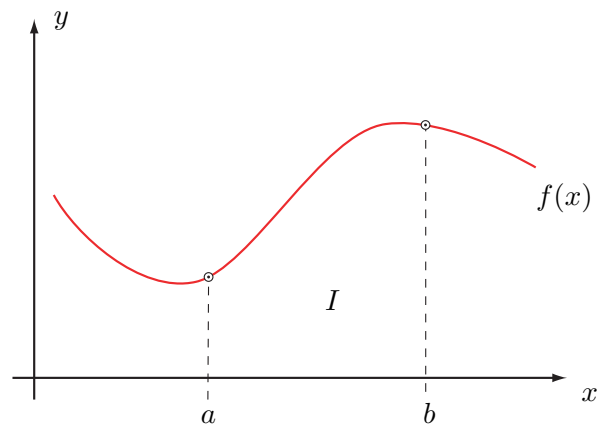

6 Numerische Integration (Quadratur)

In diesem Kapitel geht es um die approximative Berechnung des Wertes eines bestimmten Integrals. Anwendungen sind z.B. die Berechnung von Oberflächen, Volumina, Wahrscheinlichkeiten, aber etwa auch die Methode der finiten Elemente zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen.

Gegeben seien die Funktion $f(x)$ und das Intervall $[a, b]$. Gesucht ist das Integral

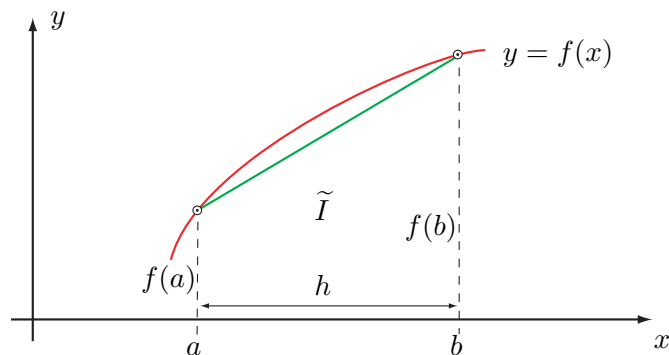
$$I = \int_a^b f(x) dx . \quad (6.1)$$



6.1 Die Trapezmethode

Idee: Approximation des Integralwertes I durch den *Trapezwert* \tilde{I} , d.h. integriere an Stelle der Funktion f das Interpolationspolynom vom Grad ≤ 1 :

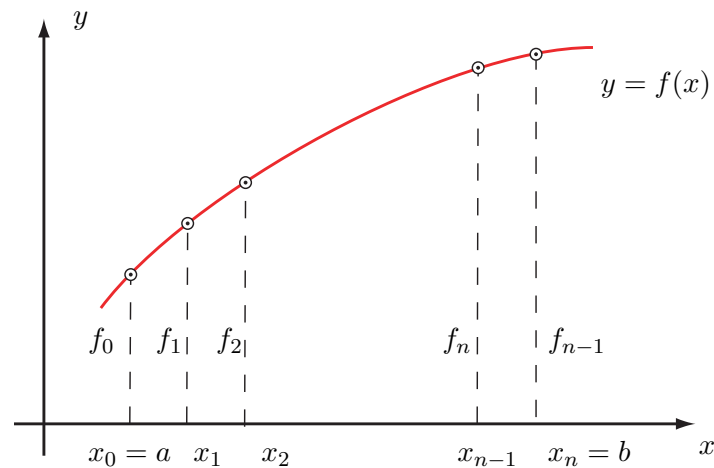
$$h := b - a, \quad \tilde{I} = T := \frac{h}{2}(f(a) + f(b))$$



Verfeinerung:

$$h := \frac{b-a}{n}; \quad n : \text{Anzahl Teilintervalle, } h : \text{Schrittlänge}$$

$$x_j := a + jh, \quad f_j = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, n$$



Trapeznäherung:

$$T_h := \frac{h}{2}[f_0 + f_1] + \frac{h}{2}[f_1 + f_2] + \dots + \frac{h}{2}[f_{n-1} + f_n]$$

$$\tilde{I} = T(h) = h \left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n \right].$$

Es gilt: Falls $|f''(x)| \leq M$ für $x \in [a, b]$, dann ist

$$|I - T(h)| \leq \frac{M}{8}(b-a)h^2.$$

Dies ist also ein Verfahren der Ordnung 2.

