10. Numerische Integration

Lernziele

- Sie verstehen die Herleitung von Integrationsformeln basierend auf Polynominterpolation.
- Sie kennen die Bedeutung der Ordnung eines Integrationsverfahrens.
- Sie erkennen die Vorteile von zusammengesetzten Integrationsformeln gegenüber einfachen Integrationsformeln.
- Sie verstehen den Zusammenhang zwischen der Wahl der Knoten und der Genauigkeit bzw. Effizienz der Verfahren.

Literatur:

- Quarteroni A.: Wissenschaftliches Rechnen mit MATLAB, Kap. 4.2
- Chapra S. C.: Applied Numerical Methods with Matlab, Chap. 19.1 - 19.5 + 20.3 - 20.4

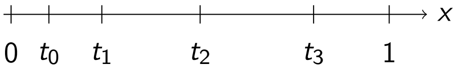
10.1 Einführung

Ansatz für numerische Integration (Quadratur) auf dem Intervall [0, 1]

$$\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx \sum_{j=0}^{k} \alpha_j f(t_j)$$

t_j Knoten

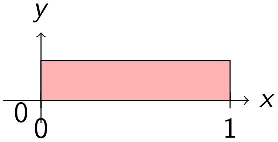
α_j Gewichte



Rechteck-Regel

Beispiel: $\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx f\left(\frac{1}{2}\right)$

$k = 0,\ t_0 = \frac{1}{2},\ \alpha_0 = 1$



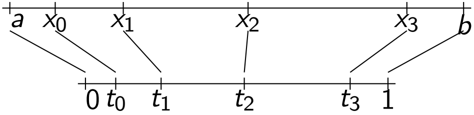
Ansatz auf beliebigem Interval $[a, b]$

$t \in [0,1]$, $x \in [a,b]$

Ersetze $x = a + \overbrace{(b-a)}^{\text{Länge des Intervalls}}t \Rightarrow \mathrm{d}x = (b-a)\mathrm{d}t$ $\left(\frac{dx}{dt} = b-a\right)$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 f(a+(b-a)t)\cdot (b-a)\,dt$$

$$\approx (b-a) \sum_{j=0}^{k} \alpha_j f\big(\underbrace{a+(b-a)t_j}_{x_j}\big)$$



Ansatz auf $[a, b]$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{j=0}^{k} \alpha_j f(x_j)$$

- Es genügt Formeln auf dem Intervall $[0,1]$ aufzustellen.
- Konvention: t auf Intervall $[0,1]$, x auf Intervall $[a, b]$

Frage: Wie sind die

- Gewichte und
- Knoten

zu wählen, um möglichst genaue und effiziente Verfahren zu erhalten?

10.2 Newton-Cotes Regeln

Herleitung

1. Wähle $k+1$ Knoten auf $[0,1]$ $(0 \leq t_0 < t_1 < \cdots < \cdots < t_k \leq 1)$
2. Finde das Interpolationspolynom $p_k(t)$ vom Grad k durch $(t_0, f(t_0)), \ldots, (t_k, f(t_k))$.
3. Das Integral des Interpolationspolynoms p_k dient als Approximation für das Integral der Funktion:

$$\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx \int_0^1 p_k(t)\,\mathrm{d}t = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j f(t_j).$$

Das Interpolationspolynonm muss nicht explizit aufgestellt werden, sondern dient nur vorab der Bestimmung der Gewichte α_j

Ansatz von Lagrange für $p_k(t) = \sum_{j=0}^{k} f(t_j) \cdot L_j(t)$

$$\Rightarrow \int_0^1 p_k(t)\,dt = \int_0^1 \sum_{j=0}^{k} f(t_j)\cdot L_j(t)\,dt =$$

$$= \sum_{j=0}^{k} \int_0^1 f(t_j)\cdot L_j(t)\,dt = \sum_{j=0}^{k} f(t_j)\cdot \underbrace{\int_0^1 L_j(t)\,dt}_{=\alpha_j}$$

Für Trapez-Regel: $k=1$ (2 Stützpunkte)

