionswerten $f(x_{i-1}), f(x_i)$ lässt sich die Funktion im Intervall $[x_{i-1}, x_i]$ durch die lineare Funktion

$$\psi_i(x) \approx f(x_{i-1}) + \frac{(f(x_i) - f(x_{i-1}))}{x_i - x_{i-1}}(x - x_{i-1}) \tag{4}$$

lokal approximieren. Integration der linearen Approximation ergibt:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_i(x)\,\mathrm{d}x = (x_i - x_{i-1})\,\frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}, \tag{5}$$

was genau der Fläche unter dem Trapez, welches von $x_i, x_{i+1}, f(x_i), f(x_{i+1})$ aufgespannt wird, entspricht. Damit erhalten wir für das Integral von $f(x)$ im Intervall $[a, b]$ die Näherung:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_i(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1})\,\frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \tag{6}$$

4 Interpolatorische Quadraturformeln

Interpolatorische Quadraturformeln approximieren das Integral einer Funktion durch die Integration eines interpolierenden Polynoms. Sei $f\colon [a, b] \to \mathbb{R}$ eine Funktion auf dem Intervall $[a, b]$ und seien $\{x_i \in [a, b]\}_{i=0,\dots,n}$ paarweise verschiedene Stützstellen mit $x_0 = a$ und $x_n = b$. Das Lagrangesche Interpolationspolynom vom Grad n, welches an den Stützstellen x_i die Funktionswerte $f(x_i)$ interpoliert, ist dann

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\, l_j(x), \tag{7}$$

wobei

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}} \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \tag{8}$$

das j-te Lagrange Polynom bezeichnet. Für das Integral von f gilt dann:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \left(\sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j)\right) \mathrm{d}x \tag{9a}$$

$$= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x \tag{9b}$$

$$= (b-a) \sum_{j=0}^{n} w_j\, f(x_j). \tag{9c}$$

Es stellt sich somit die Aufgabe, die Integrale $w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x$ zu bestimmen. Bevor wir dies weiterverfolgen, wollen wir zunächst den Fall $n = 1$, d.h. lineare Interpolation, genauer betrachten. Wir haben zwei Stützstellen und für die Lagrangeschen Interpolationspolynome erhalten wir dann:

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x-b}{a-b} = \frac{b-x}{b-a} \tag{10a}$$

$$l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x-a}{b-a}. \tag{10b}$$

Das Integral von $f(x)$ kann damit wiefolgt approximiert werden:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(a)\int_a^b l_0(x)\,\mathrm{d}x + f(b)\int_a^b l_1(x)\,\mathrm{d}x \tag{11a}$$

$$= f(a)\int_a^b \frac{b-x}{b-a}\,\mathrm{d}x + f(b)\int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x \tag{11b}$$

$$= \frac{f(a)}{b-a}\int_a^b (b-x)\,\mathrm{d}x + \frac{f(b)}{b-a}\int_a^b (x-a)\,\mathrm{d}x \tag{11c}$$

$$= \frac{f(a)}{b-a}\left(b(b-a) - \frac{b^2-a^2}{2}\right) + \frac{f(b)}{b-a}\left(\frac{b^2-a^2}{2} - a(b-a)\right) \tag{11d}$$

$$= f(a)\left(b - \frac{(b+a)}{2}\right) + f(b)\left(\frac{(b+a)}{2} - a\right) \tag{11e}$$

$$= f(a)\frac{(b-a)}{2} + f(b)\frac{(b-a)}{2} \tag{11f}$$

$$= \frac{b-a}{2}\Big(f(a) + f(b)\Big). \tag{11g}$$

Dies ist genau die Trapezregel, welche wir bereits zuvor hergeleitet hatten.

5 Abgeschlossene Newton-Cotes Quadraturformeln

Wir wollen nun interpolatorische Quadraturregeln betrachten, bei welchen die Stützstellen für das Interpolationspolynom äquidistant gewählt sind. Es sei $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ eine Funktion auf dem Intervall $[a,b]$ und es bezeichne

$$x_i = a + ih \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n} \tag{12}$$

die $n+1$ Stützstellen. Wir wollen zunächst eine kompaktere Darstellung der Gewichte

$$w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}\,\mathrm{d}x \tag{13}$$

der allgemeinen Quadraturformel

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j) \tag{14}$$

bestimmen und dabei ausnutzen, dass die Stützpunkte äquidistant verteilt sind. Da $x_i = a + ih$ ist, gilt umgekehrt also $i = \frac{x_i - a}{n}$. Für das j-te Lagrangepolynom (bzgl. der Stützstellen x_i) erhalten wir somit:

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k} = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{\frac{x-a}{h}-\frac{x_k-a}{h}}{\frac{x_j-a}{h}-\frac{x_k-a}{h}} = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{\frac{x-a}{h}-k}{j-k} \tag{15}$$

Substitution[1] von $x = \varphi(t) = th + a$ in Gleichung (13) ergibt dann:

$$w_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_j(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{b-a}\int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} l_j\big(\varphi(t)\big)\varphi'(t)\,\mathrm{d}t \tag{16a}$$

$$= \frac{1}{b-a}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t-t_k}{t_j-t_k}\cdot\frac{b-a}{n}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t-k}{j-k}\,\mathrm{d}t \tag{16b}$$

Trapezregel $n = 1$:

$$w_0 = \int_0^1 \frac{t-1}{0-1}\,\mathrm{d}t = \int_0^1 (1-t)\,\mathrm{d}t = \Big[t - \tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^1 = 1 - \tfrac{1}{2} = \tfrac{1}{2} \tag{17a}$$

$$w_1 = \int_0^1 \frac{t-0}{1-0}\,\mathrm{d}t = \int_0^1 t\,\mathrm{d}t = \Big[\tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^1 = \tfrac{1}{2} \tag{17b}$$