Praktische Durchführung mit fortgesetzter Schritthalbierung:

$$h_0 := b - a, \quad h_1 := \frac{h_0}{2}, \quad h_2 := \frac{h_1}{2}, \quad \dots$$

Berechne sukzessive $T_0 := T(h_0)$, $T_1 := T(h_1)$, \dots

Effiziente Berechnung von T_0, T_1, T_2, \dots , d.h. ohne die Funktion f an einer Stelle mehrmals auszuwerten:

$$\begin{aligned} s_0 &= \frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b) & T_0 &= h_0 s_0 \\ s_1 &= s_0 + f(a + h_1) & T_1 &= h_1 s_1 \\ s_2 &= s_1 + f(a + h_2) + f(a + 3h_2) & T_2 &= h_2 s_2 \\ s_3 &= s_2 + f(a + h_3) + f(a + 3h_3) + f(a + 5h_3) + f(a + 7h_3) & T_3 &= h_3 s_3 \\ &\vdots & & \end{aligned}$$

Algorithmus: (Trapezmethode)

$$a, b, h_0 := b - a$$

$$s_0 = \frac{1}{2}(f(a) + f(b)), t_0 = s_0 h_0, N_0 = 1; TOL$$

Für $n = 0, 1, 2, \dots$

$$h_{n+1} = \frac{h_n}{2},$$

$$s_{n+1} = s_n + \sum_{j=1}^{N_n} f(a + (2j - 1)h_{n+1}),$$

$$T_{n+1} = h_{n+1} \cdot s_{n+1}, N_{n+1} = 2N_n$$

Abbruchkriterium:

$$|T_{n+1} - T_n| \leq |T_{n+1}| \cdot TOL + TOL$$

Beispiel:

$$I = \int_0^1 \frac{xe^x}{(x+1)^2} dx = \frac{e-2}{2} = 0.3591409142\dots$$

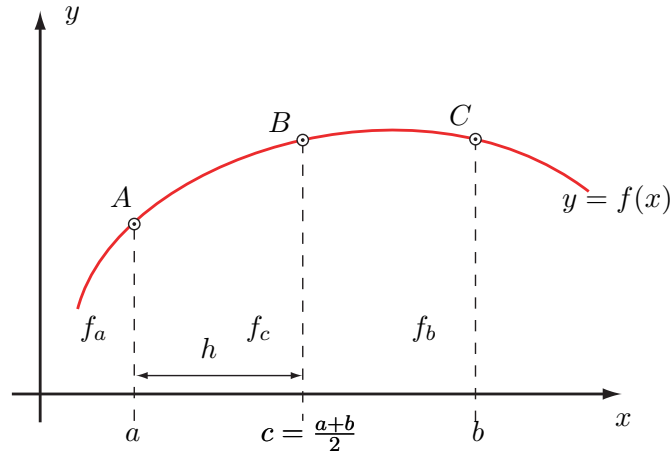
$$T_0 = 0.339785, \quad T_1 = 0.353084, \quad T_2 = 0.357515$$

$$T_3 = 0.358726, \quad T_4 = 0.359037, \quad T_5 = 0.359115$$

$$T_6 = 0.359134, \quad T_7 = 0.359139, \quad \dots$$

Die Konvergenz ist linear und damit im Allgemeinen recht langsam.

6.2 Die Simpson'sche Formel



Grundidee: Lege durch A, B, C eine Parabel und integriere diese (Interpolationspolynom vom Grad ≤ 2).