$(0, f(0))$, $(1, f(1))$ $\Rightarrow$ $p_1(t) = f(0)\cdot L_0(t) + f(1)\cdot L_1(t)$

$L_0(t) = \dfrac{t-1}{0-1} = 1-t$, $L_1(t) = \dfrac{t-0}{1-0} = t$

$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha_0 = \int_0^1 L_0(t)\,dt = \int_0^1 1-t\,dt = \left[t-\frac{1}{2}t^2\right]_0^1 = \frac{1}{2} \\ \alpha_1 = \int_0^1 L_1(t)\,dt = \left[\frac{1}{2}t^2\right]_0^1 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Trapezregel

- Lineare Interpolation zwischen $t_0 = 0$ und $t_1 = 1$ ($k = 1$):

$$p_1(t) = f(0) + (f(1) - f(0))t = f(0)\,(1-t)$$
$$f(1) \cdot t$$

-

$$\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx \int_0^1 p_1(t)\,\mathrm{d}t = \alpha_0 \cdot f(0) + \alpha_1 f(1)$$
$$= \frac{1}{2}\left(f(0) + f(1)\right)$$

- $\alpha_0 = \frac{1}{2}$, $\alpha_1 = \frac{1}{2}$.   Herleitung s. oben

Transformation von

$$\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx \frac{1}{2}\,(f(0) + f(1))$$

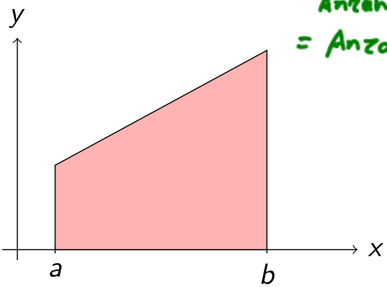
auf beliebiges Interval $[a, b]$:

Trapezregel

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{(b-a)}{2}(f(a) + f(b)) =: T_1.$$

Anzahl der Intervalle

Anzahl der Knoten
= Anzahl der Intervalle + 1



Beispiele:

$T_1 = \frac{1}{2}\left(f(0) + f(1)\right)$

- Berechnen Sie mit der Trapezregel näherungsweise $\int\limits_0^1 e^t \,\mathrm{d}t$.

  (exakter Wert: $e - 1$) ≈ 1.7183

$$\int_0^1 e^t \, dt \approx \frac{1}{2}\left(e^0 + e^1\right) \approx 1.86 \implies$$ rel. Fehler 8.14 %

$T_1 = \frac{(b-a)}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$

- Berechnen Sie mit der Trapezregel näherungsweise $\int\limits_{-2}^{3} e^x \,\mathrm{d}x$.

  (exakter Wert: $e^3 - e^{-2}$) ≈ 19.95

$$T_1 = \frac{5}{2}\left(e^{-2} + e^3\right) \approx 50.55 \implies$$ rel. Fehler 153.4 %

Newton-Cotes Regeln

Newton-Cotes Regeln

Basierend auf äquidistanten Knoten $t_j = \frac{j}{k}$

k	α_i					Methode	Ordnung p
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				Trapez	2
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$			Simpson	4
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		$\frac{3}{8}$-Rule	4
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$	Milne	6

$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j = 1$

Ordnung größer als $k+1$

Integrationsregeln mit positiven Gewichten sind stabil.
Die Newton-Cotes-Regeln für $k \leq 7$ und $k = 9$ haben positive Gewichte.

Herleitung der Gewichte für Simpson-Regel:

3 Knotenpunkte $(0, f(0))$, $(0.5, f(0.5))$, $(1, f(1))$

$$p_2(t) = f(0) \cdot L_0(t) + f(0.5) \cdot L_1(t) + f(1) \cdot L_2(t)$$

$$L_0(t) = \frac{(t-0.5)(t-1)}{(0-0.5)\cdot(0-1)} = 2\left(t^2 - \frac{3}{2}t + \frac{1}{2}\right)$$

$$= 2t^2 - 3t + 1$$

$$\alpha_0 = \int_0^1 L_0(t)\,dt = \left[\frac{2}{3}t^3 - \frac{3}{2}t^2 + t\right]_0^1 = \frac{2}{3} - \frac{3}{2} + 1 = \frac{1}{6}$$

