

# I. Numerische Quadratur

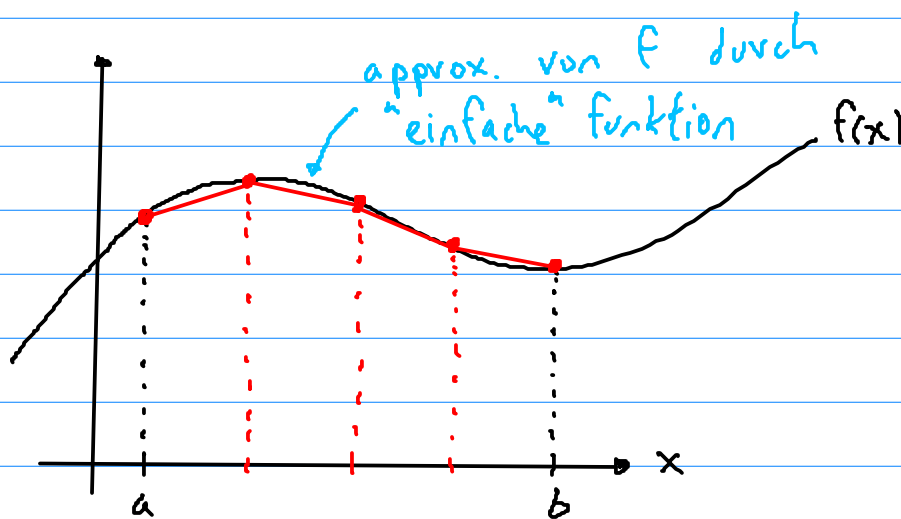
Ziele: - approximieren von bestimmten Integralen

$$Q[f] \approx \int_a^b f(x) dx$$

- Genauigkeit der Approximation abschätzen
- fundamentale Konzepte der Numerik kennenlernen
- Newton-Cotes, Gauss, adaptive Quadratur
- zwei-dimensionale Quadratur

Wozu: Oft ist  $\int_a^b f(x) dx$  nicht exakt berechenbar

Idee:



$$I[f] = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_j w_j \cdot f(x_j) = Q[f]$$

# I.1 Polynomiale Interpolation

Gegeben  $n+1$  paarweise verschiedene Stützstellen / Knoten  $x_0, x_1, \dots, x_n$  und zugehörige Stützwerte  $y_0, y_1, \dots, y_n$

