14. VL Einführung in die Num. Math., 1.6.2009

4. Numerische Integration

Ziel ist die Berechnung des bestimmten Integrals

$$\int_a^b f(x)\,dx ,$$

wobei man aus unterschiedlichen Gründen nicht die Berechnung mittels einer Stammfunktion $F(x)$ durch

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a)$$

nutzen kann oder will. Entweder findet man kein auswertbares $F(x)$ wie im Fall von $f(x) = \frac{e^x}{x}$ oder $f(x) = e^{-x^2}$ oder die Berechnung von $F(b), F(a)$ ist zu mühselig.

Grundidee der numerischen Integration mit Newton-Cotes-Formeln:

- äquidistante Unterteilung von $[a,b]$

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

- Verwendung des Interpolationspolynoms $p_n \in \Pi_n$ für die Stützpunkte $(x_k, f(x_k))$, d.h. es ist $p_n(x_k) = f(x_k)$, $k = 0, \dots, n$, 2

- Näherung des Integrals $\int_a^b f(x)\,dx$ durch

$$\int_a^b p_n(x)\,dx \approx \int_a^b f(x)\,dx .$$

Mit dem Lagrangeschen Interpolationspolynom

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n f_k L_k(x) \quad , \quad f_k = f(x_k),$$

erhält man

$$\int_a^b p_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^n f_k \int_a^b L_k(x)\,dx$$

$$= \sum_{k=0}^n f_k \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^n \frac{x-x_j}{x_k-x_j}\,dx = (*) ,$$

und mit der Substitution $s = \frac{x-a}{h}$, $h\,ds = dx$ folgt

$$(*) = (b-a) \sum_{k=0}^n f_k \underbrace{\frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^n \frac{s-j}{k-j}\,ds}_{=:\,\sigma_k} ,$$

also $\int_a^b p_n(x)\,dx = (b-a)\sum_{k=0}^n f_k \sigma_k$ mit den (4.1.)

Gewichten

$$\sigma_k = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^n \frac{s-j}{k-j}\,ds \quad , k=0,\dots,n. \qquad (4.2)$$

Für $n=1$ erhält man

$$\sigma_0 = \int_0^1 \frac{s-1}{0-1}\,ds = -\frac{1}{2}(s-1)^2\Big|_0^1 = \frac{1}{2} , \quad \sigma_1 = \frac{1}{2} .$$

woraus mit

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p_1(x)\,dx = \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big) \tag{4.3}$$

die <u>Trapezregel</u> folgt.

Für $n=2$ ergibt sich

$$\sigma_0 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{s-1}{0-1}\cdot\frac{s-2}{0-2}\,ds = \frac{1}{4}\int_0^2 (s^2-3s+2)\,ds$$

$$= \frac{1}{4}\left[\frac{s^3}{3}-\frac{3s^2}{2}+2s\right]_0^2 = \frac{1}{4}\left[\frac{8}{3}-6+4\right] = \frac{1}{4}\left[\frac{8-6}{3}\right] = \frac{1}{6},$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{6}, \quad \sigma_1 = \frac{4}{6},$$

woraus mit

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right) \tag{4.4}$$

die <u>Simpson-Regel</u>, auch <u>Keplersche Fassregel</u> genannt, folgt.

Für $n=3$ findet man auf analoge Weise mit

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p_3(x)\,dx = \frac{b-a}{8}\left(f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)\right) \tag{4.5}$$

die Newtonsche $3/8$-Regel.

Definition 4.1

Die Näherungsformel

$$Q_n(x) = \int_a^b p_n(x)\,dx = (b-a)\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\,\sigma_k \tag{4.6}$$

zu den Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n$

für das Integral $\int_a^b f(x)\,dx$ nennt man interpolatorische Quadraturformel.

Gilt für die Stützstellen $x_k = a + kh$, $h = \frac{b-a}{n}$, $k = 0, \dots, n$, spricht man bei der Quadraturformel von einer abgeschlossenen Newton-Cotes-Quadraturformel.

Definition 4.2

Mit
$$E_n[f] = \underbrace{\int_a^b f(x)\,dx}_{=:I} - Q_n = I - Q_n \quad (4.7)$$
bezeichnet man den Fehler der Quadraturformel Q_n. Eine Quadraturformel hat den Genauigkeitsgrad $m \in \mathbb{N}$, wenn sie alle Polynome $p(x)$ bis zum Grad m exakt integriert, d.h. $E_n[p] = 0$ ist, und m die größtmögliche Zahl mit dieser Eigenschaft ist.

Es gilt offensichtlich der folgende

Satz 4.3

Zu den $n+1$ beliebig vorgegebenen paarweise verschiedenen Stützstellen $a \le x_0 < x_1 < \dots < x_n \le b$ existiert eine eindeutig bestimmte interpolatorische Quadraturformel, deren Genauigkeitsgrad mindestens gleich n ist.

Für die Simpsonregel findet man

$$E_2[x^3] = \int_a^b x^3 dx - \frac{b-a}{6}\left[a^3 + 4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3 + b^3\right]$$

$$= \frac{1}{4}(b^4 - a^4) - \frac{1}{6}(b-a)\left[a^3 + \frac{1}{2}(a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3) + b^3\right]$$

$$= 0$$

und

$$E_2[x^4] \neq 0.$$

Aufgrund der Additivität und Homogenität des Quadraturfehlers, d.h.

$$E_n[\alpha f + \beta g] = \alpha E_n[f] + \beta E_n[g],$$

ist die Simpsonregel für alle Polynome 3. Grades exakt, allerdings nicht mehr für Polynome 4. Grades. Damit hat sie den Genauigkeitsgrad 3 obwohl ihr nur ein Interpolationspolynom vom Grad 2 zugrunde liegt.
Generell findet man, dass die abgeschlossenen Newton-Cotes Quadraturformeln Q_n für gerades n den Genauigkeitsgrad $n+1$ haben.

