Numerik 1 für Ingenieure
Version 17.11.2014

10. Vorlesung

Michael Karow

Themen:

Differenzieren (finite Differenzen) und Integrieren (Quadratur)

Numerisches Ableiten (Finite Differenzen)

Approximation der ersten Ableitung

Definition der ersten Ableitung einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Dies ist ein beidseitiger Grenzwert, d.h. h kann auch negativ sein.

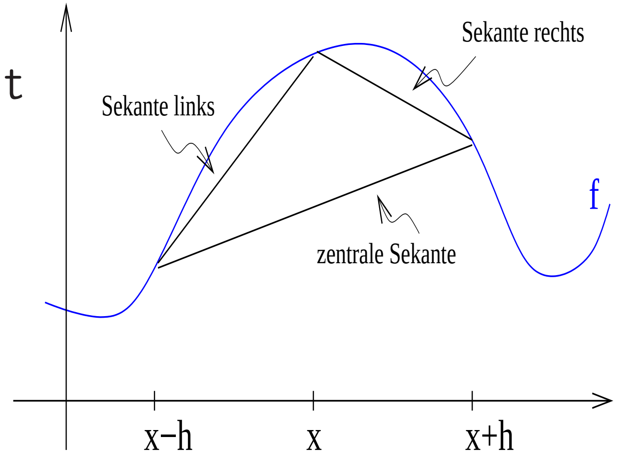
Ab jetzt ist stets $h > 0$.

Approximationen von $f'(x)$ durch Differenzenquotienten (Sekantensteigungen):

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$ rechtsseitiger Differenzenquotient

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$ linksseitiger Differenzenquotient

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$ zentraler Differenzenquotient.



Der zentrale Differenzenquotient ist der Mittelwert aus dem rechtsseitigen und dem linksseitigen Differenzenquotienten.

Frage: Wie genau sind diese Approximationen?

Genauigkeitstest mit Polynomen

Einfache Rechnungen ergeben folgendes.

Wenn $f(x) = 1$ oder $f(x) = x$ dann ist

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

Wenn $f(x) = x^2$ dann ist

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} \neq f'(x) \neq \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

Wenn $f(x) = 1$ oder $f(x) = x$ oder $f(x) = x^2$ dann ist

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x).$$

Wenn $f(x) = x^3$ dann ist

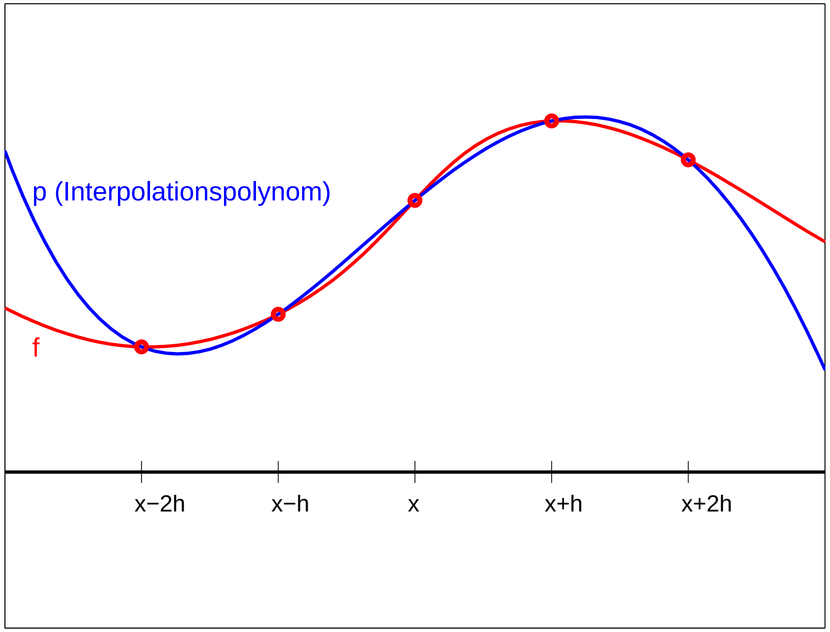
$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \neq f'(x).$$

Mit den einseitigen Differenzenquotienten lassen sich Ableitungen für Polynome vom Grad ≤ 1 exakt berechnen. Mit dem zentralen Differenzenquotienten lassen sich Ableitungen von Polynomen vom Grad ≤ 2 exakt berechnen.