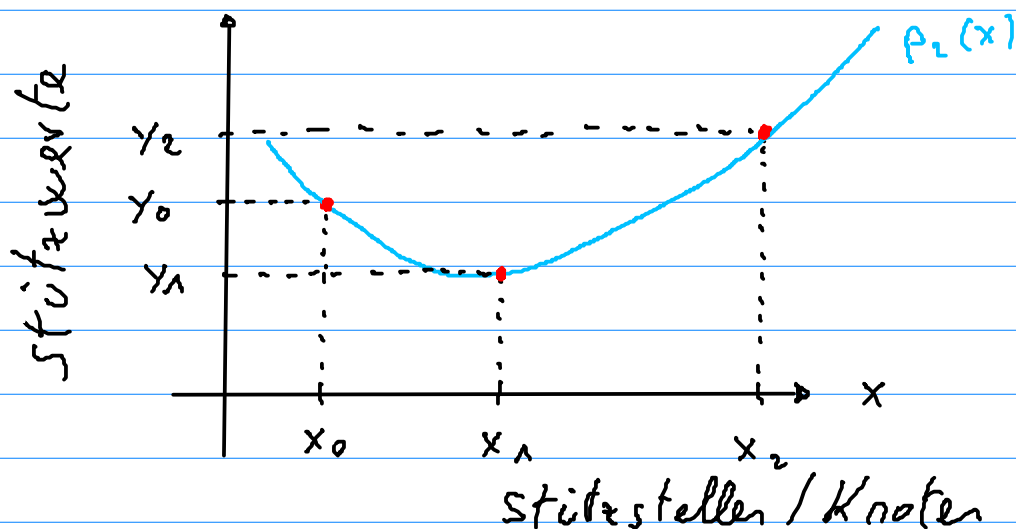
finde das Polynom  $n$ -ten Grades

$$p_n(x) = a_0 + a_1 \cdot x + \dots + a_n \cdot x^n \in \mathbb{P}_n$$

welches die Interpolationsbedingungen (IB) erfüllt

$$p_n(x_j) = y_j \quad (j=0, 1, \dots, n)$$

Die  $n+1$  Koeffizienten  $a_0, a_1, \dots, a_n$  des sog. Interpolationspolynom (IP) ergeben sich aus den  $n+1$  IB (n+1 lineares Gleichungssystem) (LGS)



Bsp.: (1) Finde  $p_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$

mit  $(x_0, y_0) = (1, 2)$ ,  $(x_1, y_1) = (3, 5)$  und

$(x_2, y_2) = (4, 4)$

Die IB lauten

$$p_2(x_0) = p_2(1) = a_0 + a_1 + a_2 = 2 = y_0$$

$$p_2(x_1) = p_2(3) = a_0 + 3a_1 + 9a_2 = 5 = y_1$$

$$p_2(x_2) = p_2(4) = a_0 + 4a_1 + 16a_2 = 4 = y_2$$

Oder als LGS

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Lösen ...  $a_0 = -2$ ,  $a_1 = \frac{23}{6}$ ,  $a_2 = -\frac{5}{6}$

MATLAB: -  $p = \text{polyfit}(x, y, n)$

- Einfache Auswertung mit  $\text{polyval}$

Das IP kann man auch direkt mittels der Lagrange'schen Interpolationsformel (LI) bestimmen

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j \cdot L_j^{\wedge}(x)$$

wobei

$$L_j^{\wedge}(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \quad (j = 0, 1, \dots, n)$$

die sog. Lagrange-Polynome (LP) sind.

Die LP haben folgende Eigenschaften

(LP1)  $L_j^{\wedge}(x)$  sind Polynome  $n$ -ten Grades

$$(LP2) \quad L_j^{\wedge}(x_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j=k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$

(LP2) ist der Grund wieso LI die IB erfüllt:

$$p_n(x_i) = \sum_{j=0}^n y_j \cdot L_j^{\wedge}(x_i)$$

$$= 0 + \dots + 0 + y_i \cdot \underbrace{L_i^{\wedge}(x_i)}_1 + 0 + \dots$$

$$= y_i \cdot 1$$

Bsp.: (2) Finde das IP durch  $(x_0, y_0) = (1, 2)$ ,  
 $(x_1, y_1) = (3, 5)$  und  $(x_2, y_2) = (4, 4)$

↪ wie Bsp. (1)!

Berechne die LP:

$$\begin{aligned} L_0^2(x) &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} = \frac{x - 3}{1 - 3} \cdot \frac{x - 4}{1 - 4} \\ &= \frac{1}{6} (x - 3) (x - 4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_1^2(x) &= \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x - 1}{3 - 1} \cdot \frac{x - 4}{3 - 4} \\ &= -\frac{1}{2} (x - 1) (x - 4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_2^2(x) &= \frac{x - y_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x - 1}{4 - 1} \cdot \frac{x - 3}{4 - 3} \\ &= \frac{1}{3} (x - 1) (x - 3) \end{aligned}$$

Damit

$$p_2(x) = 2 \cdot L_0^2(x) + 5 \cdot L_1^2(x) + 4 \cdot L_2^2(x)$$

$$= \dots = -2 + \frac{29}{6} x - \frac{5}{6} x^2$$

( $\equiv$  Bsp. (1)  $\checkmark$ .)

## I.2 Interpolationsfehler

Nun sollen die Stützwerte  $y_j$  Werte einer Funktion  $f$  an den paarweise verschiedenen Stützstellen  $x_j$  sein und wir fragen uns wie gut das IP die Funktion  $f$  zwischen den Stützstellen approximiert.

