5.15 Numerieke integratie volgens Gauss

5.15.1 Het idee achter de methode van Gauss

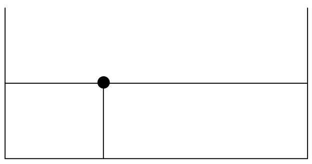
We hebben kennis gemaakt met drie methoden voor de benadering van een integraal. Bij de trapeziumregel gebruikten we beide randpunten. Bij de rechthoekregel gebruikten we alleen het middenpunt, maar de benadering was beter. Bij de paraboolbenadering gebruikten we de drie punten en de benadering werd nog beter.

Waarom werd de benadering beter? Voor een benadering nemen we steeds een geschikte 'gemiddelde' functiewaarde in het integratieinterval. Daarom was de functiewaarde van het 'gemiddelde'punt (in het midden) ook een goede keus, beter dan het gemiddelde van de randpunten. We verkregen een nog betere 'gemiddelde'functiewaarde toen we die drie punten combineerden: 2/3 van het midden en 1/3 van de randpunten samen. Gauss vroeg zich af of: kan het met drie punten nog beter?

Bekijk nog eens de integraal van de functie f die we over het interval (a, b), van a tot b, willen berekenen. Voor ons gemak verschuiven we het interval, zodat het symmetrisch is rond $x = 0$, en passen de schaal voor x aan, van -1 tot 1:

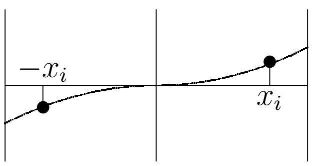
$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx$$
$$B = h.\text{gemiddelde functiewaarde}$$

Om te beginnen merken we op, dat de benadering hoe dan ook foutloos is voor een veelterm van de nulde graad, de constante functie $f(x) = c$. Immers, dan is



$$I = \int_{-1}^{1} cdx = c.h$$
$$B = h.\text{gemiddelde functiewaarde} = h.c$$

We kunnen de benadering ook foutloos maken voor een oneven functie, zoals de oneven macht x^3 of $x^1 = x$, door de punten met bijbehorende gewichten handig te kiezen. Kenmerk van een oneven functie is, dat de grafiek gespiegeld is in de oorsprong. Tegenover iedere negatieve bijdrage aan de integraal staat dus een positieve bijdrage, waardoor de integraal totaal nul wordt. Als we er maar voor kiezen de punten symmetrisch ten op zichte van 0 te nemen, en met dezelfde gewichten, dan wordt de benadering vanzelf nul. Bijvoorbeeld het midden $x = 0$ en paren x_i, $-x_i$ met gelijke gewichten w_i:

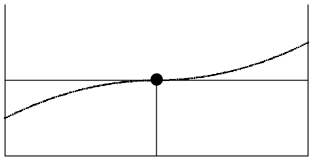


$$\begin{aligned} w_i f(-x_i) + w_i f(x_i) &= w_i(f(-x_i) + f(x_i)) \\ &= w_i(-f(x_i) + f(x_i))) = 0 \end{aligned}$$

Blijft dus over het kiezen van de punten zó, dat de integralen van de even machten van x foutloos worden tot zo hoog mogelijke macht.

5.15.2 Eenpunts Gauss

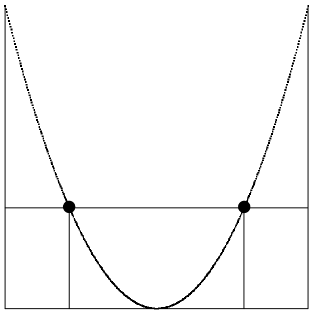
Als er maar een punt mogelijk is, dan is dat vanwege de symmetrie het middenpunt: m. Daardoor is eenpunts Gauss hetzelfde als de rechthoekregel:



$$
\begin{aligned}
R_{1G} &= h f_m \\
E_{1G} &= +\frac{1}{2}\frac{h^3}{3!}\frac{f''}{2!}
\end{aligned}
$$

5.15.3 Tweepunts Gauss

De tweepunts Gauss benadering heeft, vanwege de symmetrie, steunpunten bij $-x_2$ en x_2. Ieder steunpunt krijgt gewicht 1/2. De waarde van x_2 wordt verder bepaald door te eisen dat de laagste even graads veelterm, dus x^2, foutloos wordt benaderd (de nuldegraads constante wordt altijd foutloos benaderd). Dat betekent dat voor $f(x) = x^2$ de waarden $B = I$ gelijk zijn:



$$
\begin{aligned}
B &= h(1/2x_2^2 + 1/2x_2^2) = 2x_2^2 \\
I &= \int_{-1}^{1} x^2 dx = 1/3[x^3]_{-1}^{+1} = 1/3\,[1 - -1] = 2/3 \\
2x_2^2 &= 2/3 \quad x_2^2 = 1/3 \quad x_2 = \sqrt{1/3} = 0,57735
\end{aligned}
$$