Näherungsformel für die erste Ableitung mit 4 (eigentlich 5) Stützstellen:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\frac{1}{12}f(x-2h) - \frac{2}{3}f(x-h) + \frac{2}{3}f(x+h) - \frac{1}{12}f(x+2h)\right)$$

Die Formel ist exakt für alle Polynome vom Grad ≤ 4



Herleitung:

Betrachte das Polynom p vom Grad ≤ 4, das die Funktion f an den Stellen $x-2h$, $x-h$, x, $x+h$, $x+2h$ interpoliert.

Es ist $f'(x) \approx p'(x)$.

<u>Lagrange-Darstellung von p:</u>

$$p(t) = f(x-2h)\,L_1(t) + f(x-h)\,L_2(t) + f(x)\,L_3(x) + f(x+h)\,L_4(t) + f(x+2h)\,L_5(t).$$

Dabei sind $L_1(t), \ldots, L_5(t)$ die zugehörigen Lagrange-Basispolynome.

Ableiten von p an der Stelle $t = x$ ergibt

$$p'(x) \quad = \quad f(x-2h)\,\underbrace{L_1'(x)}_{\frac{1}{12h}} + f(x-h)\,\underbrace{L_2'(x)}_{-\frac{2}{3h}} + f(x)\,\underbrace{L_3'(x)}_{0} + f(x+h)\,\underbrace{L_4'(x)}_{-\frac{2}{3h}} + f(x+2h)\,\underbrace{L_5'(x)}_{-\frac{1}{12h}}$$

Einfachste finite Differenzenformeln für höhere Ableitungen

$$f''(x) \approx \frac{f(x-h) - 2\,f(x) + f(x+h)}{h^2},$$

$$f'''(x) \approx \frac{-f(x-h) + 3\,f(x) - 3\,f(x+h) + f(x+2h)}{h^3}$$

$$f^{(4)}(x) \approx \frac{f(x-2h) - 4\,f(x-h) + 6\,f(x) - 4\,f(x+h) + f(x+2h)}{h^4}$$

$$f^{(5)}(x) \approx \frac{-f(x-2h) + 5\,f(x-h) - 10\,f(x) + 10\,f(x+h) - 5\,f(x+2h) + f(x+3h)}{h^5}$$

Bemerkungen:

1. Die Koeffizienten in diesen Formeln sind die Binomialkoeffizienten (mit wechselndem Vorzeichen)

2. Die Formel für $f^{(n)}(x)$ ist exakt für alle Polynome vom Grad $\leq n$.

3. Die Formeln können durch Ableiten von Interpolationspolynomen oder direkt aus dem verallgemeinerten Mittelwertsatz

$$f[x_1,\ x_2 \ldots x_{n+1}] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \approx \frac{f^{(n)}(x)}{n!}$$

hergeleitet werden, wenn man für die x_j die Stellen $x + k\,h$ einsetzt.

