6 Numerische Integration

Definition: Unter einer Quadraturformel (Algorithmus) I_n zur Berechnung des bestimmten Integrals

$$I : C[a,b] \to \mathbb{R}, \quad I(f) = \int_a^b f(x)\,dx,$$

versteht man die Summe

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k), \quad a_k \in \mathbb{R}, \quad x_k \in [a,b],$$

mit den Knoten $x_0, \ldots, x_n$ und den Gewichten $a_0, \ldots, a_n$. Die Differenz

$$R_n(f) = I(f) - I_n(f)$$

bezeichnet man als den Quadraturfehler. Gilt

$$R_n(p) = 0 \quad \text{für alle} \quad p \in \mathcal{P}_m$$

so heißt I_n exakt auf $\mathcal{P}_m$.

Definition: Eine Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k)$$

heißt interpolatorisch, wenn I_n exakt auf $\mathcal{P}_n$ ist.

Satz: Zu beliebig vorgegebenen Stützstellen

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$$

existiert genau eine interpolatorische Quadraturformel $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k)$. Ihre Gewichte a_k erhält man durch Integration der Lagrange–Grundpolynome

$$a_k = \int_a^b L_k^{(n)}(x)\, dx, \quad L_k^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Bemerkung: Für den Spezialfall äquidistanter Stützstellen

$$x_k = a + k \cdot h, \quad k = 0, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n},$$

heißen diese Quadraturformeln Newton-Cotes-Formeln. Der Ausdruck für die Gewichte a_k vereinfacht sich durch Substitution $x \mapsto t = \frac{x-a}{h}$ zu

$$a_k = h \cdot \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ k \neq 0}}^{n} \frac{t-j}{k-j}\, dt, \quad k = 0, \dots, n.$$

Beispiele (Newton-Cotes-Formeln):

(i) Trapezregel

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right), \quad |R_1(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12}\|f''\|_\infty.$$

(ii) Simpson-Regel

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right), \quad |R_2(f)| \leq \frac{(b-a)^4}{2880}\|f^{(4)}\|_\infty.$$

(iii) $\frac{3}{8}$−Regel

$$I_3(f) = \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3 \cdot f\left(\frac{b+2a}{3}\right) + 3 \cdot f\left(\frac{2b+a}{2}\right) + f(b)\right),$$

$$|R_3(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{6480}\|f^{(4)}\|_\infty.$$

Bemerkung: Bei den Newton-Cotes-Formeln treten ab $n = 7$ negative Gewichte a_k auf. Dadurch erhöht sich die Rundungsfehleranfalligkeit dieser Formeln (Auslöschungsgefahr). Außerdem kann i.a. keine Konvergenz

$$I_n(f) \to I(f), \quad n \to \infty, \quad f \in C[a,b],$$

erwartet werden. Deshalb werden die Newton-Cotes-Formeln höherer Ordnung kaum benutzt. Es ist besser die summierten Quadraturformeln anzuwenden:

(i) Unterteile $[a, b]$ in Teilintervalle $[x_k, x_{k+1}]$ mit z.B.

$$x_k = a + k \cdot h, \quad k = 0, \ldots, m, \quad h = \frac{b-a}{m}.$$

(ii) Wende auf jedem Teilintervall eine Quadraturformel $I_{k,n}(f)$, $n < m$, an

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{m-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \sim \sum_{k=0}^{m-1} I_{k,n}(f).$$

Beispiele:

(i) summierte Trapezregel

$$I_1^{\sum}(f) = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\cdot\sum_{k=1}^{m-1} f(x_k) + f(b)\right), \quad |R_1^{\sum}(f)| \le \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_{i} nfty.$$

(ii) summierte Simpson-Regel

$$I_2^{\sum}(f) = \frac{h}{6}\left(f(a) + 2\cdot\sum_{k=1}^{m-1} f(x_k) + 4\cdot\sum_{k=0}^{m-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) + f(b)\right),$$

$$|R_2^{\sum}(f)| \le \frac{b-a}{2880} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty.$$

(iii) summierte Mittelpunktregel

$$I_0^{\sum}(f) = h\sum_{k=1}^{m-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right), \quad |R_0^{\sum}(f)| \le \frac{b-a}{24} h^2 \|f''\|_\infty.$$

Gauß-Quadraturformeln

Sei $w : (a, b) \to \mathbb{R}_+$ integrierbar.

