Wiederholung

RUKU-2

$$f_1 = f_0 + ak_1 + bk_2 \tag{1}$$
$$\text{mit} \tag{2}$$
$$k_1 = hg(x_0, f_0) \tag{3}$$
$$k_2 = hg(x_0 + \alpha h, f_0 + \beta k_1) \tag{4}$$

Steigung wird im Intervall-Mittelpunkt bestimmt

$$a = 0, \quad b = 1 \rightarrow \alpha = \beta = \frac{1}{2} \tag{5}$$
$$f_1 = f_0 + hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{h}{2} g(x_0, f_0)) + \mathcal{O}(h^3) \tag{6}$$

Wiederholung

RUKU-2

$$
\begin{aligned}
f_1 &= f_0 + ak_1 + bk_2 && (7)\\
\text{mit} & && (8)\\
k_1 &= hg(x_0, f_0) && (9)\\
k_2 &= hg(x_0 + \alpha h, f_0 + \beta k_1) && (10)
\end{aligned}
$$

Mittlere Steigung

$$
\begin{aligned}
a =& b = \frac{1}{2} \rightarrow \alpha = \beta = 1 && (11)\\
f_1 &= f_0 + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) + \mathcal{O}(h^3) && (12)\\
k_1 &= hg(x_0, f_0) && (13)\\
k_2 &= hg(x_0 + h, f_0 + k1) && (14)
\end{aligned}
$$

Wiederholung

RUKU-4

$$f_{n+1} = f_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5) \tag{15}$$

$$k_1 = hg(x_0, f_0) \quad , \quad k_2 = hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{k_1}{2}) \tag{16}$$

$$k_3 = hg(x_0 + \frac{h}{2}, f_0 + \frac{k_2}{2}) \quad , \quad k_4 = hg(x_0 + h, f_0 + k_3) \tag{17}$$

DGLs in der Physik

Prinzip der kleinsten Wirkung (korrekt sollte es stationäre Wirkung heissen)

$$S = \int L(x, x(t), \dot{x}(t))dt \tag{18}$$

wobei $\delta S = 0$ bedingt

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0 \tag{19}$$

Die Lagrangefunktion kann geschrieben werden als $L = T - V$
Beispiel harmonischer Oszillator

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{D}{2}x^2 \tag{20}$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0 \tag{21}$$

$$Dx - m\ddot{x} = 0 \tag{22}$$

Schreibe Lösung des AWP in Integraldarstellung

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t, y(t))$$

Allgemein schreibt man das s-stufige Verfahren

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j k_j$$

s-stufiges Einschrittverfahren wobei b_j als Gewichte der Quadraturformel von $\int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t, y(t))$ angesehen werden können.
Motivation zur numerischen Integration

Numerische Integration

Motivation:

- Funktion unbekannt, lediglich Werte an einigen Punkten bekannt (Messdaten)
- Stammfunktion existiert nicht,

$$f(x) = x^x$$

Allgemein gilt, dass die numerische Integration einfaches Verfahren ist und numerisch stabil.
Probleme

- Singularitäten
- Unsteigtkeiten

Generelle Unterscheidung der Methoden

Man unterscheidet im Allgemeinen 3 Methoden

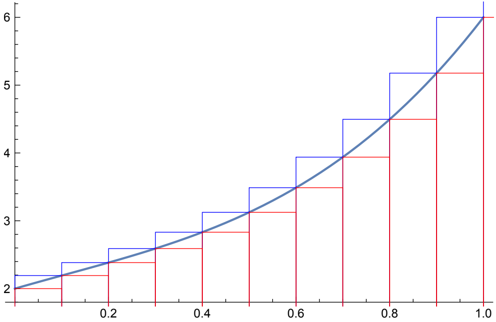
- Methoden mit äquidistanten Stützstellen (z.B. Simpson)
- speziell vorgegebenen Stützstellen (z.B. Gauß)
- frei wählbaren Stützstellen (z.B. Splines)