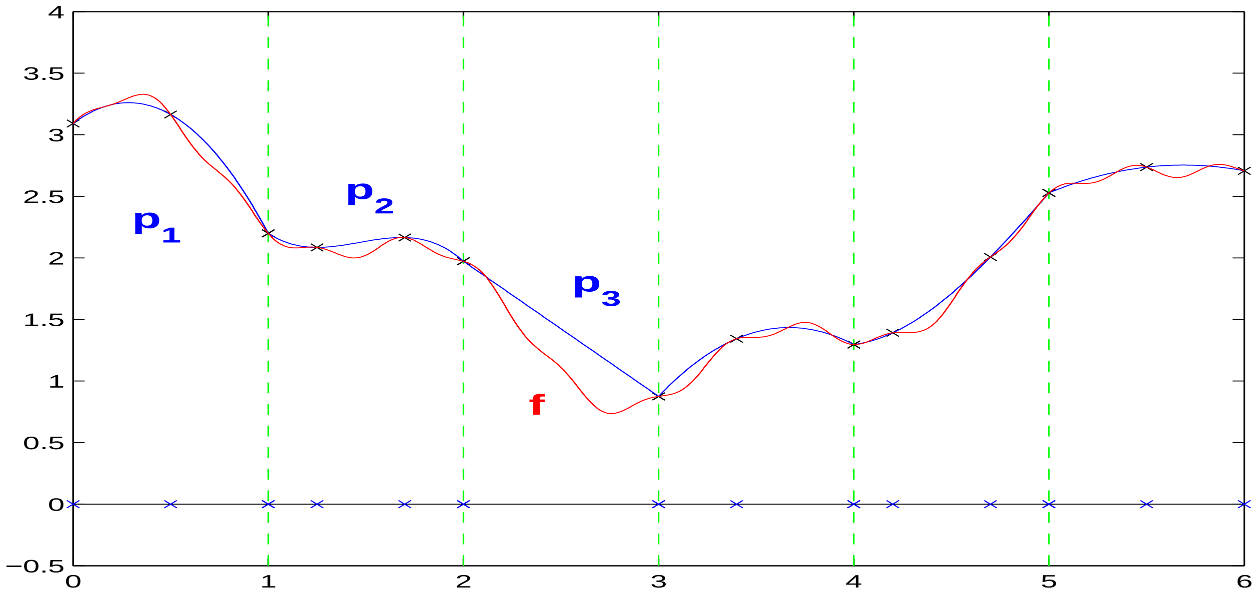
Numerische Integration (Quadratur)

Problem: Wie berechnet man numerisch ein bestimmtes Integral $\int_a^b f(x)\,dx$,

für Funktionen f, für die keine Stammfunktion in den Formelsammlungen steht ?

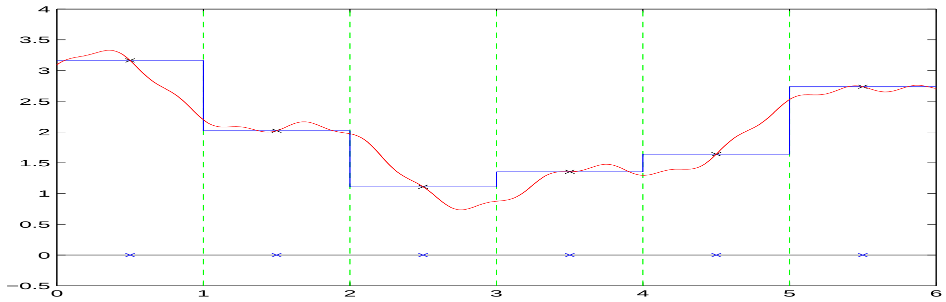
Naheliegende Idee: Integrale von Polynomen sind leicht zu berechnen. Unterteile also das Intervall $[a,b]$ in Teilintervalle $[x_j, x_{j+1}]$ und approximiere das Integral von f auf jedem dieser Intervalle durch das Integral eines Polynoms p_j, welches f interpoliert:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_j}^{x_j+1} f(x)\,dx \approx \sum_{j=1}^{n} \int_{x_j}^{x_j+1} p_j(x)\,dx.$$

