12. Großübung

Numerische Integration / Quadratur

Newton-Cotes-Formeln

Allgemeines Problem:

Es soll ein Integral zu einer zugehörigen Funktion angenähert werden.

$$\int_c^d f(x)\,dx = ?$$

Idee:

Nutze Polynominterpolation um Funktionsverlauf durch analytisch integrierbares Polynom anzunähern. s. $\boxed{\text{Folie 10.8}}$, $\boxed{\text{Folie 10.9}}$
Resultat Integrationsformel der Form:

$$I_m(f) = (h) \sum_{i=0}^{m} c_i f(x_i)$$

Newton-Cotes:

Exaktheit für Polynome bis zum Grad m wird verlangt. Stützstellen äquidistant: $x_i = c + \frac{i}{m}(d-c), i = 0, .., m$
Das Lagrange-Fundamentalpolynom l_{im} ist vom Grad m, muss also auch exakt integriert werden, d.h. es muss gelten:

$$I_m(l_{im}) = (h) \sum_{j=0}^{m} c_j \underbrace{l_{im}(x_j)}_{=\delta_{ij}} = (h) c_i \cdot 1 \stackrel{!}{=} \int_c^d l_{im}(x)\,dx$$

Damit kann c_i einfach ausgerechnet werden.

Eigenschaften Newton-Cotes:

- äquidistante Stützstellen
  $\rightarrow$ einfache Berechnung der (normierten) Stützstellen (x_i)
  $\rightarrow$ einfache Berechnung der Gewichte (c_i)

- exakt für Polynome von Grad m (bzw. $m+1$)
- Gewichte sind nicht immer positiv (nur für $m \leq 8$)

Fehlerabschätzung:

Wir benutzen die Fehlerabschätzung für Interpolationspolynome

$$\max_{x\in[c,d]} |f(x) - P(f|x_0,..,x_m)(x)| \leq \max_{x\in[c,d]} \left|\prod_{j=0}^{m}(x-x_j)\right| \cdot \max_{\xi\in[c,d]} \left|\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\right|$$

Hiermit können wir folgern (grobe Abschätzung):

$$\begin{aligned}
\left|I_m(f) - \int_c^d f\,dx\right| &\leq \int_c^d |f(x) - P(f|x_0,..,x_m)(x)|\,dx \\
&\leq \int_c^d \left|\prod_{j=0}^{m}(x-x_j)\right| \cdot \max_{\xi\in[c,d]} \left|\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\right| dx \\
&\leq \left(\int_c^d \underbrace{\left|\prod_{j=0}^{m}(x-x_j)\right|}_{\leq h^{m+1}} dx\right) \cdot \max_{\xi\in[c,d]} \left|\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\right| \\
&\leq \frac{h^{m+2}}{(m+1)!} \max_{\xi\in[c,d]} \left|f^{(m+1)}(\xi)\right|
\end{aligned}$$

Genauere Analyse für spezielle Integrationsformel liefert schärfere Abschätzungen. Beachte: Integrationsregeln mit Exaktheitsgrade m, wobei m gerade, haben auch Exaktheitsgrad $m+1$, wenn die Integrationsregel symmetrisch ist (Newton-Cotes-Regeln sind symmetrisch).

Folie 10.10

Beispiel 1:

$$I = \int\limits_1^3 \underbrace{xe^{-x^2}}_{f(x)} dx = ?$$

analytisch (zum Vergleich):

$$\underset{dy=2x\ dx}{\overset{y=x^2}{\rightarrow}} \int\limits_1^9 xe^{-y} \frac{dy}{2x} = -\frac{1}{2}[e^{-y}]_1^9 = 0.183878015684$$