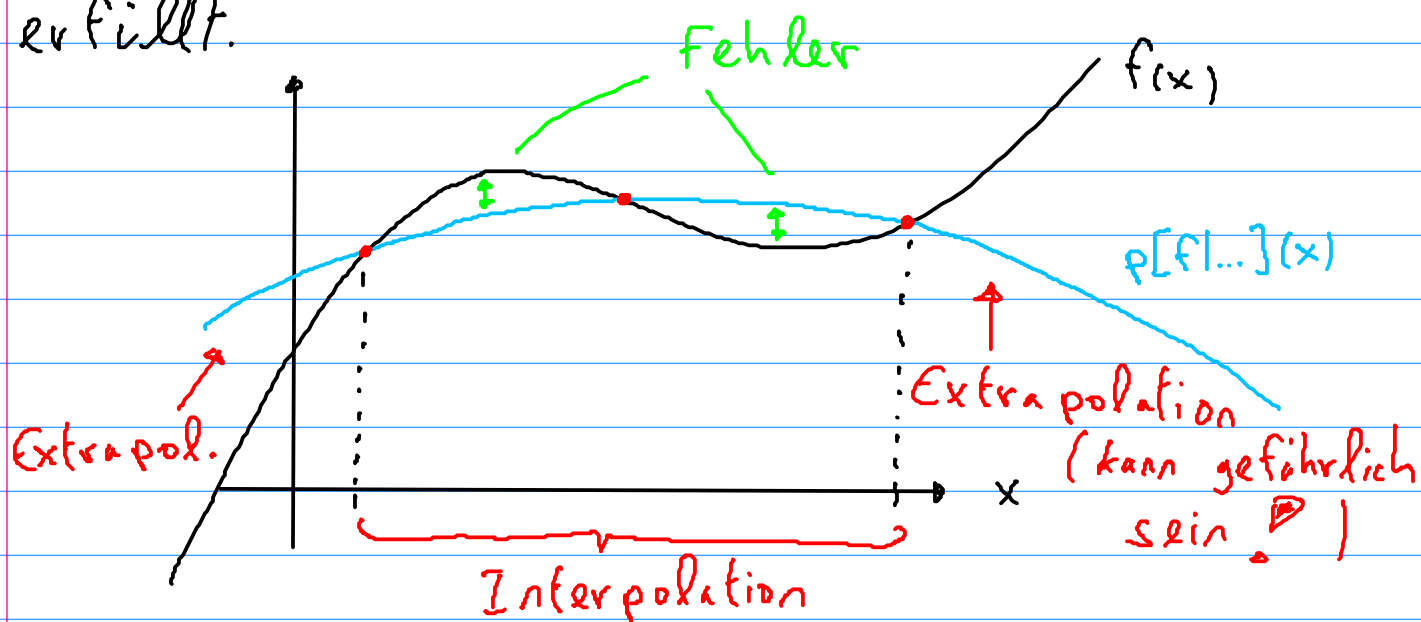
Sei also  $f: I = [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  und wir bezeichnen mit

$$p[f|x_0, \dots, x_n](x) \in \mathbb{P}_n$$

das IP welches die IB

$$p[f|x_0, \dots, x_n](x_j) = f(x_j) \quad (j=0, 1, \dots, n)$$

erfüllt.



Für  $f$   $(n+1)$ -mal stetig differenzierbar lässt sich zeigen, dass es für jedes  $x \in I$  ein  $\xi = \xi(x) \in I$  gibt mit

hängt von  $x$  ab!