Sei $P_2(x)$ das Interpolationspolynom, dann gilt:

$$P_2(a) = f_a, P_2(b) = f_b, P_2(c) = f_c.$$

Mit der Substitution

$$x = a + h(t + 1), \quad dx = h dt; \quad h := \frac{b - a}{2},$$

erhalten wir

$$S := \int_a^b P_2(x) dx = h \int_{-1}^1 \underbrace{P_2(a + h(t + 1))}_{=: Q_2(t)} dt.$$

Wir machen den folgenden Ansatz für $Q_2(t)$:

$$Q_2(t) = \alpha t^2 + \beta t + \gamma.$$

Wir wissen, dass folgendes gilt:

$$Q_2(-1) = \begin{cases} \alpha - \beta + \gamma \\ P_2(a) = f_a \end{cases}, \quad Q_2(0) = \begin{cases} \gamma \\ P_2(c) = f_c \end{cases}, \quad Q_2(1) = \begin{cases} \alpha + \beta + \gamma \\ P_2(b) = f_b \end{cases}.$$

Daraus schliessen wir, dass

$$\begin{aligned}\alpha - \beta + \gamma &= f_a & \alpha &= (f_b - 2f_c + f_a)/2 \\ \gamma &= f_c & \text{bzw. } \beta &= (f_b - f_a)/2 \\ \alpha + \beta + \gamma &= f_b & \gamma &= f_c\end{aligned}$$

gelten muss. Daraus folgt

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 Q_2(t) &= \alpha \int_{-1}^1 t^2 dt + \beta \int_{-1}^1 t dt + \gamma \int_{-1}^1 1 dt \\ &= \alpha \frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^1 + \beta \frac{t^2}{2} \Big|_{-1}^1 + \gamma t \Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}\alpha + 2\gamma.\end{aligned}$$

Damit erhalten wir für den sogenannten *Simpsonwert* S :

$$\begin{aligned}S &= \frac{h}{3}(2\alpha + 6\gamma) = \frac{h}{3}(f_b - 2f_c + f_a + 6f_c) \\ &= \frac{h}{3}(f_a + 4f_c + f_b).\end{aligned}$$

Verfeinerung:

$$h := \frac{b-a}{2n}, \quad x_j := a + jh, \quad j = 0, 1, \dots, 2n, \quad f_j := f(x_j)$$

Simpson-Näherung:

$$\begin{aligned}S(h) &:= \frac{h}{3}[f_0 + 4f_1 + f_2] + \frac{h}{3}[f_2 + 4f_3 + f_4] + \dots + \frac{h}{3}[f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_{2n}] \\ \tilde{I} = S(h) &= \frac{h}{3}[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 2f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_{2n}].\end{aligned}$$

Es gilt: Falls: $|f^{(4)}(x)| \leq M$ für $x \in [a, b]$, dann ist

$$|I - S(h)| \leq \frac{M}{180}(b-a)h^4.$$

Dies ist also ein Verfahren der Ordnung 4.

Praktische Durchführung mit fortgesetzter Schritthalbierung:

$$h_0 := b - a, \quad h_1 := \frac{h_0}{2}, \quad h_2 := \frac{h_1}{2}, \quad \dots$$

Berechne sukzessive $S_1 = S(h_1)$, $S_2 = S(h_2)$, \dots

Algorithmus: (Simpson-Methode)

$$a, b, h_0 = b - a; TOL$$

Berechne die Trapeznäherungen mit der Trapez-Methode

$$T_0 = T(h_0), T_1 = T(h_1), T_2 = T(h_2), \dots$$

und bilde

$$S_1 = \frac{4T_1 - T_0}{3}, S_2 = \frac{4T_2 - T_1}{3}, S_3 = \frac{4T_3 - T_2}{3}, \dots$$

