6 Numerische Integration

auch: „numerische Quadratur".
Wir behandeln die numerische Berechnung bestimmter Integrale in einer Raumdimension:

$$I_{[a,b]} = \int_a^b f(x)\,dx.$$

Alle von uns behandelten Verfahren führen auf folgende Form

$$I^{(n)}_{[a,b]}(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) + \text{Fehler}.$$

Hierbei sind

$w_i \in \mathbb{R}$ die Gewichte und

$x_i \in \mathbb{R}$ die Stützstellen.

6.1 Newton-Cotes Formeln

sind sog. interpolatorische Quadraturformeln.
Idee: Stelle Interpolationspolynom p zu gewissen Stützstellen auf und berechne das Integral über p exakt.

Formel: Stützstellen $(x_i, f(x_i))$ $i = 0, \dots, n$

Interpolationspolynom in Lagrange-Darstellung

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i^{(n)}(x) \qquad L_i^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

also

$$I_{[a,b]}(f) \approx I^{(n)}_{[a,b]}(f) = \int_a^b p_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx \qquad (6.1)$$

Bevor wir explizite Formeln für die w_i angeben noch eine

Definition 6.1 (Ordnung einer Quadraturformel)

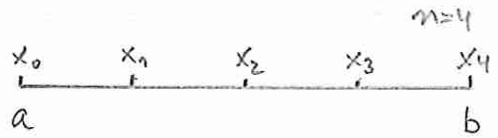
Eine Quadraturformel $I^{(n)}(f)$ hat mindestens die Ordnung m, wenn sie Polynome vom Grad $m-1$ exakt integriert. ☒

- Hier: $n+1$ Stützstellen $\Rightarrow$ Polynom vom Grad n exakt $\Rightarrow$ Ordnung mind. ~~n~~ $n+1$.
- Später: Bei geschickter Wahl der Stützstellen max. Ordnung $2n+2$ bei $n+1$ Stützst.
- Für $f \equiv 1$ gilt $p \equiv 1$ und damit $\int_a^b 1\,dx = b-a = \sum_{i=0}^{n} w_i$.

Newton-Cotes-Formeln nutzen <u>äquidistante</u> Stützstellen:

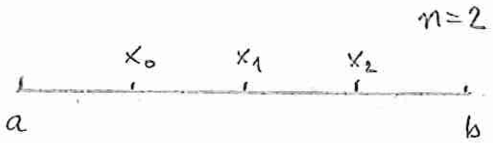
<u>Variante a)</u> Abgeschlossene Formeln: $a, b \in$ Stützstellen

Beachte $n = \#\text{Stützstellen} - 1$



$$x_i = a + iH \qquad i = 0, \dots, n, \qquad H = \frac{b-a}{n}.$$

<u>Variante b)</u> Offene Formeln: $a, b \notin$ Stützstellen



$$x_i = a + (i+1)H \qquad i = 0, \dots, n, \qquad H = \frac{b-a}{n+2}.$$

Berechnung der Gewichte (abgeschlossene Form.):

$$I^{(n)}(f) \overset{(6.1)}{=} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx = (b-a) \sum_{i=0}^{n} \underbrace{\left(\frac{1}{b-a} \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx \right)}_{=: w_i \text{ unabhängig von } a,b!} f(x_i)$$

fehlt oben! $\rightarrow$, $H = \frac{b-a}{n}$, $(s = 0 \dots n)$

Mittels Substitution $x = g(s) = a + sH \Rightarrow s = g^{-1}(x) = \frac{x-a}{H}$, $g'(s) = H$ ergibt sich:

$$w_i = \frac{1}{b-a} \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx = \frac{1}{b-a} \int_{g^{-1}(a)}^{g^{-1}(b)} L_i^{(n)}(\underbrace{a+sH}_{g(s)}) \underbrace{g'(s)}_{=H}\,ds$$

$$= \frac{1}{b-a} \underbrace{\frac{b-a}{n}}_{H} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{[a+sH - \overbrace{(a+jH)}^{x_j}]}{[\underbrace{a+iH}_{x_i} - (a+jH)]}\,ds$$

$$= \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{s-j}{i-j}\,ds.$$

Berechnet man diese Gewichte so erhält man:

a) Abgeschlossene Formeln $n = 1, 2, 3$, $H = \frac{b-a}{n}$

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\left\{ f(a) + f(b) \right\}$$ Trapez, Sehnen-Trapezregel