Idee: Zu den Stützstellen

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$$

entwickle eine interpolatorische Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k), \quad a_k > 0, \quad x_k \in [a, b],$$

die exakt auf $\mathcal{P}_{2n+1}$ ist und so, dass

$$I_n(f) \to I(f) = \int_a^b f(x) w(x)\, dx, \quad n \to \infty, \quad f \in C[a, b].$$

Lemma: Zu den Stützstellen

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$$

gibt es keine interpolatorische Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k), \quad a_k \in \mathbb{R}, \quad x_k \in [a, b],$$

die exakt auf $\mathcal{P}_{2n+1}$ ist.

Satz: Eine interpolatorische Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k) \sim I(f) = \int_a^b f(x) w(x)\, dx.$$

ist exakt auf $\mathcal{P}_{2n+1}$ genau dann, wenn

$$\Big(\underbrace{\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)}_{= w_{n+1}(x)}, q \Big)_{L_2,w} = 0 \quad \text{für alle} \quad q \in \mathcal{P}_n.$$

Man nennt w_{n+1} das Orthogonalpolynom bzgl. $(\cdot,\cdot)_{L_2,w}$.

Bemerkung: Um das Orthogonalpolynom

$$w_{n+1} = x^{n+1} + r(x), \quad r \in \mathcal{P}_n,$$

zu konstruieren, konstruiere eine ONB $\{\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_n, w_{n+1}\}$ von $\mathcal{P}_{n+1}$. Die Nullstellen von w_{n+1} sind die Stützstellen der gesuchten Quadraturformel.

Satz: Sei $\{\phi_0, \ldots, \phi_n, w_{n+1}\}$ eine ONB von $\mathcal{P}_{n+1} \subset C[a, b]$, so sind die Nullstellen von w_{n+1} einfach und liegen in (a, b).

Beispiel:

Die Nullstellen $\lambda_0, \ldots, \lambda_n$ von dem Legendre–Polynom L_{n+1} werden analytisch bzw. (für $n > 3$) numerisch bestimmt:

$$n = 1: \quad L_2(x) = x^2 - \frac{1}{3} \quad \text{und} \quad x_{0,1} = \pm\sqrt{\frac{1}{3}},$$

$$n = 2: \quad L_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x \quad \text{und} \quad x_{0,2} = \pm\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0.$$

Beispiel: Gauß-Legendre-Quadraturformeln:

$$n = 1: \quad \int_{-1}^{1} f(x)\ dx \sim I_1(f) = f\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + f\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right),$$

$$n = 2: \quad I_2(f) = \frac{1}{9}\left(5 \cdot f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + 8 \cdot f(0) + 5 \cdot f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\right).$$

Satz: Falls $f \in C^{2n+2}[a,b]$ ist, gilt für die $(n+1)-$punktige Gauß-Quadraturformel die Fehlerdarstellung

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b w_{n+1}^2(x) w(x)\ dx, \xi \in (a,b).$$

Bemerkung: Seien $x_0, \ldots, x_n$ die Nullstellen von w_{n+1} und $\phi : [-1,1] \to [a,b]$ mit $\phi(x) = \frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}$. Dann gilt

$$\int_a^b f(y) w(y)\ dy = \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^{n} a_k f\left(\phi(x_k)\right) + \frac{b-a}{2} R_n(f(\phi)).$$

Beispiel: Die Stützstellen der Gauß-Tschebyscheff-Quadraturformel sind die Nullstellen

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\cdot\pi}{2n+2}\right), \quad k = 0, \ldots, n,$$

des Tschebyscheff–Polynoms T_{n+1}. Die Gewichte sind $a_k = \frac{\pi}{n+1}$, $k = 0, \ldots, n$.

Satz: Sei I_n die $(n+1)-$punktige Gauß-Quadraturformel zur Integration von

$$I(f) = \int_a^b f(x)w(x)\; dx.$$

Dann gilt

$$\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I(f), \quad f \in C[a, b].$$

Beispiel: Berechne näherungsweise

$$\int_1^2 \frac{1}{x}\,dx = \ln(2) = 0.693147\ldots$$

Anzahl m der Teilintervalle	1	2
Trapezregel	0.75	$0.708\overline{3}$
Simpson-Regel	$0.694\overline{4}$	0.693254
2-punitge Gauß-Quadratur	0.692308	0.693077
3-punitge Gauß-Quadratur	0.693122	0.693146

Bemerkung: Es werden auch die summierten Gauß-Quadraturformeln verwendet. Bei der numerischen Integrations werden auch Extrapolationstechniken verwendet, siehe Romberg-Quadratur.