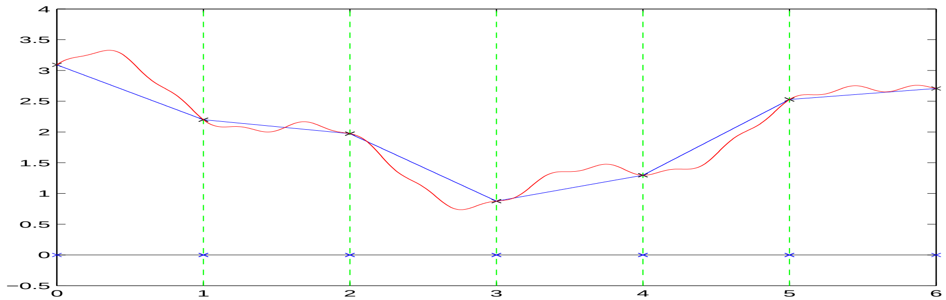


Die einfachsten Fälle

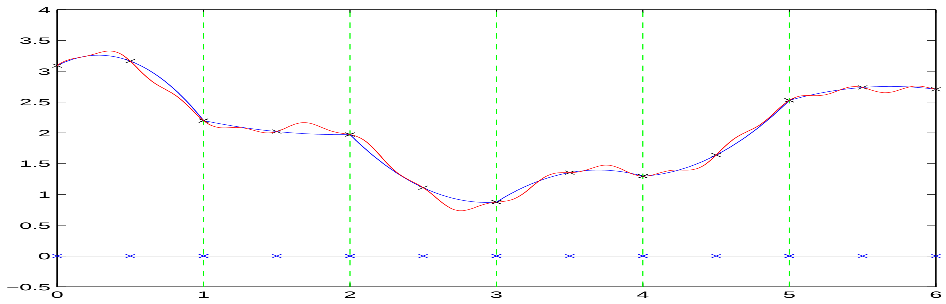
1 Stützpunkt pro Intervall, Interpolationpolynome sind konstante Funktionen



Stützpunkte nur an den Intervallrändern, lineare Interpolation, **Trapezregel**

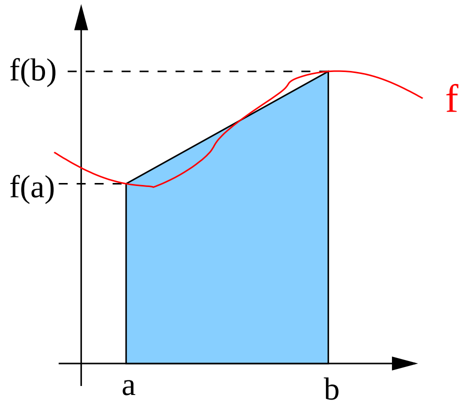


3 Stützpunkte (links,rechts,Mitte) pro Intervall, Interpolation durch Parabeln, **Simpsonregel (Keplersche Fassregel)**



Die Trapezregel

Flächeninhalt für nur ein Trapez über dem Intervall $[a, b]$:



$$T = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} \approx \int_a^b f(x)\,dx. \qquad (*)$$

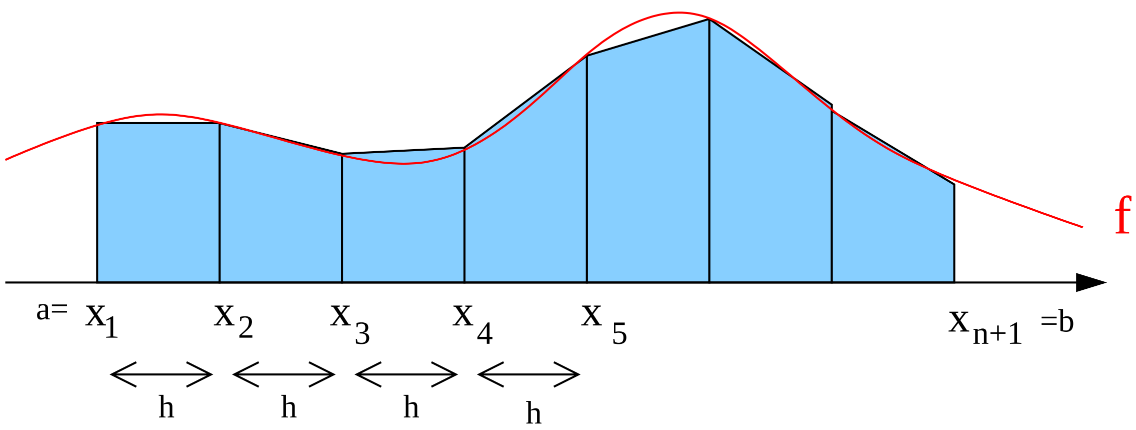
Trapezsumme bei Unterteilung des Intervalls in gleich lange Teilintervalle $[x_j, x_{j+1}]$, $x_j = a + (j-1)h$, $h = (b-a)/n$:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx T(h) = \sum_{j=1}^{n} h\,\frac{f(x_{j+1})+f(x_j)}{2} = h\left(\frac{1}{2}(f(a)+f(b)) + \sum_{j=2}^{n} f(x_j)\right) \qquad (**).$$

Bemerkungen:

1. Es ist $x_1 = a$, $x_{n+1} = b$.

2. Die Formel $(**)$ bezeichnet man auch als **summierte Trapezregel**.



Der Integrationsfehler bei der einfachen Trapezregel

Es ist

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{h\,\frac{f(a)+f(b)}{2}}_{T} - \underbrace{\frac{h^3}{12}f''(\xi),}_{Fehler} \qquad h := b-a$$

für ein $\xi \in [a,b]$.