Setzt man bei der zu integrierenden Funktion f die $(n+1)$- bzw. $(n+2)$-malige stetige Differenzierbarkeit voraus, dann gilt für Fehler der n-ten Newton-Cotes-Quadraturformeln

$$E_1[f] = -\frac{1}{12} h^3 f''(\eta), \quad h = b-a,$$

$$E_2[f] = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\eta), \quad h = \frac{b-a}{2},$$

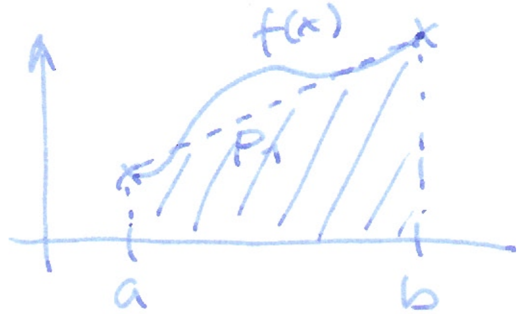
$$E_3[f] = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\eta), \quad h = \frac{b-a}{3},$$

$$E_4[f] = -\frac{8}{945} h^7 f^{(6)}(\eta), \quad h = \frac{b-a}{4},$$

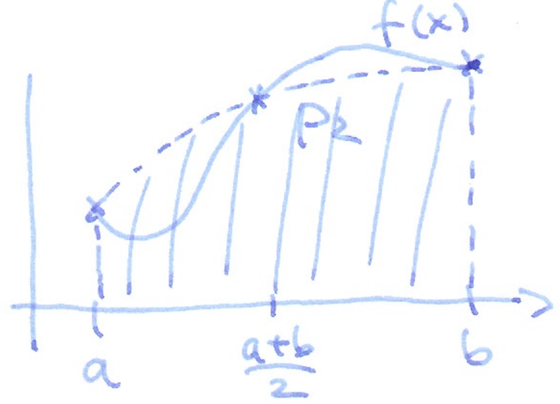
wobei $\eta \in [a,b]$ jeweils ein geeigneter Zwischenwert ist.

Summierte abgeschlossene Newton-Cotes-Quadraturformeln

Trapezregel (Q_1) und Simpsonregel (Q_2) bedeuten:



bzw.



,

also die Integration von p_1 bzw. p_2 zur näherungsweisen Berechnung von $I = \int_a^b f(x)\,dx$. Bei der Interpolation haben wir die Erfahrung gemacht, dass Polynome höheren Grades zu Oszillationen an den Intervallrändern neigen. Man stellt auch fest, dass ab $n=8$ negative Gewichte σ_k auftreten.

Um die Genauigkeit zu erhöhen, verzichtet man auf die Vergrößerung von n und wendet stattdessen z.B. die Trapez- oder Simpson-regel auf N Teilintervalle an.

Zur näherungsweisen Berechnung von $\int_\alpha^\beta f(x)dx$ unterteilt man das Intervall $[\alpha,\beta]$ durch

$$\alpha = x_{10} < \ldots < x_{1n} = x_{20} < \ldots < x_{N-1\,n} = x_{N0} < \ldots < x_{Nn} = \beta$$

in N gleich große Teilintervalle $[x_{j0}, x_{jn}]$ $(j=1,\ldots,N)$ mit jeweils $n+1$ Stützstellen.
Auf den Teilintervallen $[a,b] = [x_{j0}, x_{jn}]$ nähert man das Integral

$$\int_{x_{j0}}^{x_{jn}} f(x)\,dx \quad \text{mit} \quad Q_{n,j}$$

zu den Stützstellen $x_{j0},\ldots,x_{jn}$ an. Die Summation über j ergibt mit

$$S_{n,N} = \sum_{j=1}^{N} Q_{n,j}$$

die sogenannten summierten abgeschlossenen Newton-Cotes-Formeln.

Mit $y_{jk} = f(x_{jk})$ erhält man für $n=1$ die summierte Trapez-Regel $(h = \frac{b-a}{N})$

$$S_{1,N} = h\left[\tfrac{1}{2}y_{10} + y_{20} + y_{30} + \ldots + y_{N0} + \tfrac{1}{2}y_{N1}\right]$$
$$= h\left[\tfrac{1}{2}(y_{10} + y_{N1}) + \sum_{k=2}^{N} y_{k0}\right] \qquad (4.8)$$

und für $n=2$ die summierte Simpson-Regel

$$\left(h = \frac{b-a}{2N}\right)$$

$$S_{2,N} = \frac{h}{3}\left[(y_{10} + y_{N2}) + 2\sum_{j=1}^{N-1} y_{j2} + 4\sum_{j=1}^{N} y_{j1}\right]. \quad (4.9)$$

Für die Quadraturfehler summierter abgeschlossener Newton-Cotes-Formeln gilt der

Satz 4.4

Wenn $f(x)$ in $[\alpha, \beta]$ für gerades n eine stetige $(n+2)$-te Ableitung und für ungerades n eine stetige $(n+1)$-te Ableitung besitzt, dann existiert ein Zwischenwert $\xi \in]a,b[$, so dass die Beziehungen

$$E_{S_{n,N}}[f] = K h^{n+2} f^{(n+2)}(\xi)$$

für gerades n und

$$E_{S_{n,N}}[f] = L h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)$$

für ungerades n gelten, wobei K und L von α, β abhängige Konstanten sind, und $h = \frac{b-a}{nN}$ gilt.

Beweis und Erläuterungen

Plato, Bärwolff