Integration

Numerische Mathematik 1
WS 2011/12

Notation

Die Abbildung $I_a^b : \mathcal{C}([a,b]) \to \mathbb{R}$ gegeben durch

$$I_a^b(f) := \int_a^b f(x)dx,$$

beschreibt die Integration.

Um das Integral $I(f)$ zu approximieren betrachten wir sogenannte *Quadraturformeln* $Q_a^b : \mathcal{C}([a,b]) \to \mathbb{R}$ der Form

$$Q_a^b(f) := (b-a)\sum_{i=0}^{n} \sigma_i f(x_i),$$

wobei $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ und $\sigma_0, \ldots, \sigma_n \in [0,1]$.

Ansatz

Sei $f \in \mathcal{C}([a,b])$. Man wähle die äquidistanten Stützstellen

$$x_i := a + i \cdot \tfrac{b-a}{n},$$

für $i = 0, \ldots, n$. Es bezeichne $p \in \Pi_n$ das eindeutige Interpolationspolynom durch

$$(x_0, f(x_0)), \ldots, (x_n, f(x_n)).$$

Die Wahl

$$Q_a^b(f) := \int_a^b p(x)dx$$

führt auf die *Newton-Cotes Formeln*.

Beispiel

Für $n = 1$ hat man die Stützstellen $x_0 = a$ und $x_1 = b$. Wegen

$$\begin{array}{c|ccc} a & f(a) & & \\ & & \ddots & \\ b & f(b) & \cdots & \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \end{array} \qquad \text{(Newton-Schema)}$$

ist das eindeutige Interpolationspolynom $p \in \Pi_1$ gerade

$$p(x) =$$

Damit erhält man die Quadraturformel

$$Q_a^b(f) \; := \; \int_a^b p(x)dx$$

Beispiel

Für $n = 1$ hat man die Stützstellen $x_0 = a$ und $x_1 = b$. Wegen

$$\begin{array}{c|ccc} a & f(a) & & \\ & & \ddots & \\ b & f(b) & \cdots & \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \end{array} \qquad \text{(Newton-Schema)}$$

ist das eindeutige Interpolationspolynom $p \in \Pi_1$ gerade

$$p(x) = \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a) + f(a).$$

Damit erhält man die Quadraturformel

$$\begin{aligned} Q_a^b(f) &:= \int_a^b p(x)dx = \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \int_a^b (x-a)dx + (b-a)f(a) \\ &= \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \frac{(b-a)^2}{2} + (b-a)f(a) \\ &= (b-a)\left(\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2}\right), \end{aligned}$$

d.h. die Trapez-Regel.

Newton-Cotes-Formeln

Wählt man die äquidistanten Stützstellen

$$x_i := a + i \cdot \frac{b-a}{n},$$

für $i = 0, \ldots, n$, so sind die Newton-Cotes-Formeln

n	σ_i	$\left\lvert Q_a^b(f) - I_a^b(f) \right\rvert$	Regel
1	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	Trapez
2	$\frac{1}{6}\ \frac{4}{6}\ \frac{1}{6}$	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	Simpson
4	$\frac{7}{90}\ \frac{32}{90}\ \frac{12}{90}\ \frac{32}{90}\ \frac{7}{90}$	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	Milne
6	$\frac{41}{840}\ \frac{216}{840}\ \frac{27}{840}\ \frac{272}{840}\ \frac{27}{840}\ \frac{216}{840}\ \frac{41}{840}$	$h^9 \frac{9}{1400} f^{(8)}(\xi)$	Weddle

mit $h = (b - a)$ und der Quadraturformel

$$Q_a^b(f) := (b - a) \sum_{i=0}^{n} \sigma_i f(x_i),$$

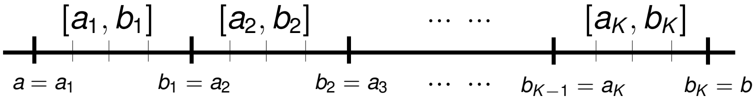
exakt für alle Polynome $p \in \Pi_n$ vom Grad $\leq n$.