Beweis: Sei $p(x) = f(a)\,\frac{x-b}{a-b} + f(b)\,\frac{x-a}{b-a} = f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\,(x-a)$ das lineare Interpolationspolynom. In der letzten VL wurde gezeigt,dass

$$f(x) = p(x) + f[a,b,x]\,(x-a)(x-b) \qquad und \qquad f[a,b,x] = \frac{f''(\xi)}{2} \quad \text{für ein } \xi \in [a,b]. \quad (*)$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b (p(x) + f[a,b,x]\,(x-a)(x-b)\,)\,dx \\
&= \int_a^b p(x)\,dx + \int_a^b f[a,b,x]\,(x-a)(x-b)\,dx \\
&= h\,\frac{f(a)+f(b)}{2} + \int_a^b f[a,b,x]\,\underbrace{(x-a)(x-b)}_{\leq 0}\,dx \\
&= h\,\frac{f(a)+f(b)}{2} + f[a,b,\tilde{x}]\underbrace{\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx}_{-(b-a)^3/6} \qquad \tilde{x} \in [a,b] \quad \text{(Mittelwertsatz)} \\
&= T - f''(\xi)\,h^3/12 \qquad \text{für ein } \xi \in [a,b] \quad \text{(wegen } (*))
\end{aligned}$$

Der Integrationsfehler bei der summierten Trapezregel

Sei $h = (b-a)/n$ und

$$T(h) = h \left(\frac{1}{2}(f(a) + f(b)) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a + j\,h) \right)$$

Dann gilt für ein $\xi \in [a,b]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;=\; T(h) - \frac{(b-a)\,h^2}{12}\,f''(\xi)$$

Beweis: In der Vorlesung.

Bemerkung: Die Konvergenz bei der summierten Trapezregel ist um eine Ordnung geringer als die Konvergenz der einfachen Trapezregel.
Grund: die Fehler summieren sich auf.

Die (Simpsonregel) Keplersche Fassregel für ein Intervall

Sei p das Interpolationspolynom (Parabel) zu den Stützstellen $a, b, (a+b)/2$.
Die Lagrange-Darstellung von p ist

$$p(x) = f(a)\underbrace{\frac{(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}{(a-\frac{a+b}{2})(a-b)}}_{L_1(x)} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\underbrace{\frac{(x-a)(x-b)}{(\frac{a+b}{2}-a)(\frac{a+b}{2}-b)}}_{L_2(x)} + f(b)\underbrace{\frac{(x-a)(x-\frac{a+b}{2})}{(a-b)(b-\frac{a+b}{2})}}_{L_3(x)}.$$

Eine direkte Rechnung ergibt:

$$\int_a^b L_1(x)\,dx = \int_a^b L_3(x)\,dx = \frac{b-a}{6}, \qquad \int_a^b L_2(x)\,dx = \frac{4(b-a)}{6}.$$

Dies impliziert

$$\begin{aligned} S := \int_a^b p(x)\,dx &= f(a)\int_a^b L_1(x)\,dx + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\int_a^b L_2(x)\,dx + f(b)\int_a^b L_3(x)\,dx \\ &= \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) \end{aligned}$$

Integrationsfehler: Ist $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ 4mal stetig differenzierbar, so gilt für ein $\xi \in [a,b]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = S - \frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}h^5, \qquad h = b-a$$

Die summierte Simpsonregel

Die summierte Simpsonregel erhält man, indem man das Integrationsintervall in Intervalle der Länge h aufteilt und auf jedem Teilintervall die Simpsonregel anwendet: Sei $h = (b-a)/n$, $x_j = a + (j-1)h$, $j = 1, \ldots, n+1$, insbesondere $x_1 = a$, $x_{n+1} = b$. Dann ist