$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{6}\left\{ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right\}$$ Simpsonregel / Keplersche Fassregel

$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{8}\left\{ f(a) + 3f(a+H) + 3(b-H) + f(b) \right\}$$ $\frac{3}{8}$-Regel

b) Offene Formeln $n = 0, 1, 2$, $H = \frac{b-a}{n+2}$

$$I^{(0)}(f) = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$ Mittelpunkt, Tangenten-Trapez, Rechteckregel

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\left\{ f(a+H) + f(b-H) \right\}$$

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

Bemerkung 6.2

Ab $n=7$ für abgeschlossene und $n=2$ für offene Formeln treten negative Gewichte w_i auf. Dies ist ungünstig weil

- Für $f(x) \geq 0 \; \forall x$ garantieren positive w_i dass $I^{(n)}(f) \geq 0$, sonst nicht.
- Erhöhte Gefahr der Auslöschung
- Konditionierung wird schlechter: weglassen!
  Sei $\tilde{f}(x_i) = f(x_i) + \Delta y_i$ mit $|\Delta y_i| \leq \varepsilon$ so gilt:
  $$I^{(n)}(\tilde{f}) = \sum_{i=0}^{n} w_i (f(x_i) + \Delta y_i) = I^{(n)}(f) + \sum_{i=0}^{n} w_i \Delta y_i$$
  also
  $$\left| I^{(n)}(\tilde{f}) - I^{(n)}(f) \right| = \left| \sum_{i=0}^{n} w_i \Delta y_i \right| \leq \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |w_i|$$
  Sind alle w_i positiv so gilt $\sum_{i=0}^{n} |w_i| = \sum_{i=0}^{n} w_i = b-a$.
  Sonst kann Kondition schlechter werden.

Satz ~~6~~.3 (Restglieder)

Den begangenen Fehler kann man folgendermaßen abschätzen:

(i) Trapezregel

$$I(f) - \frac{b-a}{2}\{f(a)+f(b)\} = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi), \quad f \in C^2[a,b].$$

(ii) Simpson-Regel

$$I(f) - \frac{b-a}{6}\left\{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right\} = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi), \quad f \in C^4[a,b].$$

(iii) Mittelpunktregel:

$$I(f) - (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi), \quad f \in C^2[a,b].$$

Wobei $\xi \in [a,b]$.

Beweis:

$$\int_a^b f(x) - p_n(x)\, dx \overset{\text{I-Fehler}}{=} \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\eta(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x-x_j)\, dx$$

Speziell für die Trapezregel gilt ($n=1$)

$$I(f) - I^{(1)}(f) = \frac{1}{2} \int_a^b f''(\eta(x)) \underbrace{(x-a)(x-b)}_{=: g(x) \leq 0} dx$$

Mittelwertsatz der Integralrechg. $\longrightarrow$ $$= \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-a)(x-b)\, dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi), \; \xi \in [a,b].$$

Er fordert $g(x) \geq 0$ oder $g(x) \leq 0$ (Erweiterung von $\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b-a)$ für ein $\xi \in [a,b]$, d.h. $g \equiv 1$)

Die beiden anderen Fälle sind etwas schwieriger wg. Vorzeichenwechsel von g, siehe Rannacher. ∎

- Mittelpunktregel hat den halben Fehler der Trapezregel bei nur einer Auswertung von f (teuer).
- Restglieder haben immer die typische Form $c\,(b-a)^{m+1} f^{(m)}(\xi)$ — Kopplung!

7.2 Summierte Quadraturformeln

Erhöhen des Polynomgrades ist wenig sinnvoll, da
- negative Gewichte auftreten
- Lagrange-Interpol. mit äquidist. Stützstellen nicht punktweise konvergiert
- Entsprechende Differenzierbarkeit von f gegeben sein muss ← ist alles gekoppelt

Idee: - Unterteile $[a,b]$ in N Teilintervalle

$$[x_i, x_{i+1}] \quad x_i = a + ih, \; i = 0, \dots, N-1, \; h = \frac{b-a}{N}$$

- Wende eine der Obigen Formeln in jedem Teilintervall an.
- Das Ergebnis nennt man „summierte Quadraturformel".