$(n+1)$ -te Ableitung

$$e(x) = f(x) - p[f|x_0, \dots, x_n](x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x-x_j)$$

hängt von  $f$  ab den Stützstellen ab

$e(x)$  ist eine Fehlerfunktion über das ganze Intervall  $I$ . Oft ist man (nur) am grössten Fehler über  $I$  interessiert:

$$\|e\|_{\infty} = \max_{x \in I} |e(x)| \quad (\text{Maximumsnorm})$$

$$= \max_{x \in I} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x-x_j) \right|$$

$$\leq \max_{x \in I} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \right| \cdot \max_{x \in I} \left| \prod_{j=0}^n (x-x_j) \right|$$

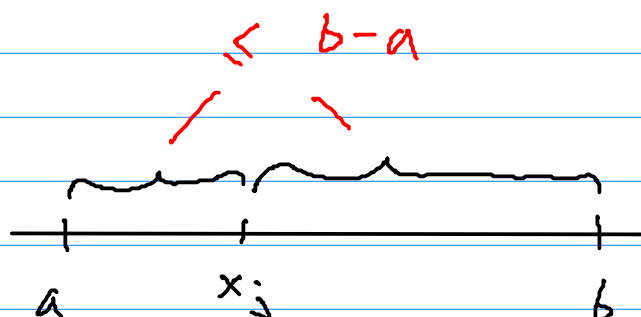
Abschätzung

$$= \frac{\|f^{(n+1)}\|_{\infty}}{(n+1)!} \left\| \prod_{j=0}^n (x-x_j) \right\|_{\infty}$$

$\leq b-a$

$$\leq \frac{\|f^{(n+1)}\|_{\infty}}{(n+1)!} (b-a)^{n+1}$$

Die letzte Abschätzung kann man am besten graphisch verstehen:



Die Aussage "für  $f$   $(n+1)$ -mal stetig differenzierbar" werden wir noch oft sehen.

Man kann auch sagen: -  $f \in C_{n+1}[I]$

weniger  
präzise ...

- $f$  genügend glatt (smooth)
- $f$  genügend oft stetig differenzierbar



## I.3 Numerische Integration = Quadratur

9

Ziel: Approximation von

$$I[f] = \int_a^b f(x) dx$$

berechnen

Idee: Verwende Polynomiale Interpolation um  $f(x)$  zu approximieren und integriere

$$p[f/x_0, \dots, x_n]$$

(... Polynome sind einfach zu integrieren...)

Def.: Eine endliche Rechenvorschrift der Form

$$Q[f] = \sum_{j=0}^n w_j \cdot f(x_j)$$

zur Approx. von  $I[f]$  nennt man

Quadraturregel (QR) oder Quadraturformel.

Die  $x_j \in I = [a, b]$  nennt man (Quadratur) Knoten oder Integrationsstützstellen und die  $w_j$  (Quadratur) Gewichte.

Quadraturregeln können nun ganz einfach hergeleitet werden.

Seien  $x_0, x_1, \dots, x_n \in I$  uns gegebene Knoten.

Dann ist das IP einer Funktion  $f$

$$p[f|x_0, \dots, x_n] = \sum_{j=0}^n f(x_j) \cdot L_j^n(x)$$

Da das IP die Funktion approx., so gilt

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b p[f|x_0, \dots, x_n] dx \\ &= \int_a^b \sum_{j=0}^n f(x_j) \cdot L_j^n(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^n \int_a^b f(x_j) L_j^n(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^n f(x_j) \underbrace{\int_a^b L_j^n(x) dx}_{\text{Konstant!}} \\ &= \sum_{j=0}^n f(x_j) \cdot w_j = Q_n[f] \end{aligned}$$

Die Quadratur Gewichte können also ganz einfach berechnet werden:

$$w_j = \int_a^b L_j^n(x) dx$$

Beachte: Die  $w_j$  sind unabhängig von  $f$ !

D.h. für gegebene Knoten  $x_j$  kann man sie ein für alle Mal berechnen und tabellieren.