$$L_1(t) = \frac{(t-0)(t-1)}{(0.5-0)(0.5-1)} = -4\left(t^2 - t\right) = 4t - 4t^2$$

$$\alpha_1 = \int_0^1 L_1(t)\,dt = \left[2t^2 - \frac{4}{3}t^3\right]_0^1 = \frac{4}{6}$$

$$L_2(t) = \frac{(t-0)(t-0.5)}{(1-0)(1-0.5)} = 2\left(t^2 - \frac{1}{2}t\right) = 2t^2 - t$$

$$\alpha_2 = \int_0^1 L_2(t)\,dt = \left[\frac{2}{3}t^3 - \frac{1}{2}t^2\right]_0^1 = \frac{1}{6}$$

Beispiele:

$$S_1 = \frac{1}{6}\left(f(0) + 4\cdot f(0.5) + f(1)\right)$$

- Berechnen Sie mit der Simpson-Regel näherungsweise $\int\limits_0^1 e^t \,\mathrm{d}t$.

$$S_1 = \frac{b-a}{2}\cdot\frac{1}{3}\left(f(0) + 4\cdot f(0.5) + f(1)\right)$$

$$S_1 \approx 1.71886$$

$$\frac{1}{6}\left(1 + 4\cdot e^{0.5} + e\right)$$

rel. Fehler $\approx 0.03\,\%$

$$S_1 = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

- Berechnen Sie mit der Simpson-Regel näherungsweise $\int\limits_{-2}^3 e^x \,\mathrm{d}x$.

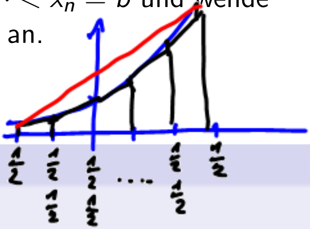
$$S_1 = \frac{5}{6}\left(e^{-2} + 4\cdot e^{0.5} + e^3\right) \approx 22.35$$

rel. Fehler $\approx 12\,\%$

- Berechnen Sie näherungsweise $\int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} \sin x \, \mathrm{d}x$ mit der Trapezregel und Simpson-Regel.

Summenformeln

Alternative zu Methode mit höherem Polynomgrad (gleichbedeutend mit mehr Knoten):
Zerlege $[a, b]$ in n Teilintervalle: $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ und wende einfachere Integrationsregel auf jedes Teilintervall an.



Summenformel T_n für Trapezregel

Für Teilintervalle mit gleicher Länge $h = \frac{b-a}{n}$:

$$T_n = h\left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2}\right)$$

Beispiel:

- Berechnen Sie $\int_{-2}^{3} e^x \, \mathrm{d}x$ näherungsweise durch T_2 bzw. T_4.

$n=2$: $T_2 = \frac{5}{2}\left(\frac{1}{2}e^{-2} + e^{0.5} + \frac{1}{2}e^{3}\right) \approx 29.4$

absoluter Fehler: 9.45

$n=4$: $T_4 = \underbrace{\frac{5}{4}}_{1.25}\left(\frac{1}{2}e^{-2} + e^{-0.75} + e^{0.5} + e^{1.75} + \frac{1}{2}e^{3}\right) \approx 22.48$

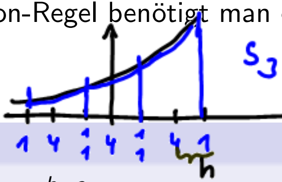
S. Folie 19 (Halbierung von h reduziert Fehler um Faktor $\frac{1}{4}$)

absoluter Fehler: $2.53 \approx \frac{1}{4} \cdot 9.45$

$n = 4$

Summenfomeln

Beachte: Für die Anwendung der Simpson-Regel benötigt man eine gerade Anzahl von Teilintervallen!
(2n)