Abbruchkriterium:

$$|S_{n+1} - S_n| \leq |S_{n+1}| \cdot TOL + TOL$$

Begründung für $S_{j+1} = (4T_j - T_{j-1})/3$:

$$\begin{array}{rcl} T_1 = T(2h_2) & = & 2h_2[\frac{1}{2}f_0 \quad \quad \quad + f_1 \quad \quad \quad + \frac{1}{2}f_2] \cdot -\frac{1}{3} \\ T_2 = T(h_2) & = & h_2[\frac{1}{2}f_0 + f_{01} + f_1 + f_{12} + \frac{1}{2}f_2] \cdot \frac{4}{3} \\ \hline S_2 = S(h_2) & = & \frac{h_2}{3}[f_0 + 4f_{01} + 2f_1 + 4f_{12} + f_2] \end{array}$$

□

Beispiel:

$$I = \int_0^1 \frac{xe^x}{(x+1)^2} dx = 0.3591409142 \dots$$

$$S_1 = 0.3575167, S_2 = 0.3589923, S_3 = 0.3591302, S_4 = 0.3591402, \dots$$

6.3 Das Romberg-Verfahren

Für die Trapeznäherungen $T(h)$ gilt folgende *asymptotische Entwicklung*:

$$T(h) = I + c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \dots \quad (6.2)$$

Bemerkungen:

- Asymptotische Entwicklung heisst: Zu jedem $j \in \mathbb{N}$ existiert eine Konstante $K_j > 0$, so dass gilt:

$$|T(h) - [I + c_1 h^2 + \dots + c_{j-1} h^{2j-2}]| \leq K_j h^{2j}$$

für $h > 0$ genügend klein.

- $f(x)$ ist hier als beliebig oft differenzierbar vorausgesetzt.

Idee: Benutze die Existenz einer asymptotischen Entwicklung der Form (6.2) für die $T(h)$ zur Elimination der unbekannt Fehlerterme und so zur Konstruktion von Verfahren höherer Ordnung (entspricht der sukzessiven Erhöhung des Grades des Interpolationspolynoms):

$$\begin{array}{rcl} T(h) & = & I + c_1 h^2 + c_2 h^4 + \dots & \cdot - 1 \\ T(\frac{h}{2}) & = & I + \frac{1}{4} c_1 h^2 + \frac{1}{16} c_2 h^4 + \dots & \cdot 4 \\ \hline 4T(\frac{h}{2}) - T(h) & = & 3I + (-\frac{3}{4}) c_2 h^4 + \dots & \end{array}$$

Daraus folgt

$$\frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = I - \frac{1}{4} c_2 h^4 + O(h^6).$$

Wir definieren

$$S(\frac{h}{2}) := \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = \frac{T(\frac{h}{2}) - 4^{-1}T(h)}{1 - 4^{-1}}.$$

$S(\frac{h}{2})$ ist also ein Verfahren der Ordnung 4 und stellt gerade die Simpson-Methode dar.

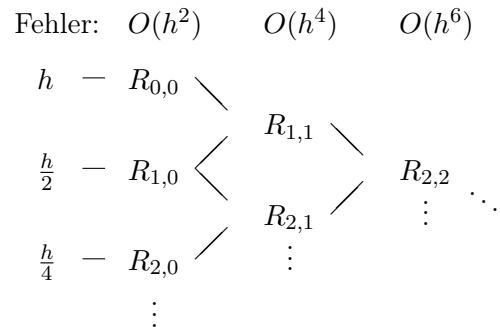
Auf die gleiche Weise lässt sich auch der h^4 -Term eliminieren aus $S(\frac{h}{2})$ und $S(\frac{h}{4})$, usw:

$$\begin{array}{rcl} S(\frac{h}{2}) & = & I - \frac{1}{4} c_2 h^4 + \dots & \cdot - 1 \\ S(\frac{h}{4}) & = & I - \frac{1}{4 \cdot 16} c_2 h^4 + \dots & \cdot 16 \\ \hline 16 S(\frac{h}{4}) - S(\frac{h}{2}) & = & 15 I + O(h^6) & \end{array}$$

