Dr. Pascal Heider
Alexander Stippler
Timo Tonn

WS 2009/2010
Blatt 12
01.02.2010

WiMa-Praktikum II (Numerik)

Adaptive Quadratur

In den Übungen haben wir schon zwei Quadraturformeln zur numerischen Integration einer Funktion f auf dem Intervall (a, b) kennengelernt, nämlich die summierte Trapezregel und die summierte Simpsonregel.
Dabei haben wir zunächst das Intervall (a, b) äquidistant zerlegt, $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b$, d.h. $x_i = ih$, $i = 0, \dots, N$ mit $h = (b-a)/N$. Das Integral $I_{(a,b)} = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ wird bei der summierten Simpsonregel approximiert durch

$$Q_{(a,b)}(h) = \frac{h}{6} \sum_{i=1}^{N} \left(f(x_{i-1}) + f(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}) + f(x_i) \right). \tag{1}$$

Man kann zeigen, dass für den (Quadratur-)Fehler gilt:

$$I_{(a,b)} - Q_{(a,b)}(h) = -\frac{b-a}{180} \frac{h^4}{16} f^{(4)}(\xi), \tag{2}$$

mit $\xi \in (a, b)$, falls f hinreichend glatt ist (genauer: $f \in C^4(a, b)$).

Will man nun garantieren, dass dieser Fehler eine vorgegebene Toleranz ε nicht überschreitet, muss man nach (2) die Schrittweite h so wählen, dass

$$\frac{b-a}{180} \frac{h^4}{16} \max_{x \in (a,b)} |f^{(4)}(x)| < \varepsilon \tag{3}$$

erfüllt ist. Dies ist aber problematisch (wenn nicht unmöglich: vgl. $f(x) = \sqrt{x}$), da bei *lokal* großen Werte von $f^{(4)}$ die Erfüllung von (3) eine *global* sehr kleine Schrittweite bedeutet.

Das Ziel von adaptiven Quadraturformeln ist es deshalb mit möglichst wenigen (dann i.a. nicht mehr äquidistanten) Quadraturpunkten das Integral $I_{(a,b)}$ innerhalb der vorgegeben Genauigkeit ε zu bestimmen. Zum Erreichen dieses Zieles brauchen wir einen Fehlerschätzer, der uns angibt, ob wir bereits genau genug approximiert haben, oder ob wir die Genauigkeit noch erhöhen müssen.

Die Idee ist also wie folgt: Man berechne zunächst eine Approximation für $I_{(a,b)}$. Falls der Fehler dieser Approximation in der vorgegeben Genauigkeit liegt, wird die adaptive Prozedur gestoppt. Ansonsten wird die Schrittweite so lange halbiert, bis das Integral $I_{(a,a+h)}$ genau genug approximiert wird. Anschließend betrachtet man das Intervall $I_{(a+h,b)}$ und wiederholt das Vorgehen mit initialer Schrittweite $h = b - (a+h)$ bis das Integral auf dem gesamten Bereich innerhalb der gegebenen Toleranz approximiert ist.

Für gegebene Toleranz ε und minimale Schrittweite h_{min} liest sich oben beschriebenes Vorgehen als Pseudoalgorithmus wie folgt:

Schritt 0: Setze $Q^{ad} = 0$, $\alpha = a$, $\beta = b$;

Schritt 1: Berechne:

- $Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)$: Approximation für $I_{(\alpha,\beta)}$ (vgl. (1));
- $\varepsilon_{(\alpha,\beta)}$: Fehlerschätzer für $\left|I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)\right|$ (vgl. (6));

Schritt 2: Falls $\varepsilon_{(\alpha,\beta)} \leq \varepsilon\frac{\beta-\alpha}{b-a}$ oder $(\beta-\alpha) < h_{min}$
gehe zu Schritt 4;

Schritt 3: Setze $\beta = (\alpha+\beta)/2$ und gehe zu Schritt 1;

Schritt 4: Setze $Q^{ad} = Q^{ad} + Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)$, $\alpha = \beta$, $\beta = b$.
Falls $\alpha < b$
gehe zu Schritt 1;
sonst
Stopp.

Wegen $\varepsilon_{(\alpha,\beta)} \leq \varepsilon\frac{\beta-\alpha}{b-a}$ in Schritt 2 folgt, dass die Summe der $\varepsilon_{(\alpha,\beta)}$ über alle Teilintervalle kleiner als ε bleibt und somit Q^{ad} das gesuchte Integral $I_{(a,b)}$ innerhalb der geforderten Genauigkeit approximiert.

Bleibt noch offen wie der Schätzer für den Fehler $\left|I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)\right|$ also $\varepsilon_{(\alpha,\beta)}$ bestimmt werden kann. Dazu betrachten wir das Intervall (α,β) und die Approximationen von $I_{(\alpha,\beta)}$ mittels der summierten Simpsonregel (1) für Schrittweiten $h = \beta-\alpha$ und $h = (\beta-\alpha)/2$ (also $Q_{(\alpha,\beta)}(\beta-\alpha)$ und $Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)$). Für diese beiden Approximationen gilt dann nach (2)

$$I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}(\beta-\alpha) = -\frac{(\beta-\alpha)^5}{180\cdot 16}f^{(4)}(\xi), \tag{4}$$

und

$$I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right) = -\frac{1}{16}\frac{(\beta-\alpha)^5}{180\cdot 16}f^{(4)}(\eta), \tag{5}$$

mit (i.a. verschiedenen) $\xi,\eta \in (\alpha,\beta)$.