Strategie:
Unterteilung des Integrationsintervalls als Folge von $n+1$ äquidistante Stützstellen

$$
\begin{aligned}
x_0 &= a & x_1 &= a + h \\
x_2 &= a + 2h & x_i &= a + ih \\
x_n &= b & h &= \frac{b-a}{n}
\end{aligned}
$$

Ober-/Untersumme

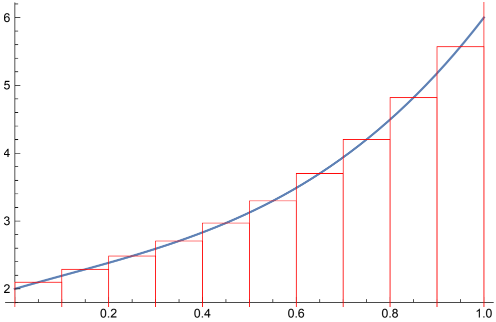
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_i hf(x_i) \tag{23}$$



In Anlehnung an Riemannintegral konvergiert die Summe für $h \to 0$ gegen das Integral.

Anstelle der Intervallgrenze nehme den Intervallmittelpunkt

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_i hf(x_i + 1/2h) \tag{24}$$



Fehler der Mittelpunktmethode

$$F(x+h) = F(x) + h\underbrace{F'(x)}_{f(x)} + \frac{h^2}{2}F''(x) + +\mathcal{O}(h^3) \quad , \quad \text{mit} \quad F'(x) = f(x) \tag{25}$$

Für ein Intervall gilt

$$\int\limits_a^{a+h} f(x)dx = F(a+h) - F(a) = hf(a) + \frac{h^2}{2}f'(a) + +\mathcal{O}(h^3) \tag{26}$$

und damit für den Fehler der Mittelpunktmethode

$$\int\limits_a^{a+h} f(x)dx - hf(a+h/2) = hf(a) + \frac{h^2}{2}f'(a) + \mathcal{O}(h^3) - \tag{27}$$

$$h\left(f(a) + \frac{h}{2}f'(a) + \mathcal{O}(h^2)\right) \approx \mathcal{O}(h^3) \neq \mathcal{O}(h^3) \tag{28}$$

Um den Fehler abschätzen zu können muss man die Näherung als Integral schreiben, d.h. mit $c = (a+b)/2$ und $h = (b-a)$

$$hf(c) = \int_a^b f(c) + f'(c)(x-c)dx \tag{29}$$

$$= \int_a^b P_1(x) \tag{30}$$

Damit kann man den Fehler abschätzen, indem man $f(x)$ um den Mittelpunkt c entwickelt

$$\int_a^b f(x) - P_1(x)dx = \int f(c) + f'(c)(x-c) + \frac{f''(\xi_x)}{2}(x-c)^2 - P_1 \tag{31}$$

$$= \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}(x-c)^2 = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi) \text{ (MWS)} \tag{32}$$

Schreibe

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x) \tag{33}$$

Die Polynome sind definiert als Lagrange-Polynom

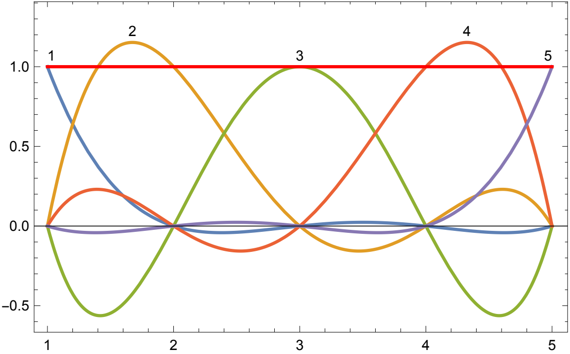
$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \tag{34}$$

mit

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \quad \text{, where } 0 \leq j \leq n \tag{35}$$

Folgende Eigenschaften

$$l_{j \neq i}(x_i) = 0 \quad l_i(x_i) = 1 \tag{36}$$



Lagrange-Polynome für 5 Stützstellen [1,2,3,4,5]
Gut zu sehen, dass die Polynome an allen Stützstellen ausser einer Null sind.