Satz 6.4 (Restglied für summierte Quadraturen)

Für die je Teilintervall verwendete Quadraturformel gelte

$$I_{[x_i,x_{i+1}]}(f) - I^{(n)}_{[x_i,x_{i+1}]}(f) = \alpha_n h^{m+2} f^{(m+1)}(\xi_i), \; \xi_i \in [x_i, x_{i+1}].$$

α_n unabh. von $[x_i, x_{i+1}]$

Dann gilt für die summierte Quadraturformel

$$I(f) - I_h^{(n)}(f) = \alpha_n (b-a) h^{m+1} f^{(m+1)}(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

$[a,b]$ weglassen. summierte Formel

Trapezregel: $n = m = 1$, also $O(h^2)$. Die Ordnung ist (mind.) 2 (dies motiviert die Def. der Ordnung).

Simpson: $n = 2$, $m = 3$, also $O(h^4)$. Die Ordnung ist mindestens 3 (Pol. v. grad 2) Frage: integriert das viell. Pol. v. Grad 3 exakt

Beweis: Zwischenwertsatz aus der Analysis:
Sei $g(x)$ stetig auf $[\alpha, \beta]$ dann $\exists$ zu jedem $u \in [\min(g(\alpha), g(\beta)), \max(g(\alpha), g(\beta))]$ mind. ein $\eta \in [\alpha, \beta]$ mit $g(\eta) = u$.

Aus dem Zwischenwertsatz folgt: Sei $\xi_i \in [a,b]$, $i = 0, \dots, N-1$ und g stetig auf $[a,b]$. Dann nimmt g jeden Wert zwischen $\min_i g(\xi_i)$ und $\max_i g(\xi_i)$ an.

Wegen $\min_i g(\xi_i) \le \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} g(\xi_i) \le \max_i g(\xi_i)$ existiert $\xi \in [a,b]$ mit $\sum_{i=0}^{N-1} g(\xi_i) = N g(\xi)$

Also: $I(f) - I_h^{(n)}(f) \overset{\text{Vor.}}{=} \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_n h^{m+2} f^{(m+1)}(\xi_i) = \alpha_n h^{m+2} \sum_{i=0}^{N-1} f^{(m+1)}(\xi_i) = \alpha_n h^{m+2} N f^{(m+1)}(\xi)$

$$\overset{h = \frac{b-a}{N}}{\longrightarrow} = \alpha_n h^{m+2} \frac{b-a}{h} f^{(m+1)}(\xi) = \alpha_n (b-a) h^{m+1} f^{(m+1)}(\xi).$$

$\square$

Beispiele für summierte Formeln: 6 | 19.01.10

(i) Summierte Trapezregel

$$I_h^{(1)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\overbrace{x_{i+1}-x_i}^{=h}}{2} \left\{ f(x_i) + f(x_{i+1}) \right\} = h \left\{ \frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2} \right\}.$$

$$I(f) - I_h^{(1)}(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

(ii) Summierte Simpson Regel

$$I_h^{(2)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\overbrace{x_{i+1}-x_i}^{=h}}{6} \left\{ f(x_i) + 4 f\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right\} = h \left\{ \frac{f(a)}{6} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{f(x_i)}{3} + \frac{2}{3} \sum_{i=0}^{N-1} f\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right) + \frac{f(b)}{6} \right\}$$

$$I(f) - I_h^{(2)}(f) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

(iii) Summierte Mittelpunktregel

$$I_h^{(0)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1}-x_i) f\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right) = h \sum_{i=0}^{N-1} f\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right)$$

$$I(f) - I_h^{(0)}(f) = \frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Übung: Man zeige folgende Formeln:

$$\underbrace{I_h^{(2)}(f)}_{\substack{\text{Simpson} \\ O(h^4)}} = \underbrace{\frac{1}{3} I_h^{(1)}(f)}_{\text{Trapez}} + \underbrace{\frac{2}{3} I_h^{(0)}(f)}_{\text{Mittelpunktregel}}$$

je $O(h^2)$

$$I_{h/2}^{(1)} = \frac{1}{2} I_h^{(1)} + \frac{1}{2} I_h^{(0)}(f)$$

halbe Gitterweite

Diese Formeln können zur Fehlerkontrolle verwendet werden.

$|I(f) - I_h(f)| \leq TOL.$

Beispiel 6.5 (Zur Quadratur)

Siehe Rechner.

6.3 Quadraturen höherer Ordnung

Wie gesehen ist mit Newton-Cotes maximal $n=7$ ($n=2$, offen) sinnvoll.

Wie erreicht man höhere Ordnung?