Summierte Newton-Cotes-Formeln

Um die Genauigkeit zu erhöhen kann man das Interval $[a, b]$ in K-Teilintervalle der Länge

$$h := (b - a)/K$$

unterteilen



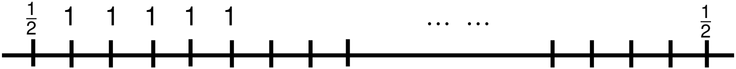
und dann auf jedem Teilinterval $[a_i, b_i]$ eine Newton-Cotes Formel (im Bild in $n = 4$ gewählt) anwenden.

Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen:

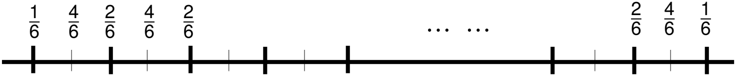
$$n \cdot K + 1$$

Beispiele

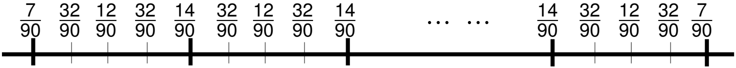
Summierte Trapez–Regel



Summierte Simpson–Regel



Summierte Milne–Regel



Fehlerabschätzung

Ist also $f \in \mathcal{C}^6([a,b])$ und damit

$$M := \frac{8}{945} \max_{x \in [a,b]} \left| f^{(6)}(x) \right| \in [0, \infty),$$

dann gilt (mit $h = \frac{b-a}{K}$, wie oben) z.B. für die Milne-Regel

$$\begin{aligned} \left| I_a^b(f) - Q_a^b(f) \right| &\le \sum_{i=1}^{K} \left| I_{a_i}^{b_i}(f) - Q_{a_i}^{b_i}(f) \right| \\ &= \sum_{i=1}^{K} h^7 \frac{8}{945} \left| f^{(6)}(\xi_i) \right| \le M \sum_{i=1}^{K} h^7 \\ &= M \cdot K \cdot \frac{(b-a)^7}{K^7} = M(b-a)^6 \frac{1}{K^6}. \end{aligned}$$

Erreichbar Genauigkeit

Für $n = 4$ (d.h. Milne-Regel) erreicht man also (theoretisch) eine(n) Genauigkeit/Fehler von

$$E := M(b-a)^6 \frac{1}{K^6}$$

mit Hilfe von

$$F := n \cdot K + 1 = 4 \cdot K + 1$$

Funktionsauswertungen.

Erreichbar Genauigkeit

Für $n = 4$ (d.h. Milne-Regel) erreicht man also (theoretisch) eine(n) Genauigkeit/Fehler von