Rest nach Polynominterpolation

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = l(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \tag{37}$$

mit $\xi \in [x_0, \ldots x_n]$ und

$$l(x) = (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n) \tag{38}$$

Der Grad des Polynoms entspricht damit Anzahl der Stützstellen im betrachteten "Grund" Intervall.

$$\int_a^b P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b l_i(x)dx}_{A_i} \tag{39}$$

Damit wird

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)A_i \tag{40}$$

Für (n+1) äquidistante Stützstellen, nennt man die obige Formel Newton-Coates-Formel

A_i sind die Gewichte der Quadratur und unabhängig von der Funktion $f(x)$.

n=1

Betrachte ein Interval mit zwei Stützstellen $[x_0, x_1]$, dann gilt mit $(x_1 - x_0) = h$

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \quad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \tag{41}$$

Damit

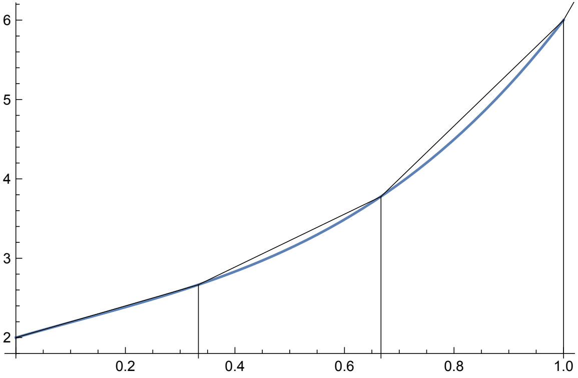
$$A_0 = \int_{x_0}^{x_1} l_0(x) = -\frac{1}{h}\int_{x_0}^{x_1} (x - x_1)dx = \frac{1}{h}\frac{1}{2}\left(x_0 - x_1\right)^2 = \frac{h}{2} \tag{42}$$

$$A_1 = \frac{h}{2} \tag{43}$$

Die hieraus resultierende Quadratur entspricht der Trapezregel

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \sum A_i f(x_i) \tag{44}$$

$$= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) \tag{45}$$



Fehler

Zunächst der Fehler in einem Basisintervall der Länge $h = b - a$

$$\int_a^b f(x) - P_1(x) = \int_a^b \frac{1}{2} f''(\xi_x)(x-a)(x-b)dx \tag{46}$$

Nutze wieder den MWS

$$\int g(x)f(x)dx = g(\xi) \int f(x)dx \quad \text{mit } \xi \in [a, b] \tag{47}$$

und damit

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{1}{2} f''(\xi_x)(x-a)(x-b)dx &= \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)dx \\ &= -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3 \end{aligned} \tag{48}$$

Damit ist der "lokale Fehler" $\mathcal{O}(h^3)$. Wiederum $1/h$ Schritte nötig damit ist der Fehler Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$

Gesamtintegral bestehend aus n Grundintegralen

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i_1}}^{x_i} f(x)dx \tag{49}$$

$$\approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) \left[f(x_{i-1}) + f(x_i) \right] \tag{50}$$

$$= \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) + f(b) \right] \tag{51}$$

Globaler Fehler nach Integration von n Grundintervallen

$$E = \sum_{i}^{n} -\frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \tag{52}$$

$$= -\frac{h^3 n}{12} \underbrace{\left[\frac{1}{n} \sum_{i}^{n} f''(\xi_i) \right]}_{M} \quad \text{mit} \quad \min f''(x) \leq M \leq \max f''(x) \ \forall x \in [a, b]$$

Mit

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

$$E = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) \quad \xi \in [a,b] \tag{53}$$

Damit ist der globale Fehler $\mathcal{O}(h^2)$
Kann man das weiter verbessern?

n=2

Standardverfahren für äquidistante Stützstellen.
Simpson-Integration
Anderer Zugang nicht über Interpolation. Schreibe