De steunpunten zitten ongeveer in het midden van de linker en rechterhelft van het interval. Ze zijn dus mooi verdeeld over het interval. De tweepunt Gauss is een benadering die foutloos is van de nulde tot en met de derdegraads veeltermen (voor oneven veeltermen is die altijd foutloos immers).

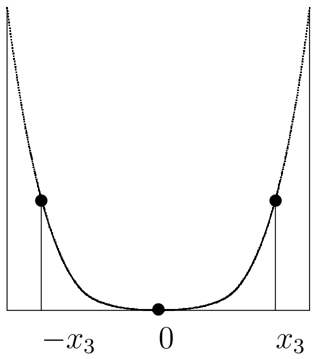
Samenvatting Voor tweepunts Gauss integratie bij een interval ter grootte h rond het midden m geldt:

$$
\begin{aligned}
x_{2\pm} &= m \pm \frac{h}{2}\sqrt{1/3} \\
B_{2G} &= h(\tfrac{1}{2}f_{2-} + \tfrac{1}{2}f_{2+}) \\
E_{2G} &= +\frac{2}{3}\frac{h^5}{5!}\frac{f''''}{4!}
\end{aligned}
$$

Merk op, dat de fouten bij de Gauss benaderingen dezelfde soort formules hebben als bij de trapeziumregel en de Simpsonregel. Alleen: alle fouten hebben plusteken: de Gauss benadering valt te laag uit voor convexe functies. Verder is het opmerkelijk dat de fout van tweepunts Gauss van dezelfde orde is als de fout van driepunts Simpson. Eenzelfde effect trad op bij het vergelijken van de rechthoek benadering (eenpunts Gauss) en de trapeziumregel (met twee (rand)punten). Door de twee punten strategisch op het interval te kiezen kunnen we met een punt minder toe.

5.15.4 Driepunts Gauss

Bij drie punten nemen we naast het punt in het midden de andere twee op posities die symmetrisch zijn, x_3 en $-x_3$. Voor de gewichten kiezen we w_3 voor de twee en dus $1 - 2w_3$ voor het middenpunt. We kiezen nu de twee variabelen x_3 en w_3 zodanig dat de driepunts Gauss foutloos is voor de tweedegraads macht èn voor de vierdegraads macht.



Voor de tweedegraads macht betekent dat:

$$B = h(w_3x_3^2 + (1 - 2w_3)0^2 + w_3x_3^2) = 2(2w_3x_3^2) = 4w_3x_3^2$$
$$I = \int_{-1}^{1} x^2 dx = 2/3$$
$$\Rightarrow w_3x_3^2 = 1/6$$

Voor de vierdegraads macht betekent dat:

$$B = h(w_3x_3^4 + (1 - 2w_3)0^4 + w_3x_3^4) = 2(2w_3x_3^4) = 4w_3x_3^4$$
$$I = \int_{-1}^{1} x^4 dx = 2/5$$
$$\Rightarrow w_3x_3^4 = 1/10$$

Tezamen geeft dat positie en gewicht. Bijvoorbeeld door deling wordt $x_3^2 = 6/10 = 3/5$, met positie $x_3 = \sqrt{3/5} = 0,7746$ en gewicht $w_3 = 1/6/3/5 = 5/18 = 0,2778$. Vergeleken met tweepunts Gauss zijn de punten naar de rand opgeschoven. Ruwweg zitten de drie punten op de middens van drie deelintervallen ter grootte $h/3$: op $-2/3$, 0 en $2/3$. Wat betreft de gewichten telt het middenpunt ongeveer even zwaar als de andere twee samen.