$$E := M(b-a)^6 \frac{1}{K^6}$$

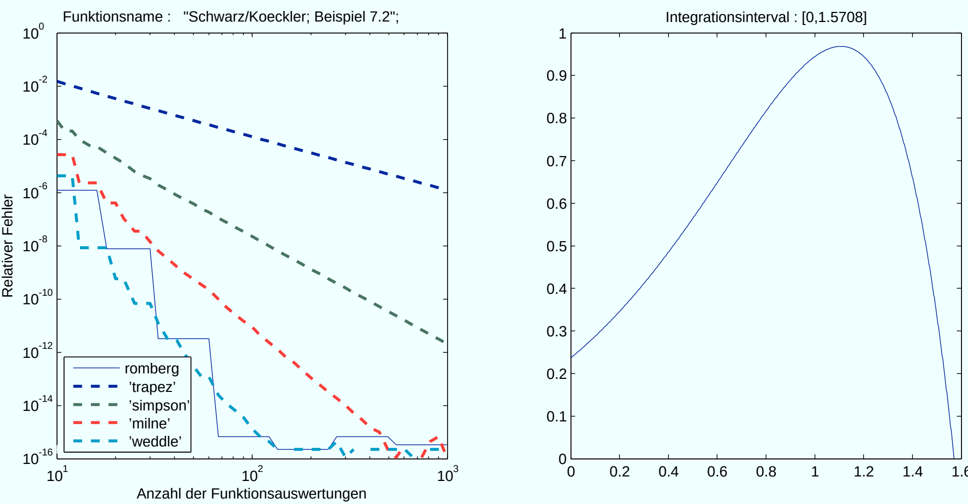
mit Hilfe von

$$F := n \cdot K + 1 = 4 \cdot K + 1$$

Funktionsauswertungen.

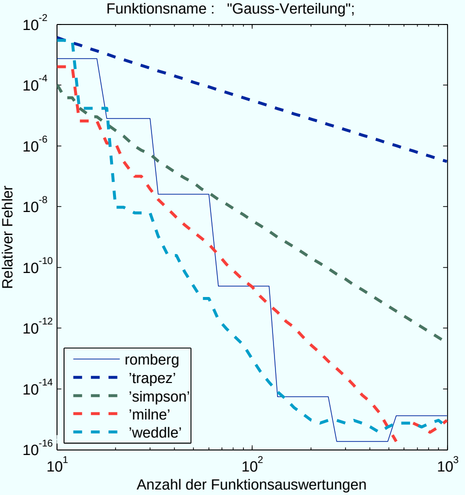
$$\begin{aligned}
\Rightarrow K &= \frac{F-1}{4} \\
\Rightarrow E(F) &= M(b-a)^6 \frac{1}{K^6} \\
&= \underbrace{M(b-a)^6 4^6}_{=:C} \left(\frac{1}{F-1}\right)^6 \\
&= C(F-1)^{-6} \approx CF^{-6}
\end{aligned}$$

Beispiel

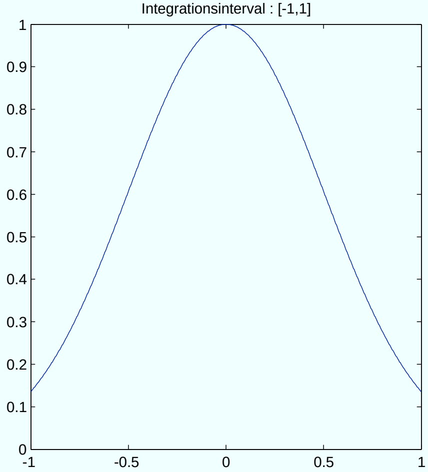


Die Kurve für Milne (- -) ist etwa: $C \cdot F^{-6.24}$

Beispiel

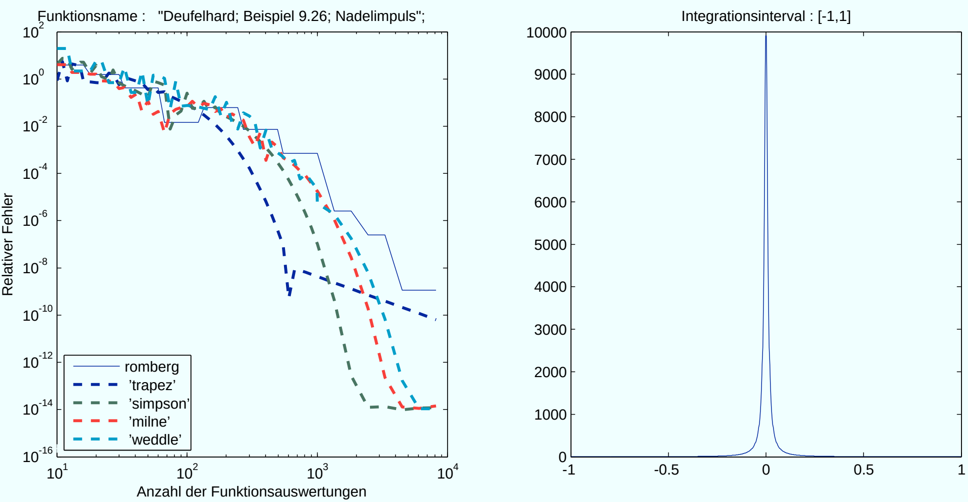


Funktionsname :   "Gauss-Verteilung";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'



