1 Numerische Integration

Berechnung von Integralen, z.B. zur Flächen- oder Volumenberechnung, aber auch notwendig in komplexeren Formeln/Algorithmen, z.B. Fourier-Integrale, Numerik partieller-Differentialgleichungen. Oft nicht (leicht) von Hand zu berechnen, \Rightarrow Algorithmen zur näherungsweisen Berechnung von Integralen. Viele typiche "Quadraturformeln" haben für $f \in C[a, b]$ die Form

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} x_{i} f(x_{i}),$$

d.h. Kombination von Punktauswertungen mit Stützstellen $a \le x_0 < x_1 \dots x_n \le b$

Erinnerung/Beispiel (Rieman-Integral).

z.B. Rieman-Summe

$$I_h(f) := \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1})$$

f Rieman-Integrierbar $\sim I_h(f) \to I(f)$ für $h \to 0$, $h := \max(x_i - x_{i-1})$

1.1 Interpolatorische Quadraturformel

Kennt man eine Polynom-Interpolation von f, (oder Hermite-), kann man statt f einfach die Interpolierende integrieren. Integration über Polynome ist einfach. Zu $a \leq x_0 < x_1 \cdots < x_n \leq b$ sei $P_n \in \mathbb{P}_n$ das interpolierende Polynom zu f mit $P_n(x_i) = f(x_i), i = 0, \ldots, n$ setze dann

$$I^{(n)}(f) := \int_{a}^{b} P_{n}(x) dx = \int_{a}^{b} \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) L_{i}^{(n)}(x) dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) \int_{a}^{b} L_{i}^{(n)}(x) dx$$
$$P_{n}(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) L_{i}^{(n)}(x)$$

Wie groß ist der Fehler $I(f) - I^{(n)}$?

Mit der Formel fürden Interpolationen Fehler folgt:

Satz 1.1. Für die Lagrange-Quadraturformel $I^{(n)}$ gilt, falls $f \in C^{n+1}[a,b]$:

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_{a}^{b} f(x) - p_n(x)dx = \int_{a}^{b} \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x) \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)dx$$

also

$$\left| I(f) - I^{(n)}(f) \right| \le \frac{1}{(n+1)!} \cdot \max_{[a,b]} \left| f^{(n+1)} \right| \cdot \left| \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx \right|$$

Bemerkung 1.2. man kann auch zeigen:

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

Interpolatorische Integrationsformeln, $I^{(n)}(f) := \int_a^b p_n(x) dx$, $p_n \in \mathbb{P}$ des Interpolationspolynoms zu f in $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ Nach Konstruktion: die interpolierende Quadraturformel ist "exakt" für beliebige Polynome $p \in \mathbb{P}_n$, wegen des Eindeutigkeit der Interpolationspolynoms.

Definition 1.3. Eine Quadraturformel $I^{(n)}$ wird (mindestens) "von der Ordnung m" genannt, falls durch sie alle Polynomevom Grad $\leq m-n$ exakt integriert werden.

Damit sind die interpolatorischen Quadraturformeln $I^{(n)}$ mindestens von der Ordnung n+1.

Beispiel 1.4 (Lagrange-Quadraturen mit n+1 Stützstellen mit gleichen Abständen).

- (a) "(abgeschlossene) Newton-Cotes-Formeln": a, b sind Stützstellen, $x_i = a + ih$, i = 0, ..., n mit $h = \frac{b-a}{n}$
- (b) "offene Newton-Cotes-Formeln: $a, b \text{ sind } \underline{\text{keine}}$ Stützstellen, $x_i = a + (i+1)h$, $i = 0, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n+2}$

Die ersten Newton-Cotes-Formeln sind:

abgeschlossen:

$$I^{(1)} = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$$
 "Trapezregel"
$$I^{(2)} = \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{ab}{2}\right)+f(b)\right)$$
 "Keplersche Fassregel"
$$I^{(3)} = \frac{b-a}{8}\left(f(a)+3f(a+h)+3f(b-h)+f(b)\right)$$
 "\$\frac{3}{8}\text{-Regel}"

offen:

$$I^{(0)}(f) \coloneqq (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$
 "Mittelpunktsregel"
$$I^{(1)}(f) \coloneqq \frac{b-a}{2} (f(a+h) + f(b-h))$$

$$I^{(2)}(f) \coloneqq \frac{b-a}{3} \left(2f(a+h) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 2f(b-h)\right)$$

Mit den Interpolationsabschätzungen und Integral-Mittelwertsätzen zeigt man:

Satz 1.5 (Quadraturfehler Newton-Cotes-Formeln).

i) Für die Trapezregel $I^{(1)}$ mit $f \in C^2[a,b]$ gilt:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx - \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) = -\frac{(b-a)^{3}}{12} f''(\xi) \text{ mit } \xi \in [a, b]$$

ii) Für die Simpson-Regel $I^{(2)}$ mit $f \in C^4[a,b]$ gilt:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx - \frac{b-a}{2} (f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)) = -\frac{(b-a)^{5}}{2880} f^{(4)}(\xi) \text{ mit } \xi \in [a,b]$$

iii) Für die Mittelpunktformel $I^{(0)}$ mit $f \in C^2[a,b]$ gilt:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx - (b-a)f(\frac{a+b}{2}) = -\frac{(b-a)^{3}}{24}f^{(2)}(\xi) \text{ mit } \xi \in [a,b]$$

Beweis zu i)

$$\int_{a}^{b} f(x) dx - \int_{a}^{b} p_{n}(x) dx = \int_{a}^{b} f(x) - p_{n}(x) dx$$

$$= \int_{a}^{b} f''(\xi(x)) \cdot \frac{1}{2} \cdot (x - a)(x - b) dx$$

$$= f''(\xi) \frac{1}{2} \int_{a}^{b} (x - a)(x - b) dx$$

$$= \frac{1}{12} f''(\xi)(b - a)^{3}$$

Bemerkung 1.6. zu iii) Mittelpunktformel ist exakt nicht nur für $p \in \mathbb{P}_0$ sondern sogar für alle $p \in \mathbb{P}_n$

Bemerkung 1.7. Sind neben f auch die Ableitungen f'(x) bekannt, dann kann man auch eine Hermite-Interpolation zur Herleitung von Quadraturformeln nehmen, die Hermite- Interpolationsfehlerabschätzung überträgt sich dann auf die Quadraturfehlerabschätzung.