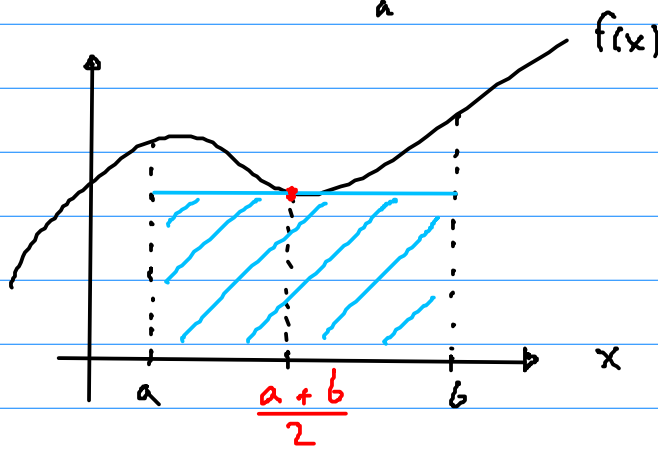
Wichtige Beispiele...

Bsp.: (3) Mittelpunktsregel (MR) ( $n=0$ )

$$\text{Knoten: } x_0 = \frac{a+b}{2}$$

$$\text{LP: } L_0^0(x) = 1$$

$$\text{Gewichte: } w_0 = \int_a^b L_0^0(x) dx = b-a$$



Damit

$$Q_0[f] = (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

(4) Trapezregel (TR) ( $n=1$ )

Knoten:  $x_0 = a$ ,  $x_1 = b$

LP :  $L_j^0(x) = \frac{x-b}{a-b}$

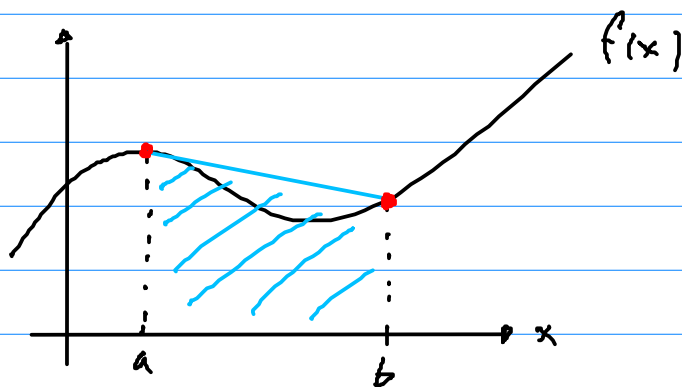
$$L_j^1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

Gewichte:  $w_0 = \int_a^b L_j^0(x) dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b} dx$

$$= \frac{b-a}{2}$$

$$\int_a^b \frac{(x-b)^2}{2(a-b)} dx = \frac{(x-b)^3}{6(a-b)} \Big|_a^b = 0 - \frac{(a-b)^3}{6(a-b)} = -\frac{(a-b)^2}{6}$$

$$w_1 = \dots = \frac{b-a}{2}$$



Damit

$$Q_1[f] = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$$

(s) Simpson-Regel (SR) ( $n=2$ )

Knoten:  $x_0 = a$ ,  $x_1 = \frac{a+b}{2}$ ,  $x_2 = b$

$$LP : L_0^2(x) = \frac{x - \frac{a+b}{2}}{a - \frac{a+b}{2}} \cdot \frac{x - b}{a - b}$$