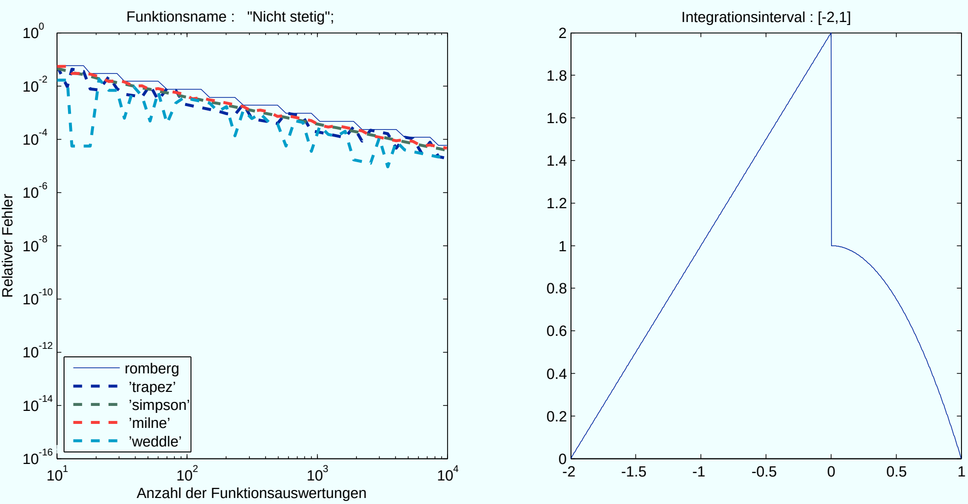
Integrationsinterval : [-1,1]

Beispiel

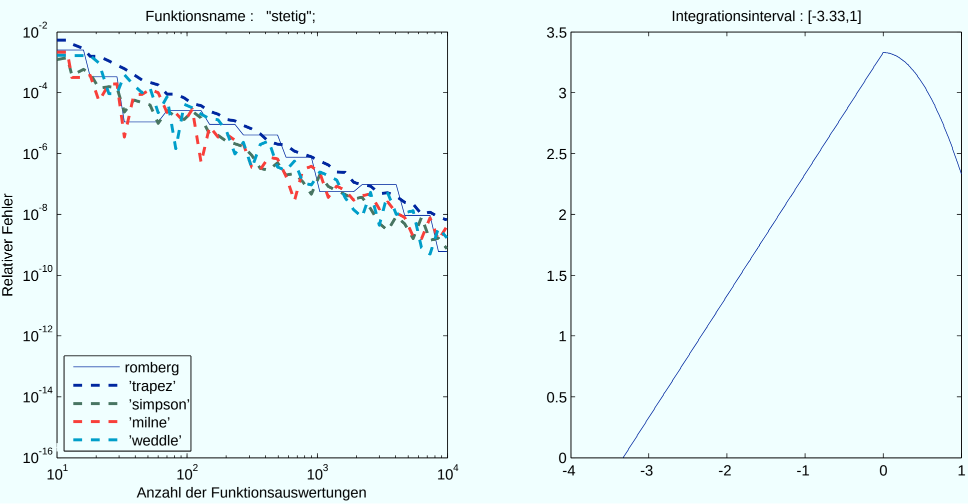


Funktionsname : "Deufelhard; Beispiel 9.26; Nadelimpuls";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'
Integrationsinterval : [-1,1]