Um ein Integral besser zu approximieren, wird typicherweise nicht der Polynomgrad weiter erhöht, sondern eine Quadraturformel mit relativ geringen Grad auf Teilintervallen immer kleinerer Größe genutzt:

z.B. $a = y_0 < y_1 < \cdots < y_N = b$ mit Teilintervallen $I_i = [y_{i-1}, y_i]$:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=1}^{N} \int_{I_{i}} f(x) dx \approx \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \int_{I_{i}} \underbrace{I_{[y_{i-1}, y_{i}]}^{(n)} f}_{\text{Interpolierende}} dx}_{I_{h}^{(n)}(f)}$$

und

$$\int_{a}^{b} f(x) dx - I_{h}^{(n)}(f) = \sum_{i=1}^{N} \int_{I_{i}} f(x) dx - \int_{a}^{b} \left(I_{[y_{i-1}, y_{i}]}^{(n)} f \right) (x) dx$$

$$\leq \sum_{i=1}^{N} c_{m} \cdot (y_{i-1} - y_{i})^{m+1} \left| f^{(m)}(\xi_{i}) \right|$$

$$\leq \sum_{i=1}^{N} c_{m} h^{m+1} \cdot \left| \left| f^{(m)} \right| \right|_{\max[a, b]}$$

$$\leq c_{m} (b - a) \frac{h}{h_{\min}} h^{m} \cdot \left| \left| f^{(m)} \right| \right|_{\max}$$

mit

$$N \leq \frac{b-a}{h_{\min}}$$
, $\frac{h}{h_{\min}} = 1$, falls alle Teilintervalle gleich lang sind

Beispiel 1.8. $y_i = a + ih$, $h = \frac{b-a}{N}$, i = 0, ..., N gleichgroße Teilintervalle. Summierte Trapezregel

$$I_h^{(1)}(f) := \frac{h}{2} \left(f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} 2f(y_i) + f(b) \right),$$
$$\left| I(f) - I_h^{(1)}(f) \right| \le \frac{b-a}{12} h^2 \left| \left| f^{(2)} \right| \right|_{\max[a,b]}$$

Summierte Simpsonregel:

$$I_h^{(2)}(f) := \frac{h}{6} \left(f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} 2f(y_i) + \sum_{i=1}^{N} 4f \left(\frac{y_{i-1} + y_i}{2} + f(b) \right) \right),$$

$$\left| I(f) - I_h^{(2)}(f) \right| \le \frac{b - a}{2880} h^4 \left| \left| f^{(4)} \right| \right|_{\text{max}}$$

Summierte Mittelpunktregel:

$$I_h^{(0)}(f) := h \sum_{i=1}^N f\left(\frac{y_{i-1} + y_i}{2}\right),$$
$$\left| I(f) - I_h^{(0)}(f) \right| \le \frac{b - a}{24} h^2 \left| \left| f^{(2)} \right| \right|_{\text{max}}$$

Bemerkung 1.9. Ähnlich geht es für Hermite-Splines, d.h. lokale Hermite-Interpolierende

Motivation. Mittelpunktsregel und Simpson-Regel sind von höherer Ordnung als man es durch den Polynomgrad alleine erwarten würde, anscheinend allein durch die geschickte Wahl der Stützstellen.

Frage. Wie gut kann man werden bei optimaler Wahl der Stützstellen?

1.2 Gauß-Quadraturformeln

Man sieht leicht, dass die Maximale Ordnung einer interpolierenden Quadraturformel nach oben begrenzt ist

Lemma 1.10. Eine obere Grenzen für die Ordnung einer interpol. Quadraturformel $I^{(n)}$ mit n+1 Sützstellen ist 2n+2

Beweis Wäre Ordnung höher, könnte man alle Polynome vom Grad 2n+2 exakt integrieren. Für das Polynom

$$p(x) := \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2 \in \mathbb{P}_{2n+2}$$

gilt

$$\forall i = 0, \dots, n : p(x_i) = 0$$

also

$$I^{(n)}(p) = 0$$

da

$$I^{(n)}(p) = \sum_{j=0}^{n} w_i p(x_i)$$

aber

$$\forall x : p(x) \ge 0$$
, also $p \not\equiv 0$

demnach

$$\int_a^b p(x) \, \mathrm{d}x > 0$$

Man kann bei geschickter Wahl der Stützstellen also alle Polynome $p \in \mathbb{P}_{2n+1}$ exakt integrieren. Ein Polynom $p \in \mathbb{P}_{2n+1}$ kann man immer zerlegen in

$$p(x) = r(x) \cdot q(x) + s(x)$$

mit $q \in \mathbb{P}_{n+1}$ fest vorgegeben, $\deg\left(q\right) = n+1,\,r,s \in \mathbb{P}_n$