Subtraktion von (4) und (5) ergibt (unter der Annahme, dass $f^{(4)}$ ungefähr konstant ist)

$$\begin{aligned}\Delta Q_{(\alpha,\beta)} &= Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right) - Q_{(\alpha,\beta)}(\beta-\alpha)\\ &= -15\frac{1}{16}\frac{(\beta-\alpha)^5}{180\cdot 16}f^{(4)}(\eta),\end{aligned}$$

so dass sich letztendlich durch einsetzen in (5) ergibt:

$$I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right) = \frac{1}{15}\Delta Q_{(\alpha,\beta)}.$$

Der gesuchte Schätzer für $\left|I_{(\alpha,\beta)} - Q_{(\alpha,\beta)}\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)\right|$ (Quadraturfehler im Intervall (α,β)), ist also

$$\varepsilon_{(\alpha,\beta)} = \frac{1}{15}\left|\Delta Q_{(\alpha,\beta)}\right|. \tag{6}$$

Aufgabe

1. Schreiben Sie eine Funktion

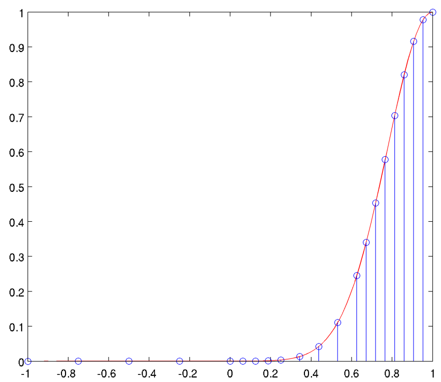
```
[Qad,nodes] = quadAdapt1(f,xMin,xMax,tol,hmin,varargin)
```

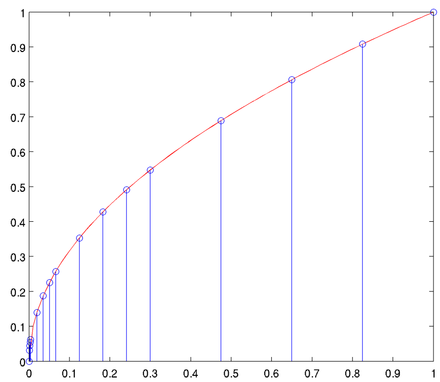
welche obigen Algorithmus zur Bestimmung einer Approximation des Integrals $\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x)\,\mathrm{d}x$ innerhalb der vorgegebenen Toleranz `tol` und mit einer minimalen Schrittweite `hmin` durchführt.
Dabei sollen zusätzlich zu dem Wert `Qad` auch alle Stellen, an denen die Funktion während des Algorithmus ausgewertet wurde, zurückgegeben werden (in `nodes`).

Testen Sie Ihre Funktion für sinnvolle Werte `tol`, `hmin` und

- $f(x) = \exp(-10(x-1)^2)$, $x_{\min} = -1$, $x_{\max} = 1$,
- $f(x) = \sqrt{x}$, $x_{\min} = 0$, $x_{\max} = 1$.

Zeichnen Sie den Integranden und markieren Sie die Stellen, an denen die Funktion ausgewertet wurde.





2. Die Verallgemeinerung auf höherdimensionale Quadraturformeln ist sehr einfach. Wir wollen dies hier für den zweidimensionalen Fall veranschaulichen. Gesucht ist also

$$I^2[f] = \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y.$$

Dieses zweidimensional Integral kann man aber auch als Verknüpfung zweier eindimensionaler Integrale auffassen:

$$I^2[f] = I^1[I^1[f(\cdot,y)]]$$

wobei dann $I^1[f(\cdot,y)] = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x,y)\,\mathrm{d}x$ eine eindimensionale Funktion in y ist.

Hat man nun eine eindimensionale Quadraturformel $Q^1[f]$ (z.B. die adaptive Simpsonregel aus dem ersten Teil) mit Toleranz ε gegeben, so kann man analog

$$Q^2[f] = Q^1[Q^1[f(\cdot,y)]]$$

definieren. Für den Fehler kann man leicht zeigen, dass gilt

$$\left|I^2[f] - Q^2[f]\right| \leq (y_{\max} - y_{\min} + 1)\,\varepsilon.$$

Dieses Vorgehen ist in der MATLAB Funktion `dblquad` realisiert. Schreiben Sie analog zu `dblquad` eine Funktion

```
[Qad,nodes] = quadAdapt2(f,xMin,xMax,yMin,yMax,tol,hmin,varargin)
```

welche eine Approximation von $I^2[f] = \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$ innerhalb der vorgegebenen Toleranz `tol` und mit einer minimalen Schrittweite `hmin` durchführt. Dabei soll wiederum zusätzlich zu dem Wert `Qad` auch alle Punkte (jetzt x und y Koordinaten), an denen die Funktion während des Algorithmus ausgewertet wurde, zurückgegeben werden (in `nodes`).

Testen Sie Ihre Funktion für sinnvolle Werte `tol`, `hmin` und

- $f(x) = \exp(-10(x-1)^2 - 10(y-1)^2)$, $x_{\min} = y_{\min} = -1$, $x_{\max} = y_{\max} = 1$,
- $f(x) = \sqrt{x+y}$, $x_{\min} = y_{\min} = 0$, $x_{\max} = y_{\max} = 1$.

Zeichnen Sie wiederum den Integranden und markieren Sie die Punkte, an denen die Funktion ausgewertet wurde.