Beispiel

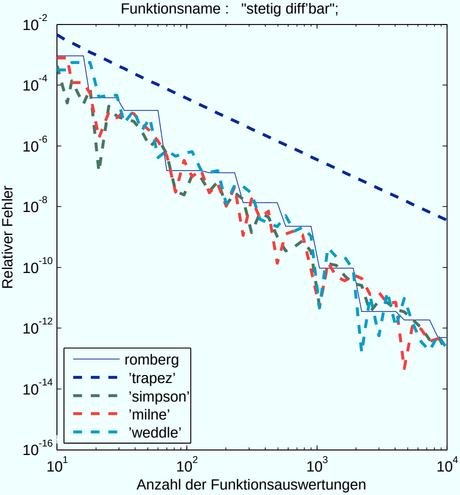

Funktionsname : "Nicht stetig";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'
Integrationsinterval : [-2,1]

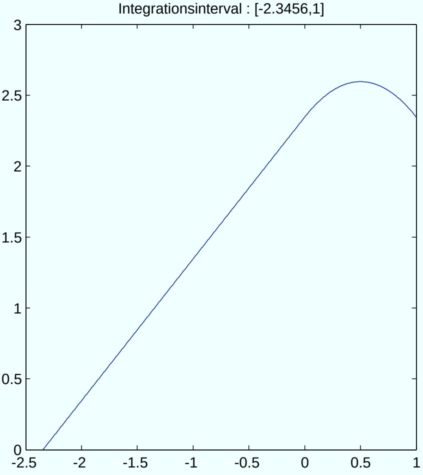
Beispiel



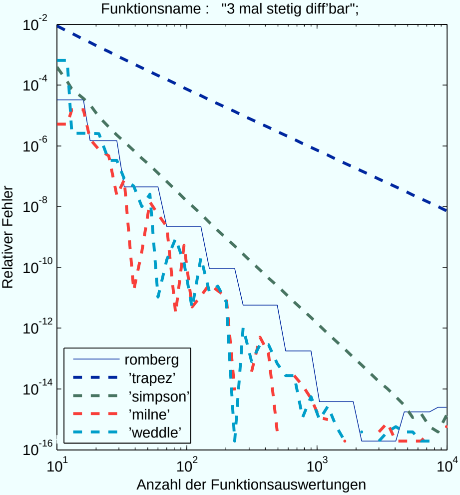
Funktionsname : "stetig";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'
Integrationsinterval : [-3.33,1]

Beispiel

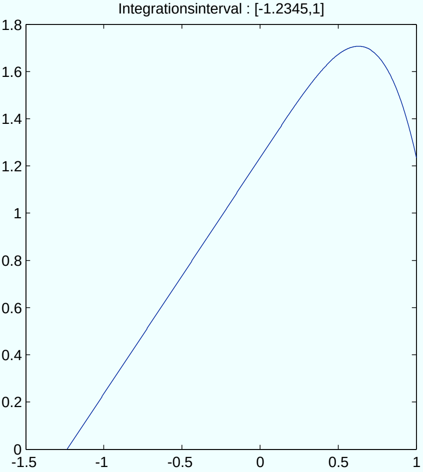

Funktionsname : "stetig diff'bar";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'


Integrationsinterval : [-2.3456,1]

Beispiel



Funktionsname : "3 mal stetig diff'bar";
Relativer Fehler
Anzahl der Funktionsauswertungen
romberg
'trapez'
'simpson'
'milne'
'weddle'



Integrationsinterval : [-1.2345,1]

Summierte Trapez-Regel

Wenden man eine Newton-Cotes Formel auf n-Teilintervalle an, so hat jedes Teilinterval die Länge

$$h := \frac{b-a}{n}.$$

Die summierte Trapez-Regel auf n-Teilintervallen ist dann

$$\mathcal{T}_f(h) := h\left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2}\right),$$

wobei

$$x_i = a + i \cdot h,$$

für $i = 0, \ldots, n$.