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{j=1}^{n} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx \\
&\approx \sum_{j=1}^{n} \frac{h}{6}\Big(f(x_j) + 4\,f\big(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\big) + f(x_{j+1})\Big) \\
&= \frac{h}{6}\Bigg(f(x_1) + 4\,f\big(\frac{x_1+x_2}{2}\big) + 2\,f(x_2) + 4\,f\big(\frac{x_2+x_3}{2}\big) + 2\,f(x_3) + \ldots \\
&\qquad \ldots + 2\,f(x_n) + 4\,f\big(\frac{x_n+x_{n+1}}{2}\big) + f(x_{n+1})\Bigg).
\end{aligned}
$$

Konstruktion von Quadraturformeln

Ein allgemeines Verfahren, um Quadraturformeln zu konstruieren ist das folgende: Wähle eine endliche Folge τ_j mit

$$0 \leq \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_n \leq 1$$

Setze $x_j = a + \tau_j h$, wobei $h = b - a$. Das Interpolationspolynom p vom Grad $\leq n - 1$ zu $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ und den Stützstellen (Knoten) x_j ist

$$p(x) = f(x_1) L_1(x) + f(x_2) L_2(x) + \ldots + f(x_r) L_r(x).$$

mit den zugehörigen Lagrange-Basispolynomen: $L_k(x_j) = \delta_{k,j}$.
Man hat dann die Näherung

$$\int_a^b f(x)\, dx \;\approx\; Q(f) \;:=\; \int_a^b p(x)\, dx \;=\; h\,(\gamma_1 f(x_1) + \gamma_2 f(x_2) + \ldots + \gamma_n f(x_n))$$

mit den Gewichten

$$\gamma_j := \frac{1}{h} \int_a^b L_j(x)\, dx$$

Man kann leicht nachrechnen, dass die Gewichte nur von der Folge τ_j abhängen und nicht von der Lage des Intervalls $[a, b]$.

Wählt man die τ_j äquidistant, so heißen die resultierenden Quadraturformeln **Newton-Cotes-Formeln**. Wenn zusátzlich $\tau_1 = 0$ und $\tau_n = 1$ (also $x_1 = a$ und $x_n = b$) dann nennt man die zugehörigen Newton-Cotes-Formeln **geschlossen**.

Geschlossene Newton-Cotes-Formeln (äquidistante Stützstellen)

n	Gewichte γ_j	Name	Fehler	Exaktheitsgrad
2	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$	Trapezregel	$-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$	1
3	$\frac{1}{6}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{6}$	Simpson-Regel (Kepl. Fassregel)	$-\frac{h^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$	3
4	$\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{1}{8}$	Newtons 3/8-Regel	$-\frac{3\,h^5}{19440}f^{(4)}(\xi)$	3
5	$\frac{7}{90}\ \frac{32}{90}\ \frac{12}{90}\ \frac{32}{90}\ \frac{7}{90}$	Milne-Regel	$-\frac{h^7}{1935360}f^{(6)}(\xi)$	5
6	$\frac{19}{288}\ \frac{75}{288}\ \frac{50}{288}\ \frac{50}{288}\ \frac{75}{288}\ \frac{19}{288}$	6-Punkt-Regel	$-\frac{275\,h^7}{12096*5^7}f^{(6)}(\xi)$	5
7	$\frac{41}{840}\ \frac{216}{840}\ \frac{27}{840}\ \frac{272}{840}\ \frac{27}{840}\ \frac{216}{840}\ \frac{41}{840}$	Weddle-Regel	$-\frac{9\,h^9}{1400*6^9}f^{(8)}(\xi)$	7

Zum Exaktheitsgrad siehe nächste Seite.

Der maximale Exaktheitsgrad der Gauß-Legendre-Quadratur

Eine Quadraturformel

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\,(\gamma_1\, f(x_1) + \gamma_2\, f(x_2) + \ldots + \gamma_n\, f(x_n)) \qquad (*)$$

mit Gewichten γ_j und Stützstellen $x_j \in [a,b]$ heißt exakt vom Grad m, wenn in $(*)$ Gleichheit gilt für alle Polynome f vom Grad $\leq m$, und wenn es außerdem ein Polynom f vom Grad $m+1$ gibt, so dass die Seiten von $(*)$ nicht gleich sind.