Samenvatting Voor driepunts-Gauss bij een interval ter grootte h rond het midden m geldt:

$$x_{3\pm} = m \pm \frac{h}{2}\sqrt{3/5}$$
$$B_3 = h(\tfrac{5}{18}f_{3-} + \tfrac{4}{9}f_m + \tfrac{5}{18}f_{3+})$$
$$E_3 = +\frac{9}{5}\frac{h^7}{7!}\frac{f^{(6)}}{6!}$$

We kunnen wel begrijpen dat de fout er ongeveer zo uit moet zien. De benadering is immers foutloos tot en met vijfdegraads veeltermen. Denk eraan dat de nulde en oneven machten altijd foutloos zijn, zodat we aan de tweede en vierde macht de nulde, eerste, derde en vijfde kunnen toevoegen zonder een fout te maken. Deze veelterm wordt gekenmerkt door de eigenschap dat de zesde afgeleide nul is. De fout zal dus evenredig met de zesde afgeleide zijn. Om dimensionele redenen is ze evenredig met $h^7 = h.h^6$, waarbij h voor het interval en h^6 voor de dimensie van de afgeleide staat.

5.16 Herhaling van intervallen

We kunnen een benadering op een interval herhaald toepassen, door het oorspronkelijke interval ter grootte h te verdelen in een aantal N deelintervallen ter grootte $h_i = h/N$. Door de benaderingen over alle deelintervallen op te tellen krijgen we een benadering gebaseerd op de herhaling van de benadering over een deelinterval. De daarbij behorende fout is de som van de fouten van ieder deelinterval. We nemen nu aan dat de afgeleide niet teveel varieert over het interval. Dat is aannemelijk, omdat een hogere afgeleide numeriek gezien een navenant breder gebied heeft waarover die wordt bepaald. Dan is de fout over ieder enkel deelinterval, bijvoorbeeld nummer i, van de n-punts Gauss benadering van de orde $h_i^{2n+1} = (h/N)^{2n+1} = h^{2n+1}/N^{2n+1}$. Daaruit volgt de formule van de fout $E_n[N]$ bij de benadering bestaande uit de op N deelintervallen herhaalde n-punts Gauss benadering:

$$E_n(i) \approx E_n/N^{2n+1} \quad E_n[N] \approx N.E_n(i) = E_n/N^{2n}$$

Merk op, dat de fout afneemt met het aantal deelintervallen met N^6. Bijvoorbeeld neemt de fout bij een verdubbeling van het aantal deelintervallen af met een factor $2^6 = 64$, dat is bijna twee decimalen per verdubbeling! Deze gedachte voert tot het volgende algoritme (als Pascal functie) voor het numeriek bepalen van een integraal:

```
function driepuntsGauss (a,b,dI: real;
                         f: functiontype): real;
  var
    i,N: integer;
    t3,h,m,
    f1,f2,fm,
    B0,B,E: real;
begin
  t3:= sqrt(3/5)/2; (* t3=x3/2 *)
  N:=1; h:= b-a; m:= a+h/2; B:= h*m;
  repeat
    B0:= B; B:=0;
    for i:=0 to N-1 do
    begin
      fm:= f(m+i*h);
      f1:= f(m+(i-t3)*h); f2:= f(m+(i+t3)*h);
      B:= B+ (8*fm+5*(f1+f2))/18
    end;
    B:= B*h; E:= (B-B0)/63;
    N:= 2*N; h:=h/2; m:= a+h/2;
  until abs (E)<dI;
  driepuntsGauss:= B+E
end;
```

Voorbeeld 1: $\int_0^\pi \sin(x)dx = 2$ bepalen met driepunts Gauss en intervalhalvering. We zien achtereenvolgens: $N = 1, B3 = 2,00138$, $N = 2, B3 = 2,000016$, $N = 4, B3 = 2,00000024$, $N = 8, B3 = 2,000000002$. Vergelijk dat met de Simpsonregel: $N = 1, B3 = 2,094$, $N = 2, B3 = 2,0045$, $N = 4, B3 = 2,00027$ en $N = 8, B3 = 2,000016$.

Voorbeeld 2: $\int_0^1 x^{1/3}dx = 3/4$ bepalen met driepunts Gauss en intervalhalvering. We zien achtereenvolgens: $N = 1, B3 = 0,7538$, $N = 2, B3 = 0,7515$, $N = 4, B3 = 0,75060$, $N = 8, B3 = 0,755024$, $N = 16, B3 = 0,750095$ en $N = 32, B3 = 0,750038$. Vergelijk dat met de Simpsonregel: $N = 1, B3 = 0,696$, $N = 2, B3 = 0,728$, $N = 4, B3 = 0,7414$, $N = 8, B3 = 0,7466$, $N = 16, B3 = 0,74865$ en $N = 32, B3 = 0,74946$.

C.M.Fortuin
van Deldenpad 8
6862DC Oosterbeek NL
fortuinc@xs4all.nl