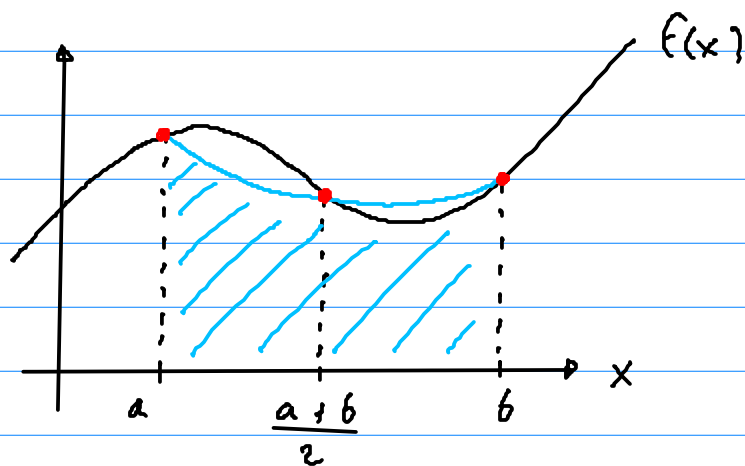
$$L_1^2(x) = \dots$$

$$L_2^2(x) = \dots$$

Gewichte:  $w_0 = \int_a^b L_0^2(x) dx = \dots = \frac{b-a}{6}$

$$w_1 = \dots = \frac{4(b-a)}{6}$$

$$w_2 = \dots = \frac{b-a}{6}$$



Damit

$$Q_2[f] = \frac{b-a}{6} \left( f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

Die  $MR$ ,  $TR$  und  $SR$  sind sog.  
Newton-Cotes (NC) QR<sub>n</sub>.

Bei diesen QR verteilt man die Knoten  $x_j$   
 äquidistant über das Intervall  $I = [a, b]$

$$n=0: x_0 = \frac{a+b}{2}$$

$$n>0: x_j = a + \frac{b-a}{n} j \quad \text{für } j=0, 1, \dots, n$$

Bem.: (i)  $TR$  und  $SR$  gehören zu den  
 "populärsten" QR

(ii) NC QR mit  $n > 6$  werden numerisch  
 unbrauchbar (da negative Gewichte  $w_j$   
 auftreten)

## I.4 Quadraturfehler

Nun interessieren wir uns für die Güte  
 von QR<sub>n</sub>.

Def.: Wir nennen  $E[F] = |Q[F] - I[F]|$   
 den Quadraturfehler (QF).

Im Prinzip könnten wir den QF mit Hilfe  
 des Interpolationsfehler untersuchen... Dies ist  
 jedoch (relativ) "mühsam".

Als ein Maß der Genauigkeit einer QR definieren wir:

Def.: Eine QR hat Genauigkeitsgrad (GG)  $q \in \mathbb{N}$ , falls sie alle Polynome bis zum Grad  $q$  exakt integriert und  $q$  die größtmögliche Zahl mit dieser Eigenschaft ist.  
Manchmal auch Exaktheitsgrad.

Def.: Die Ordnung  $s$  einer QR ist definiert durch  $s = q + 1$ .

Dank der Linearität von  $I[f]$  und  $Q[f]$  kann man den GG einfach bestimmen durch

$$Q[x^k] = I[x^k] \quad k = 0, 1, \dots, q$$

$$Q[x^{q+1}] \neq I[x^{q+1}]$$

$$\begin{aligned} \Gamma \quad p \in \mathbb{P}_q : \quad I[p] &= \int_a^b a_0 + a_1 \cdot x + \dots + a_q \cdot x^q \, dx \\ &= a_0 \int_a^b 1 \, dx + a_1 \int_a^b x \, dx + \dots + a_q \int_a^b x^q \, dx \\ &= a_0 \cdot I[1] + a_1 \cdot I[x] + \dots + a_q \cdot I[x^q] \end{aligned}$$

$$Q[p] = \dots \sim \text{gleich wie für } I[p] \quad \checkmark$$

Eine weitere willkommene Vereinfachung bei der Bestimmung des GG ist, dass man es nur für das Referenz-Intervall (RI)  $I = [-1, 1]$  überprüfen muss. Wieso?

