CPII - VL 5

3.3 Gauss - Quadratur : I= $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx$

Quadraturformel $Q_n = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k f(x_k)$

z.B. Trapezformel $Q_2 = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a) = f(a) + f(b)$

$f(x) = a_1 x + a_2 :\ I = \left[\frac{a_1 x^2}{2} + a_2 x\right]_{-1}^{1} = 2 a_2,\ Q_2 = 2 a_2$

z.B. Simpsonformel : $Q_3 = \frac{f(a) + 4 f(0) + f(b)}{3}$

$f(x) = a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 :\ I =$
$\frac{2}{3} a_2 + 2 a_4 = Q_3 = (-a_1 + a_2 - a_3 + a_4 + 4 a_4 + a_1 + a_2 + a_3 + a_4) / 3$

Ergebnis : Quadratur ist exakt für Polynome vom Grad n - 1. Kann aber auch höher sein (Exaktheitsgrad)

Idee : Wählen Stützstellen so, dass max. Exakheitsgrad ergibt. (2 n) → Gauss - Quadratur

$$\int_a^b f(x)\, dx \sim \int_a^b p_n(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \left(\int_a^b L_k(x)\, dx\right) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k f(x_k) = Q_n$$

$$p_n(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) L_k(x) \rightarrow p_n(x_i) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) L_k(x_i) = f(x_i)$$

Wähle Stützstellen als Nullstellen der Polynome. In dem Fall sind es Legendre - Polynome

$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x)\, dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}$ Gauss - Legendre - Int

$f(x) = w(x) p_n(x)$

$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) E^{-x^2}\, dx = 2^n n!\, \delta_{nm}$ Gauss - Hermite - Int

Beispiele :

A) Stefan - Boltzmann : $u(\nu, T)$, $S = \frac{c}{4}\int_0^{\infty} u(\nu, T)\, d\nu = \gamma \int_0^{\infty} \frac{x^3}{E^x - 1}\, dx = \sigma T^4$

$\int_0^{\infty} \frac{x^n}{E^x - 1}\, dx = \zeta(n+1)\, \Gamma(n+1)$, $\zeta(n+1) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^n}$,

$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} x^n E^{-x}\, dx$. Für $n \in N : \Gamma(n+1) = n!$

B) Wärmekapazität von Festkörperphysik (Debye - Modell) : $C_v \sim \int_0^{T_D/T} x^4 \frac{E^x}{(E^x - 1)^2}\, dx$

Normalverteilung (zentraler Grenzwertsatz)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} E^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Mittelwert : μ, Varianz : σ^2

Kummulative Verteilung $F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x')\,dx' = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2}\,\sigma}\right)\right)$

$\mathrm{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x E^{-y^2}\,dy$ Fehlerfunktion

Toleranzintervall : $T(\sigma) = \int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} f(x)\,dx = \mathrm{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 68,2\,\%$

$T(2\sigma) = 95,4\,\%$

$T(3\sigma) = 99,7\,\%$

Anwendungen :

* Maxwell - Boltzmann
* Diffusion, Browsche Bewegung
* Statistische Messfehler → Fehlerrechnung

1.5 Ausgleichsrechnung

Methode der kleinsten Quadrate (Gauss) : Finde die Funktion $f(x)$, die für die n Messwerte $y_i(x_i)$ die quadr. Abweichungen minimiert :

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 = \chi^2 \to \text{Minimum}$$

D.h. Anpassung / Fit der Funktion f an die Messwerte

1.5 .1 Lineare Regression

$f(x) = a + b\,x$ - Ausgleichsgerade

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - b\,x_i)^2 = \chi^2(a, b) \to \text{Minimum}$$

$$D_b\,\chi^2 = -2 \sum (y_i - a - b\,x_i)\,x_i = 0$$

$$\sum x_i\,y_i = b \sum x_i^2 + a \sum x_i$$

$$\langle xy \rangle = b \langle x^2 \rangle + a \langle x \rangle$$

$$D_a\,\chi^2 = -2 \sum (y_i - a - b\,x_i) = 0$$

$$\sum y_i = b \sum x_i + a \sum 1$$

$$\langle y \rangle = b \langle x \rangle + a$$

$$\begin{pmatrix} \langle y \rangle \\ \langle xy \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1 \rangle & \langle x \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$a = \langle y \rangle - b \langle x \rangle$$

$$b = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \ \langle y \rangle}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{\text{cov}(x, y)}{\text{var}(x)}$$

Regressionsparameter:

$SST = \text{var}(y) = \sum (y_i - \langle y \rangle)^2$ Totaler Fehler

$SSR = \sum (f(x_i) - \langle y \rangle)^2$ Regressionsfehler

$SSE = \sum (f(x_i) - y_i)^2$ restliche Fehler

SST = SSR + SSE (Regressions - Identität)

Güte der Regression $R^2 = \frac{SSR}{SST}$