Zusammengefasst ergibt dies erneut die Trapezregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}\Big(f(a)+f(b)\Big). \tag{18}$$

Simpsonregel $n = 2$:

$$w_0 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\frac{t-2}{0-2}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)\,\mathrm{d}t \tag{19a}$$

$$= \frac{1}{4}\int_0^2 (t^2-3t+2)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - \tfrac{3}{2}t^2 + 2t\Big]_0^2 = \frac{1}{6} \tag{19b}$$

$$w_1 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\frac{t-2}{1-2}\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{2}\int_0^2 (t^2-2t)\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{2}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - t^2\Big]_0^2 = \frac{2}{3} \tag{19c}$$

$$w_2 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{t-0}{2-0}\frac{t-1}{2-1}\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\int_0^2 (t^2-t)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{4}\Big[\tfrac{1}{3}t^3 - \tfrac{1}{2}t^2\Big]_0^2 = \frac{1}{6} \tag{19d}$$

[1]Substitutionsregel: Sei $z = \varphi(x)$ und $\mathrm{d}z = \varphi'(x)\,\mathrm{d}x$, dann gilt: $\int_a^b f\big(\varphi(x)\big)\varphi'(x)\,\mathrm{d}x = \int_{\varphi(a)}^{\varphi(b)} f(z)\,\mathrm{d}z$

Zusammengefasst ergibt dies die Simpsonregel:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\right). \tag{20}$$

6 Summierte Quadraturformeln

Für $i = 0, \ldots, n$ seien Stützstellen definiert wie folgt:

$$x_i = a + ih \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{n} \tag{21}$$

Dann gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x. \tag{22}$$

Summierte Quadraturformeln approximieren die Integrale $\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x$ mittels einer geeigneten Quadraturformel, wie zum Beispiel der Trapez- oder Simpsonregel.

Summierte Trapezregel

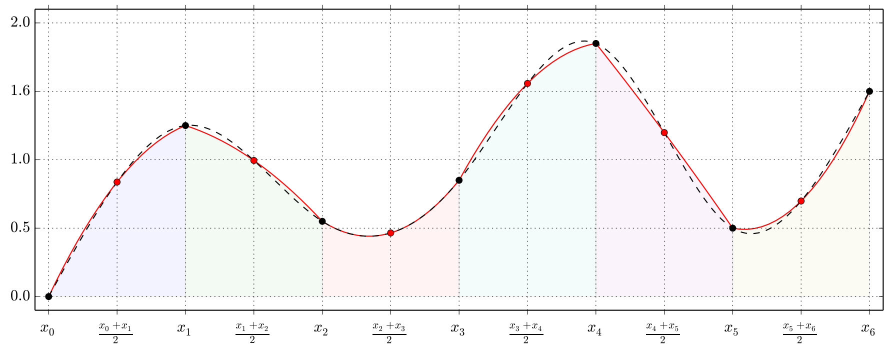
$$\int_a^b f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x_{i+1}-x_i}{2}\Big(f(x_i) + f(x_{i+1})\Big) \tag{23a}$$

$$= \frac{h}{2}\left(\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1})\right) \tag{23b}$$

$$= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=0}^{n-2} f(x_{i+1}) + f(x_n)\right) \tag{23c}$$

$$= \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) \tag{23d}$$

Summierte Simpsonregel Von der summierten Simpsonregel gibt es zwei Varianten. Die erste Variante wendet die Simpsonregel für $i = 1, \ldots, n$ auf die Stützstellen x_{i-1}, $(x_{i-1} + x_i)/2$, x_i an:



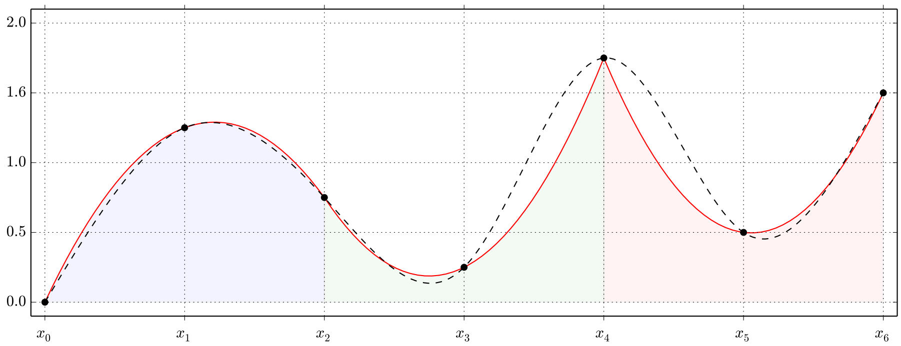
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + f(x_i)\right)\right] \tag{24a}$$

$$= \frac{h}{6}\left(\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) + \sum_{i=1}^{n} 4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\right) \tag{24b}$$

$$= \frac{h}{6}\left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right) \tag{24c}$$

$$= \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \frac{1}{2}f(x_n)\right) \tag{24d}$$

Die zweite Variante wendet die Simpsonregel für $i = 1, \dots, n/2$ auf die Stützstellen x_{2i-2}, x_{2i-1}, x_{2i} an:



$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n/2}\left[\frac{2h}{6}\left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})\right)\right] \tag{25a}$$

$$= \frac{h}{3}\left(\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i})\right) \tag{25b}$$

$$= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + f(x_n)\right) \tag{25c}$$

$$= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)\right) \tag{25d}$$