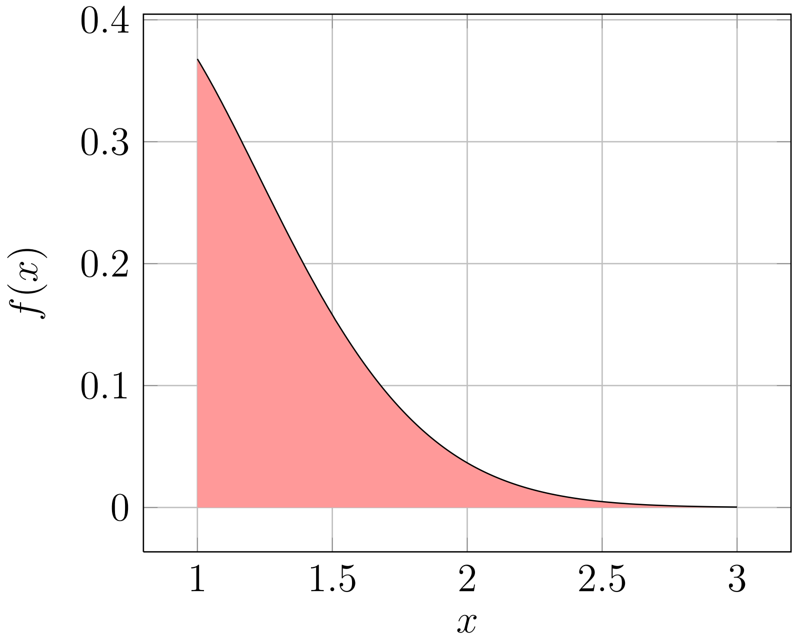

Abbildung 1: Beispiel 1: Funktion und Fläche unter der Kurve $\int_C^d f\,dx$.

$$\Rightarrow c = 1, d = 3, h = d - c = 2$$

$$
\begin{aligned}
f(x) &= g(x) \cdot e^{-x^2} \quad \Rightarrow \quad f'(x) = (g'(x) - 2x \cdot g(x))e^{-x^2} \\
f'(x) &= (1 - 2x^2)e^{-x^2} \\
f''(x) &= 2x(2x^2 - 3)e^{-x^2} \\
f'''(x) &= -2(4x^4 - 12x^2 + 3)e^{-x^2} \\
f^{(4)}(x) &= 4x(4x^4 - 20x^2 + 15)e^{-x^2} \\
f^{(5)}(x) &= -4(8x^6 - 60x^4 + 90x^2 - 15)e^{-x^2}
\end{aligned}
$$

Mittelpunktsregel: ($m = 0$, $c_0 = 1$, $x_0 = c + \xi_0 h$, $\xi_0 = \frac{1}{2}$)

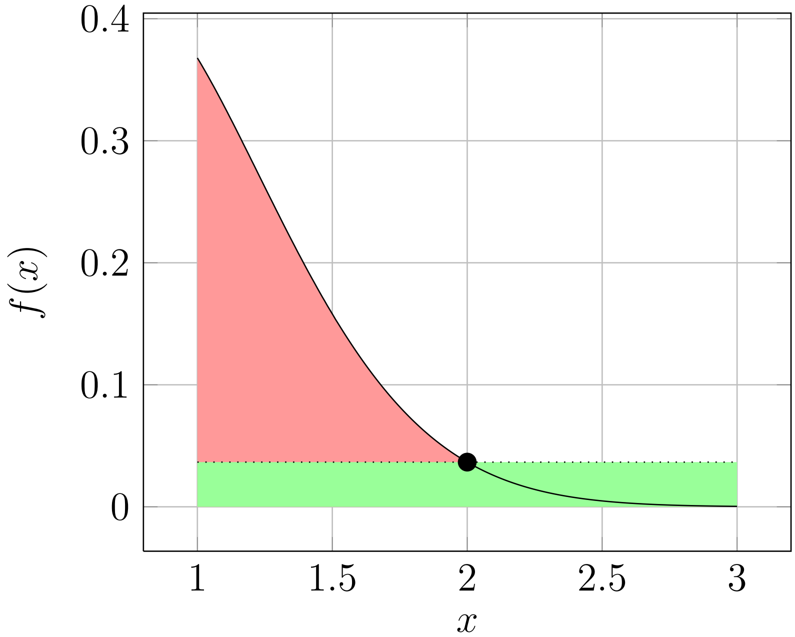

Abbildung 2: Beispiel 1. Zunächst Interpolation mit konstanter Funktion und dann Integration selbiger.

$$
\begin{aligned}
x_0 &= c + h\xi_0 = 1 + 2 \cdot \frac{1}{2} = 2 \\
I_0 &= h \cdot \underbrace{c_0}_{1} \cdot f(x_0) = 2 \cdot f(2) = 0.07326...
\end{aligned}
$$