Mit n äquidistanten Stützstellen bekommt man Exaktheitsgrad $n-1$ wenn n gerade ist, und Exaktheitsgrad n, wenn n ungerade ist.

Den maximalen Exaktheitsgrad, nämlich $2n-1$ bekommt man, wenn man als Stützstellen wählt

$$x_j = \frac{a+b}{2} + \frac{h}{2}\,\tau_{nj}, \qquad j = 1,\ldots,n, \qquad h = b-a$$

wobei $\tau_{n1},\ldots,\tau_{nn}$ die Nullstellen des n-ten Legendre-Polynoms p_n sind:

$$p_n(x) = \frac{1}{2^n\, n!}\,\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n].$$

Die zugehörigen Quadraturformeln heißen **Gauß-Legendre-Formeln**.
Für $n=2$ hat man $\tau_{21} = -1/\sqrt{3}$, $\tau_{22} = 1/\sqrt{3}$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1/2$. Also

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left(f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}\right)\right).$$

Gauß-Legendre-Quadratur mit 2 Stützwerten versus Trapezregel

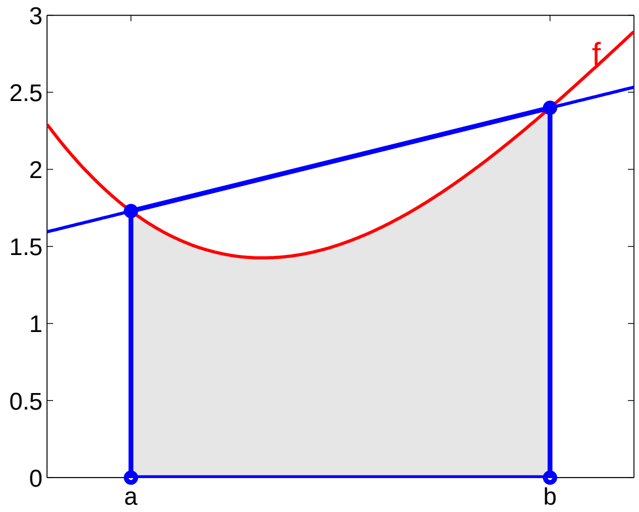
Trapezregel:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; \frac{h}{2}\left(f(a)+f(b)\right), \qquad h = b-a$$

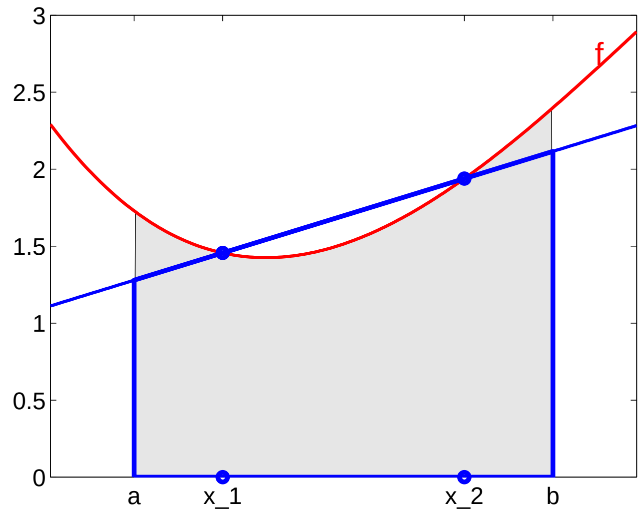
Gauß-Legendre-Quadratur mit 2 Stützwerten:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; \frac{h}{2}\left(f(x_1)+f(x_2)\right), \qquad x_j = \frac{a+b}{2} + (-1)^j \frac{h}{2\sqrt{3}}$$

Trapezregel:



Gauß-Legendre:



Die Gauß-Legendre-Quadraturformel ist exakt für Polynome vom Grad ≤ 3.