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \int_{-h}^{h} (ax^2 + bx + c)dx + R_2(x) = \frac{2}{3}ah^3 + 2ch + R_2(h)$$

Integral ist unabhängig von b aus Symmetriegründen.
Bestimme die Koeffizienten

$$f(h) = ah^2 + bh + c \quad (54)$$
$$f(0) = c \quad (55)$$
$$f(-h) = ah^2 - bh + c \quad (56)$$
$$(57)$$

Daraus ergibt sich

$$c = f(0) \tag{58}$$

$$2ah^2 + 2c = f(h) + f(-h) \tag{59}$$

$$2ah^2 = f(h) - 2f(0) + f(-h) \tag{60}$$

Eingesetzt in das Integral

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \frac{h}{3}\left(2ah^2 + 6c\right) + R_2(x) \tag{61}$$

$$= \frac{h}{3}\left(f(h) - 2f(0) + f(-h) + 6f(0)\right) + R_2(x) \tag{62}$$

$$= \frac{h}{3}\left(f(-h) + 4f(0) + f(h)\right) + R_2(h) \tag{63}$$

Für allgemeines Intervall

$$\int_a^b = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \cdots + 4f_{n-1} + f_n\right) + R_2 \qquad (64)$$

$$= \frac{h}{3}\left[f_0 + 2\sum_{i=2}^{n/2} f_{2i-2} + 4\sum_{i=1}^{n/2} f_{2i-1} + f_n\right] \qquad (65)$$

heißt Simpsonregel.

Achtung

Beim klassischen Simpsonverfahren muss die Anzahl der Stützstellen ungerade sein.

Lokaler Fehler

$$
\begin{aligned}
R_2 &= \int_{-h}^{h} f(x)dx - \frac{h}{3}\left(f(-h) + 4f(0) + f(h)\right) && (66) \\
&= \int_{-h}^{h} \left\{ f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2}x^2 + \frac{f'''(0)}{6}x^3 + \frac{f''''(0)}{24}x^4 + \mathcal{O}(h^5) \right\} && (67) \\
&- \frac{h}{3}\left(f(-h) + 4f(0) + f(h)\right) && (68) \\
&= 2\left[hf(0) + \frac{h^3}{6}f''(0) + \frac{h^5}{120}f''''(0) + \mathcal{O}(h^7) \right] && (69) \\
&- \frac{h}{3}\left(f(-h) + 4f(0) + f(h)\right) && (70) \\
&= -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \quad \text{mit} \quad -h \le \xi \le h && (71)
\end{aligned}
$$

Globaler Fehler

$$R_2^g = -\frac{h^5}{90}\frac{n}{2}\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) \tag{72}$$

$$= -\frac{h^5}{90}\frac{n}{2} f^{(4)}(\xi) \tag{73}$$

$$= \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi) \quad \text{mit } a \leq \xi \leq b \tag{74}$$

Das Simpson-Verfahren integriert Polynome bis zum Grad 3 exakt.
Was macht man wenn Stützstellenzahl vorgegeben und gerade ist?

Simpson Integration mit gerader Stützstellenzahl

- Simpson-Regel fur n-1 + Trapez für das letzte Interval globaler Fehler

$$-\left(\frac{b-a-h}{180}h^4 f^{(4)}(\xi_1) + \frac{1}{2}h^3 f''(\xi_2)\right) = \mathcal{O}(h^3) \qquad (75)$$

- besser mit Simpsons 3/8 Regel ($m = 3$) Grundinterval besteht aus vier Punkten mit $I \in [0, 3h]$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3}{8}h(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + 3f_4 + 3f_5 + \cdots + f_n) \qquad (76)$$

$$E = -\frac{b-a}{80}h^4 f^{(4)}(\xi) = \mathcal{O}(h^4) \qquad (77)$$

Achtung

Fehler bei 3/8 Regel der gleiche wie bei Simpson, daher wende die Regel nur auf die letzten 4 Punkte an.