Summenformeln S_n für Simpson-Regel

Für $2n$ Teilintervalle mit gleicher Länge $h = \frac{b-a}{2n}$, d. h. Knoten $x_0, x_1, \dots, x_{2n-1}, x_{2n}$:

$$S_2 = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\right)$$

$$= \frac{b-a}{2n} \cdot \frac{1}{3} = \frac{b-a}{n} \cdot \frac{1}{6}$$

$$S_3 = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) \cancel{+} + 2f(x_4) + 4f(x_5) + f(x_6)\right)$$

$$\vdots$$

Beispiele:

S_2: Intervall $[-2,3]$ wird in 4 Teilintervalle der Länge $\frac{5}{4} = 1{,}25$ unterteilt

- Berechnen Sie $\int\limits_{-2}^{3} e^x \,\mathrm{d}x$ näherungsweise durch S_2.

$$S_2 = \frac{5}{4} \cdot \frac{1}{3} \left(e^{-2} + 4e^{-0{,}75} + 2e^{0.5} + 4e^{1.75} + e^3 \right)$$

$$\approx 20{,}18$$

- Berechnen Sie $\int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) \,\mathrm{d}x$ näherungsweise durch S_2.

$n = 2$

$$h = \frac{\frac{\pi}{2}}{4} = \frac{\pi}{8}$$

Exakt: $= \left[-\cos(x) \right]_0^{\frac{\pi}{2}} = 1$

$$S_2 = \frac{\pi}{8} \cdot \frac{1}{3} \left(\sin 0 + 4 \cdot \sin\frac{\pi}{8} + 2 \cdot \sin\frac{\pi}{4} + 4 \cdot \sin\frac{3\pi}{8} + \sin\frac{\pi}{2} \right)$$

$$\approx 1.00013$$

10.3 Fehler der Quadratur

Ordnung einer Integrationsregel

Eine Integrationsregel hat Ordnung p, wenn sie für Polynome vom Grad $\leq p-1$ exakte Werte liefert. (p Knoten)

- Ordnung der Trapezregel T_1: 2 (exakt für Geraden u. konst. Fkt.)
- Ordnung der Newton-Cotes Regeln: Für k+1 Knoten mind. Ordnung k+1
- Zeigen Sie, dass die Simpson-Regel S_1 Ordnung 4 besitzt.

s. nächste Folie

- Warum gilt für eine Integrationsregel der Ordnung ≥ 1: $\sum_{j=0}^{k} \alpha_j = 1$?

Ordnung 1: Verfahren exakt für Funktionen $f(t) = c$

$$c = \int_0^1 c \, dt \overset{!}{=} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j f(t_j) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \cdot c \iff \sum_{j=0}^{k} \alpha_j = 1$$

Überprüfung der Ordnung eines Verfahrens am Beispiel der Simpson-Regel:

Ordnung 1 (exakt für kons. Fkt. $f(t)=1$): $1 = \int_0^1 1\,dt \stackrel{?}{=} \frac{1}{6}\left(f(0) + 4\cdot f(0.5) + f(1)\right) = 1$ ✓

Ordnung 2 ($f(t)=t$): $\frac{1}{2} = \underbrace{\int_0^1 t\,dt}_{\left[\frac{1}{2}t^2\right]_0^1} \stackrel{?}{=} \frac{1}{6}\left(0 + 4\cdot 0.5 + 1\right) = \frac{1}{2}$ ✓

Ordnung 3 ($f(t)=t^2$): $\frac{1}{3} = \int_0^1 t^2\,dt \stackrel{?}{=} \frac{1}{6}\left(0^2 + 4\cdot\left(\frac{1}{2}\right)^2 + 1^2\right) = \frac{1}{3}$ ✓

Ordnung 4 ($f(t)=t^3$): $\frac{1}{4} = \int_0^1 t^3\,dt \stackrel{?}{=} \frac{1}{6}\left(0^3 + 4\cdot\left(\frac{1}{2}\right)^3 + 1^3\right) = \frac{1}{4}$ ✓

Ordnung 5: $\frac{1}{5} = \int_0^1 t^4 \, dt \stackrel{?}{=} \frac{1}{6}\left(0^4 + 4 \cdot \frac{1}{16} + 1\right) = \frac{5}{24}$ ↯