Weil sich jedes Intervall  $[a, b]$  durch die Variablen substitution

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}, \quad t \in [-1, 1]$$

in das RI transformieren lässt:

$$\begin{aligned} I[f] &= \int_a^b f(x) dx \\ &= \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}\right) \underbrace{\frac{b-a}{2} dt}_{dx} \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}\right) dt \end{aligned}$$



Es ist klar, dass NCs  $QR_n$  mindestens den GG des zugrundeliegenden IPs haben. Falls der Grad  $n$  des IPs aber gerade ist, so gewinnt man einen GG gratis dazu aus Symmetriegründen:

Bsp.: (6) MR ( $n=0$ , also gerade)

$$Q_0[f] = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$Q_0[1] = 2 \cdot 1 = I[1]$$

$$Q_0[x] = 2 \cdot 0 = I[x]$$

$$Q_0[x^2] = 2 \cdot 0^2 \neq \frac{2}{3} = I[x^2]$$

$$\leadsto \text{GG } q=1 = n+1$$

(7) TR ( $n=1$ , also ungerade)

$$Q_1[f] = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$$

$$Q_1[1] = \frac{2}{2} \cdot (1 + 1) = 2 = I[1]$$

$$Q_1[x] = \frac{2}{2} \cdot (1 + 1) = 0 = I[x]$$

$$Q_1[x^2] = \frac{2}{2} \cdot (1 + 1) = 2 \neq I[x^2]$$

$$\leadsto \text{GG } q=1 = n$$

(8) SR ( $n=2$ , also gerade)

$$Q_2[f] = \frac{b-a}{6} \left( f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

$$Q_2[1] = \dots$$

⋮

Übung

$$Q_2[x^k] = \dots$$

$$\leadsto \text{GG } q=3 = n+1$$

Für den QF lässt sich zeigen

$$E[f] \leq \frac{\|f^{(q+1)}\|_{\infty}}{(q+1)!} (b-a)^{q+2} \quad \left( \begin{array}{l} \text{GG} \\ \text{(QFA)} \end{array} \right)$$

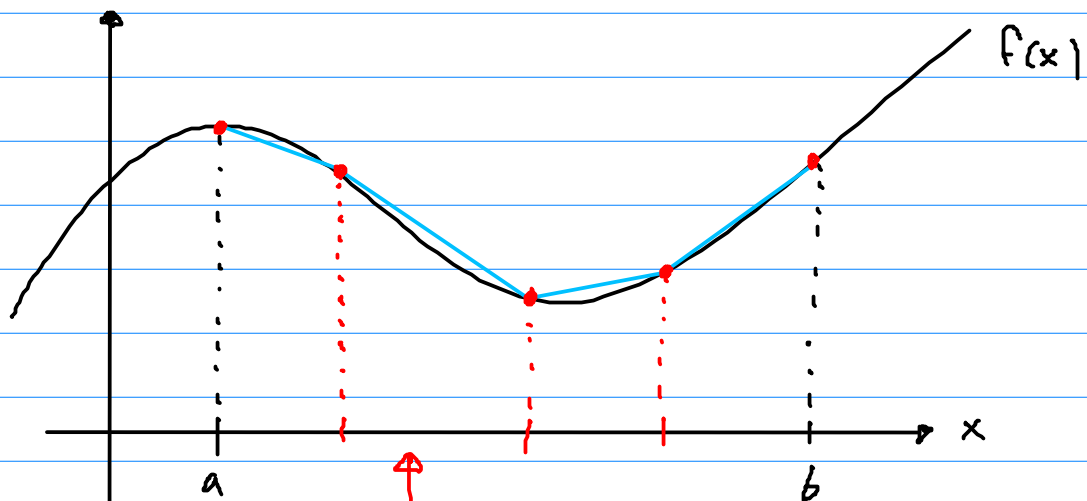
<sup>s</sup> <sup>s+1 - Ordnung</sup>

Bsp.: (9)  $\leadsto$  Slides

Zusammengefasst: Je grösser der GG, desto genauer ist ein QR, vorausgesetzt, das IP ist eine gute Approx. der Funktion f

## I.5 Summierte Quadraturregeln

Um bessere Approximationen von  $I[f]$  zu erhalten benutzt man i.A. eine gegebene QR nicht über das gesamte Intervall  $[a, b]$ . Sondern man zerlegt  $[a, b]$  in eine Reihe kleinere Teil-Intervalle und wendet die QR auf diese an und summiert die so erhaltenen Näherungen für die Teil-Integrale. Die so erhaltenen Formeln nennt man summierte QR (SQR) oder zusammengesetzte QR.