Romberg-Integration (= Extrapolation zum Limes mit Trapezregel)

Mit den summierten Formeln ist man an $\lim_{h\to 0} I_h^{(n)}(f)$ interessiert. Extrapolation zum Limes ist anwendbar.
Herzstück ist die Euler-Maclaurinsche Summenformel:

$$I(f) - \underbrace{I_h^{(1)}(f)}_{\text{Trapezsumme!}} = \sum_{n=1}^{m} h^{2k} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right)$$
$$+ h^{2m+2} \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}(b-a) f^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Die Trapezsumme hat also eine Fehlerentwicklung in geraden Potenzen.
Damit ist die Extrapolation besonders effizient.
B_i: Bernoulli Zahlen.

Gauß-Integration

Frage: Lässt sich die Genauigkeit von Quadraturformeln durch nichtäquidistante Stützstellen verbessern?

Idee: Wähle w_i, x_i so dass Polynome von möglichst hohem Grad exakt integriert werden (Ordnungsmaximierung).

Satz 6.6 Die ~~maximale~~ erreichbare Ordnung einer Quadraturformel mit $n+1$ Stützstellen ist $2n+2$ (d.h. Polynome vom Grad $2n+1$ werden exakt integriert).

Beweis: Ang. man könnte Polynome vom Grad $2n+2$ bei $n+1$ Stützst. exakt integrieren (Ordng $2n+3$). Betrachte

$$q(x) = \prod_{i=0}^{m} (x-x_i)^2$$

- $q(x)$ hat Grad $2n+2$
- $q(x) \geq 0 \ \forall x$ und $q(x) \not\equiv 0$ also $\int_{-1}^{1} q(x)\,dx > 0$
- Andererseits: $q(x_i) = 0$ und damit $\sum_{i=0}^{m} q(x_i) w_i = 0$, d.h. q wird nicht exakt integriert ↯ ∎.

Die maximal mögliche Ordnung wird mit der Gauß-Quadratur erreicht:

Satz 7.7 (Gauß-Quadratur)

Es gibt genau eine interpolatorische Quadraturformel zu $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen in $[-1,1]$ mit der Ordnung $2n+2$.
Ihre Stützstellen sind die Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1,1)$ des $(n+1)$-ten Legendrepolynoms L_{n+1}

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x, \quad L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1}(x).$$

Die Gewichte erhält man mittels

$$w_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \left(\frac{x-\lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j} \right)^2 dx > 0 \qquad i = 0, \dots, n.$$

Bem: Die Legendrepolynome bilden Orthogonalsystem $\int_{-1}^{1} L_n(x) L_m(x) = 0$ $n \neq m$.

Beispiele: $h = \frac{b-a}{2}$, $c = \frac{b+a}{2}$

$\underline{n=1}$: $I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2} \left\{ f(c - \sqrt{1/3}\,h) + f(c + \sqrt{1/3}\,h) \right\}$ Ordnung 4

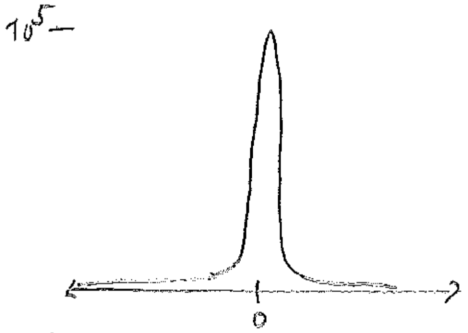
$\underline{n=2}$. $I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{18} \left\{ 5 f(c - \sqrt{3/5}\,h) + 8 f(c) + 5 f(c + \sqrt{3/5}\,h) \right\}$ Ord. 6.

Entsprechend lassen sich summierte Formeln definieren.

7.4 Ausblick

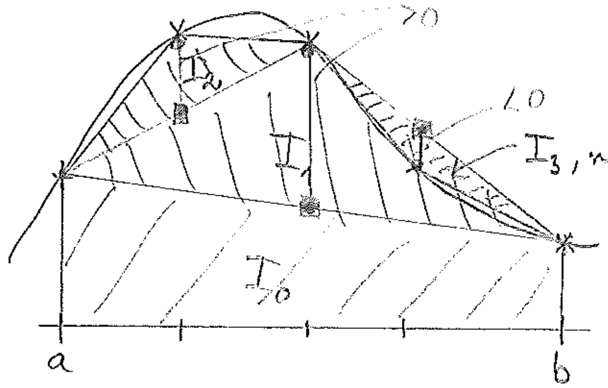
Adaptive Quadratur

Betr. $f(x) = \dfrac{1}{10^{-5}+x^2}$



Summierte Quadratur mit fester Schrittweite ineffizient.