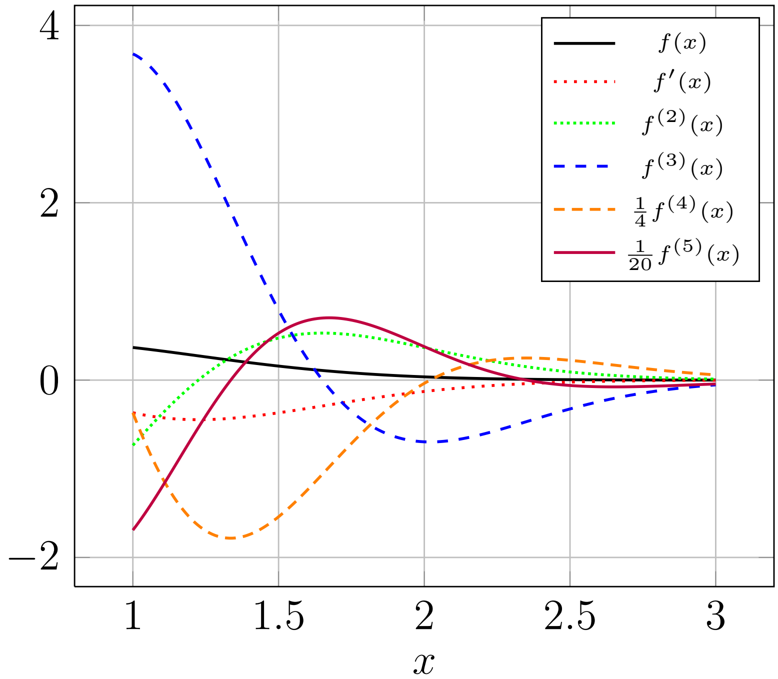

Abbildung 3: Beispiel 1: Ableitungen von f im betrachteten Intervall $[1, 3]$.

Fehlerabschätzung:

$$|I_0 - I| \leq \frac{1}{24} h^3 \|f''\|_\infty, \quad \text{wobei} \|f\|_\infty = \max_{x \in [c,d]} |f(x)|$$

$\max_{x \in [c,d]} |f''(x)| = ?$
→ Extremwertsuche:

$$0 \stackrel{!}{=} f^{(3)}(x) \stackrel{y=x^2}{\Rightarrow} 4y^2 - 12y + 3 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow y_{1,2} = \frac{3}{2} \pm \sqrt{(\frac{3}{2})^2 - \frac{3}{4}} = \begin{cases} 2.725 \\ 0.275 \end{cases}$$

$\Rightarrow x_{1,2} = \pm 1.651,\ x_{3,4} = \pm 0.5246 \notin [c, d]$

$$|f''(x_{1,2})| = 0.5302$$

Randwerte:

$$
\begin{aligned}
|f''(c)| &= 0.7358,\ \ |f''(d)| = 0.011 \\
\Rightarrow &\|f''\|_\infty = 0.7358..
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow &|I_0 - I| \leq \frac{8}{24} \cdot 0.7358.. = 0.2452... \\
&\text{tatsächlicher Fehler: } |0.07326... - 0.1838...| = 0.1106...
\end{aligned}
$$

Trapezregel: ($m = 1$, $c_0 = c_1 = \frac{1}{2}$, $x_0 = c$, $x_1 = d$, $\xi_0 = 0$, $\xi_1 = 1$)

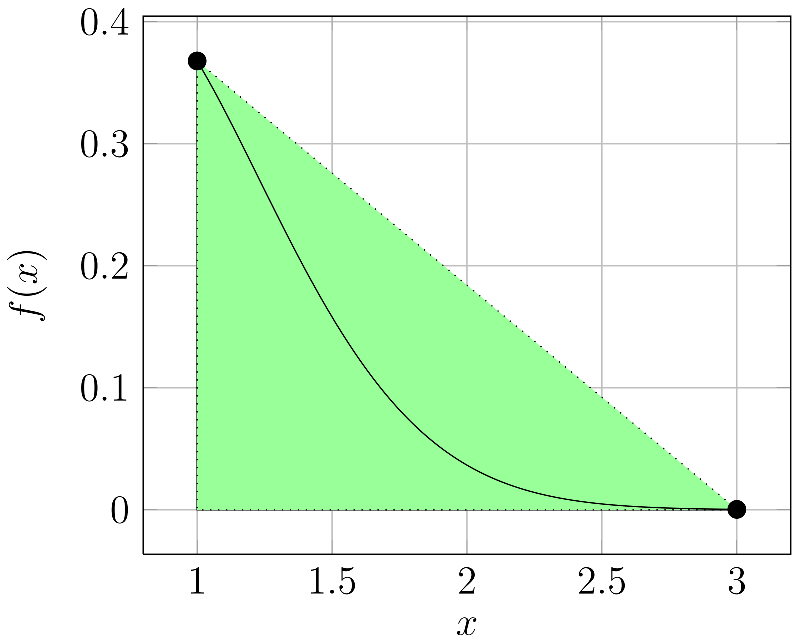

Abbildung 4: Beispiel 1: Interpolation mit linearer Funktion und Integration selbiger.