Euler-Maclaurinsche Summenformel

Theorem

Sei $f \in \mathcal{C}^{2m+2}([a,b])$, $m \geq 0$. Dann hat die summierte Trapez-Regel die Darstellung

$$\mathcal{T}_f(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m} + \mathcal{O}(h^{2m+2}),$$

für $h \to 0$, wobei

$$\tau_0 = \int_a^b f(x)dx$$

und $\tau_1, \ldots, \tau_m \in \mathbb{R}$.

Man will also eigentlich $\mathcal{T}_f(0)$ bestimmen.

Man kann aber nur $\mathcal{T}_f(h_j)$ für eine endliche Anzahl h_j, $j = 0, \ldots, k$ bestimmen.

Polynom in h^2

$$\mathcal{T}_f(h) \approx \tau_0 + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m}$$

Polynom in h^2

$$\mathcal{T}_f(h) \approx \tau_0 + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m}$$

Da $h \geq 0$ kann man die Funktion

$$\mathcal{P}_f(x) := \tau_0 + \tau_1 x + \ldots + \tau_m x^m$$

definieren, welche ein Polynom in x ist. Dann hat man

$$\mathcal{P}_f(h^2) \approx \mathcal{T}_f(h).$$

Polynom in h^2

$$\mathcal{T}_f(h) \approx \tau_0 + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m}$$

Da $h \geq 0$ kann man die Funktion

$$\mathcal{P}_f(x) := \tau_0 + \tau_1 x + \ldots + \tau_m x^m$$

definieren, welche ein Polynom in x ist. Dann hat man

$$\mathcal{P}_f(h^2) \approx \mathcal{T}_f(h).$$

Seien $0 < x_i$, $i = 0, \ldots, m$ paarweise verschiedene Stützstellen. Dann ist das Polynom $\mathcal{P}_f \in \Pi_m$ durch die $m + 1$ Stützpunkte

$$(x_0, \mathcal{P}_f(x_0)), \ldots, (x_m, \mathcal{P}_f(x_m)),$$

eindeutig bestimmt.

Grundidee

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}_f(x) &:= \tau_0 + \tau_1 x + \ldots + \tau_m x^m \\
\mathcal{P}_f(h^2) = \mathcal{T}_f(h) &\approx \tau_0 + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_m h^{2m}
\end{aligned}
$$

$\mathcal{P}_f \in \Pi_m$ ist eindeutig bestimmt durch

$$(x_0, \mathcal{P}_f(x_0)), \ldots, (x_m, \mathcal{P}_f(x_m)).$$

Man kann $\mathcal{T}_f$ aber nur an Stellen der Form

$$h_i := \tfrac{b-a}{n_i},$$

wobei $n_i \in \mathbb{N}$, auswerten. Man setzt also $x_i := h_i^2$ und erhält, dass $\mathcal{P}_f \in \Pi_m$ eindeutig bestimmt ist durch

$$
\begin{aligned}
& \{(x_0, \mathcal{P}_f(x_0)), \ldots, (x_m, \mathcal{P}_f(x_m))\} \\
= & \left\{(h_0^2, \mathcal{P}_f(h_0^2)), \ldots, (h_m^2, \mathcal{P}_f(h_m^2))\right\} \\
= & \left\{(h_0^2, \mathcal{T}_f(h_0)), \ldots, (h_m^2, \mathcal{T}_f(h_m))\right\}
\end{aligned}
$$