Prinzip von Archimedes:



1) $I(f) = I_0 + I_1 + I_2 + \ldots\ldots$

2) Breche rekursive Unterteilung ab falls $|I_j|$ klein genug.

Mehrdimensionale Quadratur

Die Welt ist nicht eindimensional.

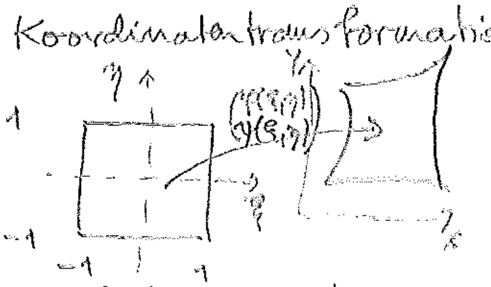
Für Rechtecke ($d=2$), Quader ($d=3$), ... lassen sich obige Formeln leicht erweitern:

$$\int_c^d \int_a^b f(x,y)\,dx\,dy \approx \int_c^d \sum_{i=0}^n f(x_i,y)\,w_i\,dy = \sum_{i=0}^n \int_c^d f(x_i,y)\,dy\; w_i$$

$$\approx \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n f(x_i,y_j)\underbrace{w_i\,w_j}_{=w_{ij}}$$

Allerdings sind nicht alle Gebiete Rechtecke (anders als in 1D!)

Koordinatentransformation:



„Einheitsrechteck"

Abb $\begin{pmatrix}\varphi(\xi,\eta)\\ \psi(\xi,\eta)\end{pmatrix} : [-1,1]\times[-1,1] \to \Omega \subset \mathbb{R}^2$

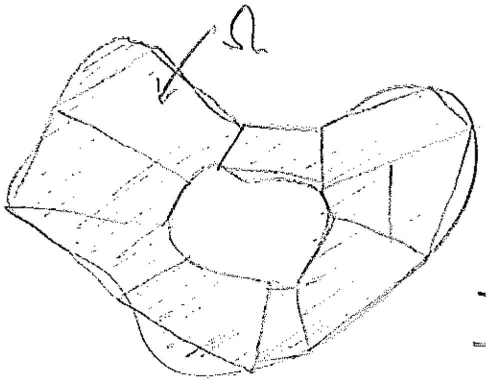
$$\int_\Omega f(x,y)\,dx\,dy = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} f(\varphi(\xi,\eta),\psi(\xi,\eta))\left|\frac{\partial(\varphi,\psi)}{\partial(\xi,\eta)}\right| d\xi\,d\eta$$

$$\left|\frac{\partial(\varphi,\psi)}{\partial(\xi,\eta)}\right| = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial\xi}(\xi,\eta) & \frac{\partial\psi}{\partial\xi}(\xi,\eta) \\ \frac{\partial\varphi}{\partial\eta}(\xi,\eta) & \frac{\partial\psi}{\partial\eta}(\xi,\eta) \end{bmatrix}$$

Transponierte Jacobimatrix.

Summierte Formeln in mehreren Raumdimensionen.

Bei komplexeren, z. B. Gebieten mit Löchern reicht das nicht



- Zerlegung in Teilgebiete die sich auf Rechtecke transformieren lassen.
  „Gittergenerierung" nicht trivial und schwierig automatisch" zu machen
- Erfordert Beschreibung des Gebietes Ω.
- Zusätzlicher Geometriefehler durch nicht exakte Approximation der Geometrie

- Man kann auch Simplizes (= Dreieck, Tetraeder) zur Unterteilung verwenden

Fluch der Dimension

Ist d sehr groß so sind die hier behandelten Methoden nicht brauchbar.

Betrachte $\Omega = [0,1]^d$. Zerlegt man $[0,1]$ in zwei Teilintervalle je Richtung so hat man den d-dimensionalen Würfel in $\underline{2^d}$ Teilwürfel zerlegt.

$\Rightarrow$ Der Aufwand steigt exponentiell in d an. Dies bezeichnet man als „Fluch der Dimension".

Eine Möglichkeit ist dann die Monte-Carlo Integration

$$I(f) \approx \frac{C}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i) \quad \text{mit Zufallszahlen } \xi_i \in \Omega.$$