$$
\begin{aligned}
x_0 &= c + h\xi_0 = 1 + 2 \cdot 0 = 1 \\
x_1 &= c + h\xi_1 = 1 + 2 \cdot 1 = 3 \\
I_1 &= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) = 0.3682...
\end{aligned}
$$

Fehlerabschätzung:

$$|I_1 - I| \leq \frac{1}{12} h^3 \|f''\|_\infty = \frac{8}{12} \cdot 0.7358... = 0.4905...$$
$$\text{tatsächlicher Fehler: } |0.3682... - 0.1838...| = 0.1843...$$

Simpson-Regel: ($m = 2$, $c_0 = c_2 = \frac{1}{6}$, $c_1 = \frac{2}{3}$, $x_0 = c$, $x_1 = \frac{1}{2}c + \frac{1}{2}d$, $x_2 = d$, $\xi_0 = 0$, $\xi_1 = \frac{1}{2}$, $\xi_2 = 1$)

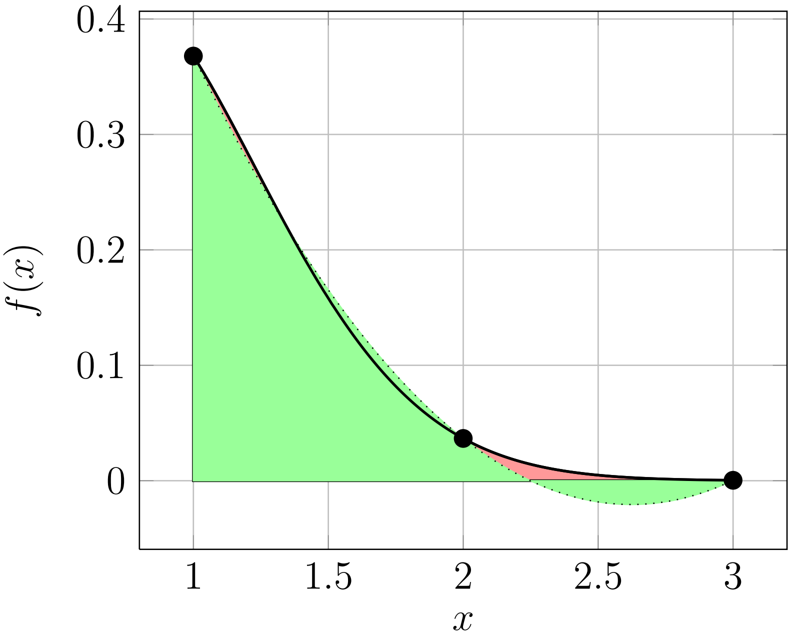

Abbildung 5: Beispiel 1: Interpolation als quadratische Funktion und Integration selbiger

$$\begin{aligned}
x_0 &= c + h\xi_0 = 1 + 2 \cdot 0 = 1 \\
x_1 &= c + h\xi_1 = 1 + 2 \cdot \frac{1}{2} = 2 \\
x_2 &= c + h\xi_2 = 1 + 2 \cdot 1 = 3 \\
I_2 &= \frac{h}{6}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) = \frac{1}{3}(f(1) + 4f(2) + f(3)) = 0.17159...
\end{aligned}$$

Fehlerabschätzung:

$\underset{x\in[c,d]}{max}|f^{(4)}(x)| =?$

$\rightarrow$ Extremwertsuche:

$$0 \overset{!}{=} f^{(5)}(x) \overset{y=x^2}{\Rightarrow} 8y^3 - 60y^2 + 90y - 15 \overset{!}{=} 0$$
$$\Rightarrow x_{1,2} = \pm 2.350...,\ x_{3,4} = \pm 0.4360... \notin [c,d],\ x_{5,6} = \pm 1.335$$

$$|f^{(4)}(x_{1,2})| = 0.9969...,\ |f^{(4)}(x_{5,6})| = 7.133...$$
$$|f^{(4)}(c)| = 1.1471...,\ |f^{(4)}(d)| = 0.2354...$$
$$\Rightarrow \|f^{(4)}\|_\infty = 7.133...$$

$$|I_2 - I| \leq \frac{1}{2880}h^5\|f^{(4)}\|_\infty = \frac{32}{2880}7.133... = 0.07926...$$
tatsachlicher Fehler: $|0.17159... - 0.1838...| = 0.0122...$

Summierte Newton-Cotes-Formeln:

Newton-Cotes-Formeln: Wie Genauigkeit steigern bei großem Intervall $[a,b]$?