Fehler der Quadratur

Für den (globalen) Fehler e einer Integrationsregel der Ordnung p auf $[a, b]$ gilt

$$e = (b-a) \cdot h^p \cdot K\, f^{(p)}(\xi), \quad \xi \in]a, b[$$

(K heißt Fehlerkonstante des Verfahrens)

unbekannt, d.h. Fehler kann nur durch $\max\limits_{a \leq x \leq b} f^{(p)}(x)$ abgeschätzt werden

Fehler der Summenformeln

Fehler der Trapez-Regel

$p = 2$, $K = \frac{1}{12}$

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

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - T_n\right| = |e_{T_n}| = \frac{h^2}{12}(b-a)\left|f''(\xi)\right|, \quad \xi \in]a,b[$$

$$\leq \frac{h^2}{12}(b-a)\cdot \max_{a\leq x\leq b}\left|f''(x)\right|$$

- Der Fehler ist proportional zu h^2, d. h. eine Halbierung der Intervalllänge reduziert den Fehler um den Faktor $\frac{1}{4}$. Verifizieren Sie dies an den gerechneten Beispielen!
- Ein Integral kann beliebig genau approximiert werden, wenn h entsprechend klein gewählt wird.

Aber auf Kosten von Funktionsauswertungen $\longrightarrow$ Rundungsfehler !

Bei Verfahren höherer Ordnung lässt sich größere Genauigkeit mit weniger Knoten erreichen.

Fehler der Simpson-Regel $p = 4$, $K = \frac{1}{180}$

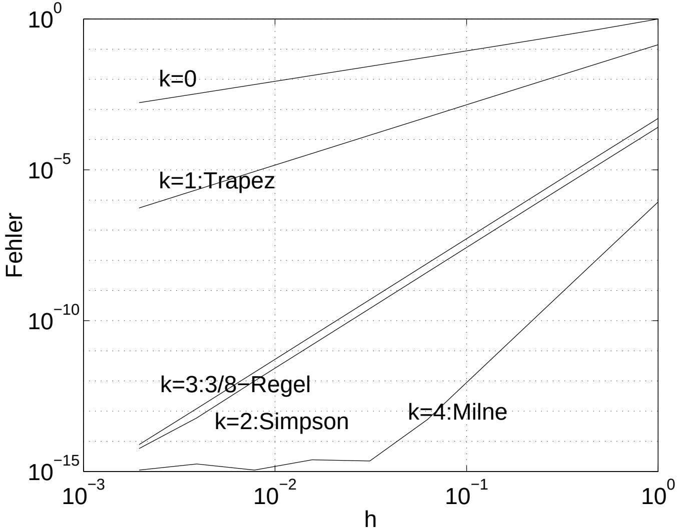
$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - S_n\right| = |e_{S_n}| = \frac{h^4}{180}(b-a)\left|f^{(4)}(\xi)\right|, \quad \xi \in]a,b[\qquad h = \frac{b-a}{2n}$$

Anwendung s. Online-Test:

Bestimme n, so dass $|e_{S_n}| \leq \varepsilon$ (vorgeg. Genauigkeit)

Auflösen nach n in $|e_{S_n}| \leq \frac{1}{180}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^4 (b-a) \max_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)| \overset{!}{\leq} \varepsilon$

Fehler der zusammengesetzten Newton-Cotes Regeln



Grenzen der Newton-Cotes-Regeln

Einfache Verfahren, aber

- Bei Verwendung vieler äquidistanter Knoten treten die bekannten Probleme von Interpolationspolynomen höheren Grades auf.
  $\Longrightarrow$ Gewichte werden negativ, also Verfahren instabil
- Die sog. geschlossenen Newton-Cotes-Regeln machen Funktionsauswetungen an den Grenzen des Intervalls erforderlich.
  $\Longrightarrow$ Problem mit Singularitäten
- Die Newton-Cotes-Regeln erreichen aufgrund der äquidistanten Knoten nicht die größtmögliche Ordnung.

Gauß-Quadratur zur Vermeidung dieser Probleme!