Grundidee

Man berechnet also für

$$h_i := \tfrac{b-a}{n_i},$$

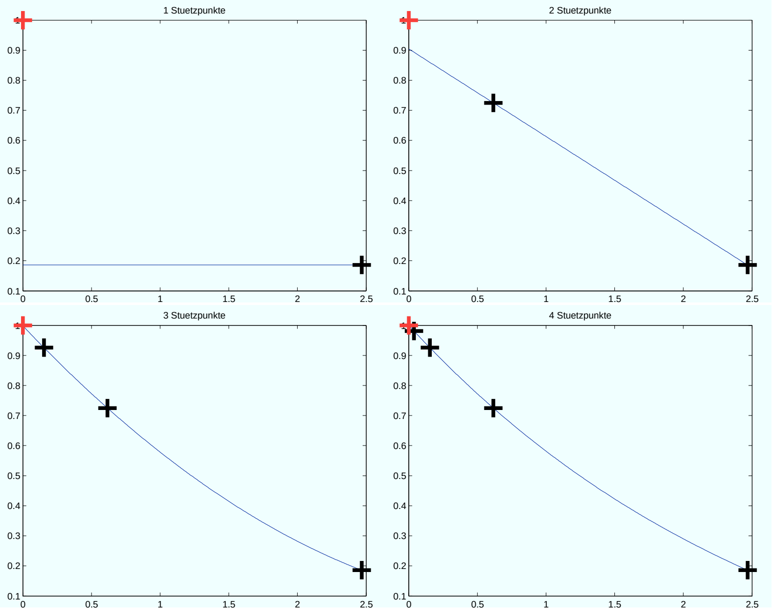
mit $n_i \in \mathbb{N}$, die Werte von $\mathcal{T}_f(h_i)$. Dann erfüllt das Interpolationspolynom $\mathcal{P}_f \in \Pi_m$ zu den Stützstellen

$$(h_0^2, \mathcal{T}_f(h_0)), \ldots, (h_m^2, \mathcal{T}_f(h_m)),$$

die Bedingung

$$\int_a^b f(x)dx = \tau_0 = \mathcal{T}_f(0) = \mathcal{T}_f(0^2) = \mathcal{P}_f(0).$$

Schwarz/Köckler, Beispiel 7.2



Bemerkung

Da man den Wert des Interpolationspolynoms nur an einer Stelle

$$\mathcal{P}_f(0)$$

auswerten muss, kann man das Schema von Neville-Aitken benutzen.

Romberg-Integration

Es sei $f \in \mathcal{C}([a,b])$ gegeben, $n_0 < n_1 < n_2 < \ldots$ eine Folge von natürlichen Zahlen (am einfachsten ist $n_i := 2^i$) und eine maximale Anzahl von erlaubten Funktionsauswertungen `max_evals`. Es bezeichne $h_i := \frac{b-a}{n_i}$.

Für $m = 0, 1, 2, \ldots$

1. Berechne $\mathcal{T}_f(h_m)$. Breche die Schleife dabei ab, falls insgesamt mehr als `max_evals` Funktionsauswertungen gebraucht worden sind.
2. Berechne mit dem Schema von Neville-Aitken

$$\mathtt{INT} := \mathcal{P}_f(0),$$

   wobei $\mathcal{P}_f \in \Pi_m$ das eindeutige Interpolationspolynom durch

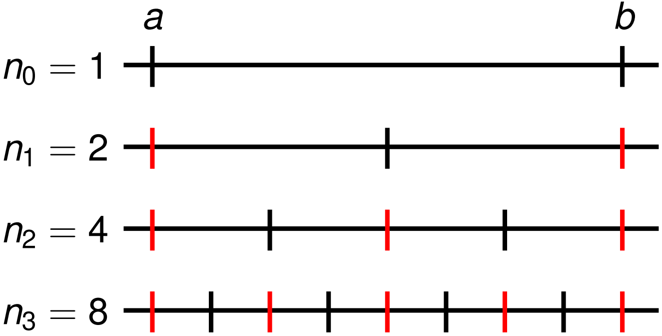
$$(h_0^2, \mathcal{T}_f(h_0)), \ldots, (h_m^2, \mathcal{T}_f(h_m))$$

   ist.

`INT` ist dann die Approximation an $\int_a^b f(x)dx$.

Profiling

Wählt man in der Romberg-Integration die Folge $n_i = 2^i$ so muss man die Funktion $f \in \mathcal{C}([a, b])$ an den folgenden Stellen auswerten:



Den Funktionswerte an den roten Stellen kennt man also schon aus dem letzten Schritt.

(Eigentlich braucht man sogar nur die (gewichtete) Summe der Funktionswerte)