

Kap.5 Numerische Integration

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

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

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, \dots, x_n und den Gewichten a_0, \dots, a_n . Die Differenz

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

bezeichnet man als den Quadraturfehler. Gilt

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

so heißt I_n von der Ordnung m , oder exakt auf \mathcal{P}_m .

5.2 Beispiele:

5.3 Interpolatorische Quadraturformeln

5.3.1 Definition: Eine $(n + 1)$ -punktige Quadraturformel

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

heißt interpolatorisch, wenn I_n von Ordnung n ist.

5.3.2 Satz: Zu beliebig vorgegebenen Knoten

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

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

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

Beweis:

5.3.3 Bemerkung:

(i) Für interpolatorische Quadraturformeln gilt

$$R_n(f) = I(f) - I_n(f) = \int_a^b f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx.$$

(ii) Für den Spezialfall äquidistanter Knoten

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

heißen die im Satz 5.3.2 konstruierten Quadraturformeln Newton–Cotes–Formeln. Der Ausdruck für die Gewichte a_k vereinfacht sich durch Substitution $x \mapsto t = \frac{x-a}{h}$ zu

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

♣ 5.3.4 Beispiele (Newton–Cotes–Formeln):

(i) Trapezregel

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)), \quad R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi).$$

(ii) Simpson–Regel

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

(iii) $\frac{3}{8}$ –Regel

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

$$R_3(f) = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi).$$

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

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

erwartet werden, da die Polynominterpolation schlecht konditioniert ist. 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.

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

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

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

♣ 5.3.6 Beispiele:

(i) summierte Trapezregel

$$I_1^\Sigma(f) = \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \cdot \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right), \quad R_1^\Sigma(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi).$$

(ii) summierte Simpson-Regel

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

$$R_2^\Sigma(f) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi).$$

(iii) summierte Mittelpunktregel

$$I_0^\Sigma(f) = h \sum_{k=1}^{n-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right), \quad R_0^\Sigma(f) = \frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi).$$

5.3.7 Beispiel:

5.4 Gauß–Quadraturformeln

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

Idee: Zu den Knoten

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

entwickle eine interpolatorische Quadraturformel

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

von der Ordnung $2n + 1$, so dass

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

5.4.1 Lemma: Zu den Knoten

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

gibt es keine interpolatorische Quadraturformel

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

von der Ordnung $2n + 2$.

Beweis:

Skalarprodukt:

$$(f, g)_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x) dx, \quad f, g \in C[a, b].$$

5.4.2 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 genau dann von der Ordnung $2n + 1$, wenn

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

Man nennt w_{n+1} auch das Orthogonalpolynom bzgl. $(\cdot, \cdot)_w$.

Beweis:

5.4.3 **Bemerkung:** Der Satz 5.4.2 besagt, dass

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

orthogonal zu \mathcal{P}_n ist. Um so ein w_{n+1} zu bestimmen, benutze den Satz 4.7.2.11 (3–Term–Rekursion) und konstruiere eine ONB $\{p_0, p_1, \dots, p_{n+1}\}$ von \mathcal{P}_{n+1} . Nach der Konstruktion gilt

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

also setze $w_{n+1} := p_{n+1}$. Die Nullstellen von p_{n+1} sind die Knoten der gesuchten Quadraturformel von der Ordnung $2n + 1$.

5.4.4 **Beispiel:**

5.4.5 Satz: Ist $p \in \mathcal{P}_{n+1} \subset C[a, b]$ ein Orthogonalpolynom $(n+1)$ -ten Grades bzgl. $(\cdot, \cdot)_w$, so sind seine Nullstellen einfach und liegen in (a, b) .

Beweis:

5.4.6 Beispiel:

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

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

$$n = 2: \quad L_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x \quad \text{und} \quad \lambda_{0,2} = \pm \sqrt{\frac{3}{5}}, \quad \lambda_1 = 0.$$

5.4.7 Satz: Es existieren eindeutig bestimmte Knoten

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

und die Gewichte a_k , so dass die Quadraturformel

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

von der Ordnung $2n + 1$ ist. Die Knoten x_k sind die Nullstellen des Orthogonalpolynoms vom Grad $n + 1$ bzgl. des Skalarproduktes $(\cdot, \cdot)_w$ und die Gewichte erfüllen

$$0 < a_k = \int_a^b \left(L_k^{(n)}(x) \right)^2 w(x) dx, \quad k = 0, \dots, n.$$

Beweis: siehe Satz 5.2.2.