Allgemein lässt sich dieses Vorgehen in Form des *Rombergschemas* realisieren. Sei

$$h_0 := b - a, \quad h_1 := \frac{h_0}{2}, \quad h_2 := \frac{h_1}{2}, \dots,$$

und bezeichne $T_j := T(h_j)$ die Trapeznäherung zur Schrittweite h_j . Wir bilden das Schema (zeilenweiser Aufbau):



nach den *Regeln*:

$$R_{j,0} := T_j, \quad j = 0, 1, \dots$$

$$R_{j,k} := \frac{R_{j,k-1} - 4^{-k} R_{j-1,k-1}}{1 - 4^{-k}}, \quad k = 1, 2, \dots, j$$

$$j = 1, 2, \dots$$

Es gilt: Falls in (6.2) alle $c_k \neq 0$ sind, dann konvergiert jede Spalte des Rombergschemas gegen I , und zwar schneller als die vorhergehende. Zudem konvergiert (unter einer zusätzlichen 'natürlichen' Voraussetzung über die K_j) jede Diagonale schneller als jede Spalte.

Bemerkungen:

- Man wird also für eine vorgegebene Toleranz TOL das Schema abbrechen, falls gilt, dass

$$|R_{j,j} - R_{j,j-1}| \leq |R_{j,j}| \cdot TOL + TOL,$$

und $R_{j,j}$ als Approximation für I nehmen.

- Falls $f(x)$ nicht beliebig oft differenzierbar ist, darf man das Schema nicht beliebig weit fortsetzen. In diesem Fall würde das Schema nicht konvergieren. Auch der in jeder Spalte des Schemas sukzessiv höhere Grad des Interpolationspolynoms (bei gleichabständigen Stützstellen) verbietet ein zu grosses Schema. In der Praxis muss man daher auch eine obere Schranke für die Anzahl Eliminationsschritte vorgeben.
- Das Rombergverfahren ist einfach durchzuführen, benötigt aber ziemlich viele Funktionsauswertungen.

Beispiel:

$$I = \int_0^1 \frac{xe^x}{(x+1)^2} dx = \frac{e-2}{2} = 0.3591409142\dots$$

0.339...

0.353... 0.357...

0.357... 0.358... 0.35909...

0.358... 0.35913... 0.35913... 0.3591402...

0.359... 0.3591402... 0.3591408... 0.35914090... 0.359140910

↑

↑

$T(h_j), j = 0, 1, \dots$ $S(h_j), j = 1, 2, \dots$

Bemerkung: Mit fünf Funktionsauswertungen (Trapezwerten) mit maximal drei richtigen Ziffern erhält man durch die (billige) Romberg-Elimination eine Approximation mit acht richtigen Ziffern.

6.4 Gauss'sche Quadraturformeln

Eine allgemeine Formel zur Approximation des Integralwertes I (6.1) (Quadraturformel) ist von der Form:

$$Q_n = \sum_{j=1}^n w_j f_j \quad (n\text{-Punkt-Quadraturformel}),$$

wobei die folgenden Bezeichnungen verwendet werden:

Einteilung von $[a, b]$: $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$

Funktionswerte: $f_1 = f(x_1), \dots, f_n = f(x_n)$

Gewichte: w_1, \dots, w_n .

Bei den bisher betrachteten Quadraturformeln sind wir von vorgegebenen x_j ausgegangen und haben die zugehörigen w_j bestimmt, so dass $Q_n \cong I$. Im folgenden wollen wir sowohl die x_j als auch die w_j so wählen, dass die resultierende Quadraturformel Q_n maximalen Genauigkeitsgrad besitzt. Wir betrachten ohne Einschränkung der Allgemeinheit das Intervall $[-1, 1]$, d.h.

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx.$$

Begründung: Durch die Substitution

$$t = \frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}$$

geht das Integral

$$I = \int_a^b g(t) dt$$

über in

$$I = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 g\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) dx,$$

ist also mit $f(x) := \frac{b-a}{2}g\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right)$ von obiger Form. \square

Eine Quadraturformel kann beurteilt werden nach dem Grad der Polynome, die sie exakt integriert.