↑ TR auf jedem Teil-Intervall  
und summierte TR (STR)

Das Intervall  $I = [a, b]$  wird in  $N$  Teil-Intervalle  $I_j = [x_{j-1}, x_j]$  ( $j=1, \dots, N$ ) zerlegt mit

$$x_j = a + j \cdot h, \quad j=0, 1, \dots, N$$

und

$$h = \frac{b-a}{N}.$$

Nun wendet man eine gegebene QR auf die Teil-Intervalle an und summiert

Bsp.: (10) Summierte MR (SMR)

$$\begin{aligned} Q_0^N[F] &= \sum_{j=1}^N Q_0[F \text{ auf } I_j] \\ &= \sum_{j=1}^N h \cdot f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) \end{aligned}$$

(11) Summierte TR (SMR)

$$\begin{aligned} Q_1^N[F] &= \sum_{j=1}^N Q_1[F \text{ auf } I_j] \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{h}{2} (f(x_{j-1}) + f(x_j)) \\ &= \frac{h}{2} f(x_0) + h \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{h}{2} f(x_N) \\ &= \frac{h}{2} \left( f(a) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + f(b) \right) \end{aligned}$$

(12) Summierte SR (SSR)

$$Q_2^N[f] = \sum_{j=1}^N Q_2 [f \text{ auf } I_j]$$

$$= \sum_{j=1}^N \frac{h}{6} \left( f(x_{j-1}) + 4 \cdot f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) + f(x_j) \right)$$

$$= \frac{h}{6} \left[ f(a) + 2 \cdot \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + 4 \cdot \sum_{j=1}^N f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) + f(b) \right]$$

Wie verhält sich der QF von SQR<sub>n</sub>?

Der QF einer SQR ist (offensichtlich) die Summe der gemachten Fehler auf jedem Teil-Intervall:

$$\begin{aligned}
 E^N[f] &= \left| I[f] - Q_n^N[f] \right| \\
 &= \left| \sum_{j=1}^N I[f \text{ auf } I_j] - Q_n[f \text{ auf } I_j] \right| \\
 &\leq \sum_{j=1}^N \underbrace{\left| I[f \text{ auf } I_j] - Q_n[f \text{ auf } I_j] \right|}_{E[f \text{ auf } I_j]}
 \end{aligned}$$

$\Delta$ -Ungleichung  
 (Dreieck)  
 $|a+b| \leq |a|+|b|$

GG von  $Q_n$ !

$$\begin{aligned}
 (QF1) &\leq \sum_{j=1}^N \frac{\max_{x \in I_j} |f^{(q+1)}(x)|}{(q+1)!} \underbrace{|x_j - x_{j-1}|}_{h}^{q+2}
 \end{aligned}$$

$\infty$ -Norm über  $I=[a,b]$ !

$$\leq \frac{\|f^{(q+1)}\|_{\infty}}{(q+1)!} h^{q+1} \underbrace{\sum_{j=1}^N h}_{N \cdot h = b-a}$$

Zusammengefasst

$$E^N[f] \leq \frac{\|f^{(q+1)}\|_{\infty}}{(q+1)!} \cdot (b-a) \cdot h^{q+1} = \frac{\|f^{(s)}\|_{\infty}}{s!} \cdot (b-a) \cdot h^s$$

GG
Ordnung

Solche Abschätzungen sind typisch und dazu verwendet man das Landau-Symbol. Man schreibt:

$$e = \mathcal{O}(h^p)$$

Falls

$$|e| \leq C \cdot h^p$$

C & p hängen nicht von h ab!

Für positive Konstanten C und p gilt

für alle  $h > 0$  klein genug.

Für den SQR Fehler gilt also

$$E^N[f] = \mathcal{O}(h^{q+1}) = \mathcal{O}(h^s).$$

Bsp.: (13) → Slides