♣ 5.4.8 Beispiel: Gauß–Legendre–Quadraturformeln:

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

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

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

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

Beweis:

5.4.10 Bemerkung: Seien $\lambda_0, \dots, \lambda_n$ die Nullstellen von w_{n+1} und $\phi : [-1, 1] \rightarrow [a, b]$ mit

$$\phi(x) = \frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}.$$

Dann gilt

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

5.4.11 Beispiel:

5.4.11 Beispiel: Die Knoten der Gauß–Tschebyscheff–Quadraturformel sind die Nullstellen

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

des Tschebyscheff–Polynoms T_{n+1} . Die Gewichte sind $a_k = \frac{\pi}{n+1}$, $k = 0, \dots, n$. Für ein $f \in C^{2n+2}[-1, 1]$ gilt

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x)w(x) dx = \frac{\pi}{n+1} \sum_{k=0}^n f(x_k) + \frac{\pi \cdot f^{2n+1}(\xi)}{2^{2n+1}(2n+2)!}, \quad \clubsuit$$

wobei $\xi \in (-1, 1)$.

$$n = 2 : I(f) = \frac{\pi}{3} \left(f \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \right) + f(0) + f \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right) + \frac{\pi \cdot f^{(6)}(\xi)}{23040}.$$

5.4.12 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

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

Beweis:

♣ 5.4.13 Definition: Seien

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

Die summierten Gauß–Legendre–Quadraturformeln für $n = 1, 2$ sind gegeben durch

$$I_1^\Sigma(f) = \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{m-1} (f(x_k + h') + f(x_k + h'')), \quad h', h'' = \frac{(\sqrt{3} \mp 1) \cdot h}{2\sqrt{3}},$$

und

$$I_2^\Sigma(f) = \frac{h}{18} \sum_{k=0}^{m-1} \left(5 \cdot f(x_k + h') + 8 \cdot f(x_k + \frac{h}{2}) + 5 \cdot f(x_k + h'') \right)$$

$$\text{mit } h' = \frac{(\sqrt{5} - \sqrt{3}) \cdot h}{2\sqrt{5}}, \quad h'' = \frac{(\sqrt{5} + \sqrt{3}) \cdot h}{2\sqrt{5}}$$

5.5 Extrapolation und Romberg-Quadraturformeln

Ziel: Seien $f \in C[a, b]$,

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

und die summierte Trapezregel

$$a_f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad a_f(h) = \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \cdot \sum_{k=1}^{m-1} f(x_k) + f(b) \right).$$

Untersuche das asymptotische Verhalten von $a_f(h)$ für $h \rightarrow 0$.

5.5.1 Satz: Sei $f \in C^{2p+2}[a, b]$. Der Quadraturfehler der summierten Trapezregel $a_f(h)$ besitzt die asymptotische Entwicklung

$$a_f(h) - I(f) = \sum_{j=1}^p a_j \cdot h^{2j} + (a_{p+1} + o(1)) h^{2(p+1)}, \quad h \rightarrow 0,$$

nach geraden Potenzen von h .

Beweis: siehe Satz 5.3.1.

5.5.2 Bemerkung: Bei exakter Rechnung gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} a_f(h) = \int_a^b f(x) dx.$$

Also man kann den Extrapolationsprinzip 4.4.1 zur näherungsweise Berechnung von $I(f)$ benutzen.

5.5.3 Romberg–Algorithmus :

1.Schritt: Für die Romberg–Folge

$$(h_k)_{k \in \mathbb{N}_0} = \left(\frac{h}{2^k} \right)_{k \in \mathbb{N}_0}, \quad h \in \mathbb{R}_+,$$

berechne $a_f(h_k)$, $k = 0, \dots, n$.

2.Schritt: Werte das Interpolationspolynom $p_{0,n}$ in h^2 zu den Stützpunkten

$$(h_j^2, a_f(h_j)), \quad j = 0, \dots, n,$$

an der Stelle $h = 0$ nach dem Neville–Aitken–Algorithmus aus.

5.5.4 Bemerkung: Die Romberg–Folge erlaubt die Wiederverwendbarkeit von Funktionswerten, führt aber zu rasch anwachsender Stützstellenzahl.

5.5.5 Beispiel: Romberg-Quadraturformel zu der Teilfolge $h_0 = h$, $h_1 = \frac{h}{2}$ ist

$$\int_a^b f(x) dx \sim \frac{4}{3} a_f \left(\frac{h}{2} \right) - \frac{1}{3} \cdot a_f(h).$$

5.5.6 Satz: Sei $f \in C^{2p+2}[a, b]$. Für den für die Romberg-Teilfolge $(h_k)_{k=0, \dots, n}$ berechneten extrapolierten Wert $p_{0,n}$ gilt

$$a_f(0) - p_{0,n} = O(h^{2p+2}), \quad n \rightarrow \infty.$$

Beweis: siehe Satz 4.4.1.