Mit möglichst wenig Funktionsauswertungen soll ein Verfahren möglichst hoher Ordnung erreicht werden $\Rightarrow$ Knoten variabel

10.4 Gauß-Quadratur

Idee: Wähle die Knoten t_j und Gewichte α_j so, dass man ein Verfahren möglichst großer Ordnung p erhält.

Bedingung:

$$\int_0^1 p_r(t)dt = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j p_r(t_j) \quad \text{für alle Polynome vom Grad} \leq p-1$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r+1} = \int_0^1 t^r dt = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j t_j^r \qquad \text{für alle } 0 \leq r \leq p-1$$

z.B. $\frac{1}{2} = \int t \, dt$, $\frac{1}{3} = \int t^2 dt$, $\frac{1}{4} = \int t^3 dt$

$2k+2$ Freiheitsgrade $(\alpha_j, t_j, j = 0, \dots, k) \Longrightarrow$ Ordnung $p = 2k+2$

Für $k=0$: 1 Knoten t_0 + 1 Gewicht α_0 $\Rightarrow$ max. Ord. 2

$k=1$: 2 Knoten t_0, t_1 + 2 Gewichte α_0, α_1 $\Rightarrow$ max. Ord. 4

Für $k=0$:

$$1 = \int_0^1 \underset{t^0}{\underbrace{1}} \, dt \stackrel{!}{=} \alpha_0 \cdot t_0^0 \implies \alpha_0 = 1$$

$$\frac{1}{2} = \int_0^1 t \, dt \stackrel{!}{=} \alpha_0 \cdot t_0 \implies t_0 = \frac{1}{2}$$

Mittelpunktsregel: $\int_0^1 f(t)\,dt \approx f\left(\frac{1}{2}\right)$

hat Ordnung 2

Für $k=1$, d.h. 2 Stützstellen t_0, t_1
und 2 Gewichte α_0, α_1

$$
\left.\begin{aligned}
&(\mathrm{I}) && 1 = \int_0^1 1\,dt \overset{!}{=} \alpha_0 \cdot 1 + \alpha_1 \cdot 1 \\
&(\mathrm{II}) && \tfrac{1}{2} = \int_0^1 t\,dt \overset{!}{=} \alpha_0 \cdot t_0 + \alpha_1 \cdot t_1 \\
&(\mathrm{III}) && \tfrac{1}{3} = \int_0^1 t^2\,dt \overset{!}{=} \alpha_0 t_0^2 + \alpha_1 t_1^2 \\
&(\mathrm{IV}) && \tfrac{1}{4} = \int_0^1 t^3\,dt \overset{!}{=} \alpha_0 t_0^3 + \alpha_1 t_1^3
\end{aligned}\right\}
$$

Lösung (nichttrivial!)

$$\alpha_0 = \tfrac{1}{2} = \alpha_1$$

$$t_0 = \tfrac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$$

$$t_1 = \tfrac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$$

Ordnung 4!

Gauß-Quadraturformeln

Gauß-Quadraturformeln

k	α_j			t_j			Ordnung
0	1			$\frac{1}{2}$			2
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$		4
2	$\frac{5}{18}$	$\frac{8}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	6

Nur positive Gewichte!

Beispiel

Zeigen Sie, dass die Gauß-Quadraturformel für $k = 1$

$$\int_0^1 f(t)\,\mathrm{d}t \approx \frac{1}{2}\left[f\left(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{6}\right)+f\left(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{6}\right)\right].$$

Ordnung 4 besitzt.

Gauß-Lobatto Quadraturformeln

Zusätzliche Bedingung: $t_0 = 0, t_k = 1$

Gauß-Lobatto Quadraturformeln

k	α_i					t_i					Ord.
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				0	1				2
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$			0	$\frac{1}{2}$	1			4
3	$\frac{1}{12}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{1}{12}$		0	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{5}}{10}$	$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{10}$	1		6
4	$\frac{9}{180}$	$\frac{49}{180}$	$\frac{64}{180}$	$\frac{49}{180}$	$\frac{9}{180}$	0	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{21}}{14}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{21}}{14}$	1	8

Vergleich der Verfahren

N,k+1: Newton-Cotes-Regeln **G,k+1:** Gauß-Quadraturformeln