Trapezmethode: $T = Q_2 = f(-1) + f(1)$

$$f(x) = a_0x + a_1 : \int_{-1}^1 f(x) dx = 2a_1$$

Da $T = 2a_1$ ist, folgt daraus, dass die Trapezmethode mindestens Polynome ersten Grades exakt integriert.

Simpson-Methode: $S = Q_3 = \frac{1}{3}[f(-1) + 4f(0) + f(1)]$

$$f(x) = a_0x^3 + a_1x^2 + a_2x + a_3 : \int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{2}{3}a_1 + 2a_3$$

Da $S = \frac{2}{3}a_1 + 2a_3$ ist, folgt daraus, dass die Simpson-Methode mindestens kubische Polynome exakt integriert.

Es gilt:

- Der *Genauigkeitsgrad* einer Quadraturformel Q_n ist höchstens $(2n - 1)$.
- Es existiert genau eine Quadraturformel Q_n mit $x_j \in [-1, 1]$, welche den maximalen Genauigkeitsgrad $(2n - 1)$ besitzt. Die x_j sind die Nullstellen des n -ten *Legendre-Polynoms* $P_n(x)$ und die Gewichte sind gegeben durch:

$$w_j = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \left(\frac{x - x_k}{x_j - x_k} \right)^2 dx > 0, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Die Legendre-Polynome erfüllen die Rekursionsformel

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x,$$

$$P_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}xP_k(x) - \frac{k}{k+1}P_{k-1}(x), \quad k \geq 2.$$

Diese Integrationsmethoden mit maximalem Genauigkeitsgrad heissen *Gauss-Quadraturformeln*.

Bemerkungen:

- Die Gausspunkte x_j und die Gewichte w_j können natürlich für jedes n ein für allemal berechnet werden (genügend genau!). Die aus Tabellen entnommenen Werte können dann als Daten in einem Programm vorgegeben werden. (Es gibt aber auch eine einfache Methode, um die x_j und w_j numerisch zu erzeugen).
- Die von null verschiedenen Stützstellen x_j liegen paarweise symmetrisch zum Nullpunkt. Die Gewichte sind für diese Paare gleich. Deshalb muss man nur die nicht negativen x_j mit den zugehörigen w_j angeben.
- Falls der Integrand $f(x)$ an beliebigen Stellen verfügbar ist, sind die Gauss-Quadraturformeln im allgemeinen viel effizienter als beispielsweise das Romberg-Verfahren.

Beispiel:

$$I = \int_0^1 \frac{te^t}{(t+1)^2} dt = \frac{e-2}{2} = 0.3591409142\dots$$

Die Substitution: $t = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(x+1)$ ergibt

$$I = \int_{-1}^1 \frac{(x+1)e^{(x+1)/2}}{(x+3)^2} dx.$$

Gauss-Quadraturformel mit n Punkten:

$$\begin{aligned} n = 2 : & \quad \underline{0.360176745}, \quad n = 3 : \quad \underline{0.359187170}, \\ n = 4 : & \quad \underline{0.359142699}, \quad n = 5 : \quad \underline{0.359140979}, \\ n = 6 : & \quad \underline{0.359140917}, \quad n = 7 : \quad \underline{0.359140914}. \end{aligned}$$

Bemerkungen:

- Für gleichviele Stellen wie $n = 6$ braucht man mit dem Rombergverfahren 17 Funktionsauswertungen (5 Elemente in der ersten Spalte) plus 4 Eliminations-schritte. Allerdings muss man bei der Gauss-Quadratur für die Fehlerschätzung den Aufwand ziemlich vergrößern.
- Der Wert der Gauss-Quadraturformel mit n Knoten x_j entspricht dem Integral von -1 bis 1 über das Integrationspolynom $P_{n-1}(x)$ durch die Stützpunkte $(x_j, f(x_j))$. Ein hoher Polynomgrad ist jedoch kein Problem, da nicht gleichab-ständige Stützstellen benutzt werden.