Grund: die Inhalte der grauen Flächen oberhalb und der weißen Fläche unterhalb der Trapezkante sind gleich. **Beweisskizze auf der nächsten Seite.**

Beweisskizze zur Exaktheit der Gauß-Legendre-Quadraturformel mit 2 Stützwerten

Sei

$$p(x) = (x - x_1)(x - x_2), \qquad x_j = \frac{a+b}{2} + (-1)^j \frac{h}{2\sqrt{3}}, \qquad h = b - a$$

Folgendes beweist man durch Nachrechnen:

(1) $\displaystyle\int_a^b q(x)p(x)\,dx = 0$ für alle linearen Polynome $q(x) = \alpha_1 x + \beta_1$.

(2) $\displaystyle\int_a^b r(x)\,dx = \frac{h}{2}(r(x_1) + r(x_2))$ für alle linearen Polynome $r(x) = \alpha_2 x + \beta_2$.

Sei nun f ein Polynom vom Grad ≤ 3.

Dann hat man für geeignete lineare Polynome q, r (Polynomdivision mit p)

$$f(x) = q(x)\,p(x) + r(x).$$

Weil $p(x_1) = p(x_2) = 0$ hat man $f(x_1) = r(x_1)$ und $f(x_2) = r(x_2)$.
Zusammen mit (1) und (2) folgt

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b (q(x)\,p(x) + r(x))\,dx = \int_a^b r(x)\,dx = \frac{h}{2}(r(x_1) + r(x_2)) = \frac{h}{2}(f(x_1) + f(x_2))$$

Gauß-Legendre-Quadraturformel mit 3 Stützwerten (Exaktheitsgrad 5):

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; \frac{h}{18}\left(5\,f\left(\frac{a+b}{2} - \sqrt{\frac{3}{5}}\,\frac{h}{2}\right) + 8\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 5\,f\left(\frac{a+b}{2} + \sqrt{\frac{3}{5}}\,\frac{h}{2}\right)\right)$$

$$h = b - a$$

Zum Vergleich noch einmal die **Simpson-Regel (Exaktheitsgrad 3)**:

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; \frac{h}{6}\left(f\,(a) + 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f\,(b)\right)$$

Quadraturfunktionen in MATLAB: `integral(f,a,b)`, `quad(f,a,b)` etc.

Die Idee des Romberg-Verfahrens

Wir betrachten noch einmal die summierte Trapezregel: Trapezsumme bei Unterteilung des Intervalls $[a, b]$ in gleich lange Teilintervalle $[a + jh,\ a + (j + 1)h]$, $h = (b - a)/n$:

$$\int_a^b f(x)\,dx \quad \approx \quad T(h) = h\left(\frac{1}{2}(f(a) + f(b)) + \sum_{j=1}^{n} f(a + j\,h)\right) \qquad (*).$$

Dies ist ein einfaches Verfahren, welches aber kleine Schittweiten h braucht um hinreichend genau zu sein. Andererseits kann man die Schrittweite nicht zu klein machen, denn sonst summieren sich die Rundungsfehler bei der Summation stark auf. Einen Ausweg bietet hier die **Extrapolationsmethode von Romberg**. Grundlage dafür ist der folgende (schwierig zu beweisende) Satz: Zu jeder $(2m + 1)$-mal stetig diff'baren Funkion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ gibt es Konstanten τ_j, so dass

$$T(h) = \underbrace{\tau_0 + \tau_2\,h^2 + \tau_4\,h^4 + \ldots + \tau_{2m}\,h^{2m}}_{q(h^2)} + \mathcal{O}(h^{2m+2}), \qquad \text{wobei } \tau_0 = \int_a^b f(x)\,dx$$

Hat man nun die Trapezsumme für $m + 1$ kleine Schrittweiten h_j berechnet, dann gilt näherungsweise

$$q(h_j^2) \approx T(h_j)$$

Damit kann man das Polynom q näherungsweise bestimmen. Als Näherung nimmt man das Interpolationspolynom p vom Grad m, für welches gilt

$$p(h_j^2) = T(h_j)$$

Es ist dann

$$\textstyle\int_a^b f(x)\,dx = \tau_0 = q(0) \approx p(0).$$

Mit Hilfe des Lemmas von Aitken (genauer: mit dem sogenannten Neville-Aitken-Algorithmus) kann man $p(0)$ bestimmen, ohne die Koeffizienten von p ausrechnen zu müssen.