$\rightarrow$ Erhöhung des Polynomgrades nicht sinnvoll (Oszillationen)
$\rightarrow$ $[a,b]$ unterteilen in n gleichgroße Teilintervalle $[t_{k-1}, t_k|$

$$I := \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^n \underbrace{\int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x)dx}_{=:I_k}$$
$$\approx \underbrace{\sum_{k=1}^n \underbrace{\int_{t_{k-1}}^{t_k} P_{m,k}(x)dx}_{=:I_{m,k}}}_{=:I_m^n} = h\sum_{k=1}^n\sum_{j=0}^m c_j \cdot f(t_{k-1} + h\cdot\xi_j)$$
$$\text{mit } h := \frac{b-a}{n},\ t_k = a + k\cdot h$$

Beispiele: Durchführung der Summation

Summierte Mittelpunktsregel: (m=0)

$$I_0^n = h \sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{t_{k-1}+t_k}{2}\right) = h \sum_{k=1}^{n} f(a+(k-\frac{1}{2})h)$$

<u>Fehler:</u>

$$|I_0^n - I| \leq \frac{n}{24} h^3 \|f^{(2)}\|_\infty = \frac{(b-a)^3}{24n^2}\|f^{(2)}\|_\infty$$

Hinweis: $\|f^{(2)}\|_\infty$ wird im Intervall $[a,b]$ bestimmt.

Summierte Trapezregel: (m=1)

$$I_1^n = h \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{2}[f(t_{k-1})+f(t_k)] = h\left[\frac{f(a)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + \frac{f(b)}{2}\right]$$

<u>Fehler:</u>

$$|I_1^n - I| \leq \frac{n}{12} h^3 \|f^{(2)}\|_\infty = \frac{(b-a)^3}{12n^2}\|f^{(2)}\|_\infty$$

Hinweis: $\|f^{(2)}\|_\infty$ wird im Intervall $[a,b]$ bestimmt.

Summierte Simpson-Regel: (m=2)

$$\begin{aligned} I_2^n &= h \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{6}\left[f(t_{k-1} + 4f(t_{k-1}+\frac{h}{2}) + f(t_k)\right] \\ &= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f(a+\frac{h}{2}) + \sum_{k=1}^{n-1}\left[2f(a+kh) + 4f(a+(k+\frac{1}{2})h)\right] + f(b)\right] \end{aligned}$$

<u>Fehler:</u>

$$|I_2^n - I| \leq \frac{n}{2880} h^5 \|f^{(4)}\|_\infty = \frac{(b-a)^5}{2880n^4}\|f^{(4)}\|_\infty$$

Hinweis: $\|f^{(4)}\|_\infty$ wird im Intervall $[a,b]$ bestimmt.

Beispiele: Anwendung der summierten Newton-Cotes-Formeln

$$I = \int_1^3 x e^{-x^2} dx \Rightarrow a = 1,\ b = 3,\ \text{zulässiger Fehler:}\varepsilon = 10^{-2},\ n =?,\ I_m^n =?$$

Summierte Mittelpunktsregel: (m=0)

$$\frac{(b-a)^3}{24n^2}\|f^{(2)}\|_\infty \overset{!}{\leq} \varepsilon \Leftrightarrow n \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3}{24\varepsilon}\|f^{(2)}\|_\infty} = 4.95...$$

$$\Rightarrow n \overset{\text{aufrunden!}}{=} 5 \text{ reicht sicher } \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = \frac{2}{5}$$

$$I_0^5 = h\left[f(\frac{6}{5}) + f(\frac{8}{5}) + f(\frac{10}{5}) + f(\frac{12}{5}) + f(\frac{14}{5})\right] = 0.18131...$$

$$|I_0^5 - I| = 2.55... \cdot 10^{-3} < 10^{-2}$$

Summierte Trapezregel:(m=1)

$$\frac{(b-a)^3}{12n^2}\|f^{(2)}\|_\infty \overset{!}{\leq} \varepsilon \Leftrightarrow n \overset{!}{\geq} \sqrt{\frac{(b-a)^3}{12\varepsilon}\|f^{(2)}\|_\infty} = 7.003...$$

$$\Rightarrow n = 8 \text{ reicht sicher aus } \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{4}$$

$$I_1^8 = h\left[\frac{f(1)}{2} + f(\frac{5}{4}) + f(\frac{6}{4}) + ... + f(\frac{11}{4}) + \frac{f(3)}{2}\right] = 0.1858...$$

$$|I_1^8 - I| = 1.92... \cdot 10^{-3} < 10^{-2}$$

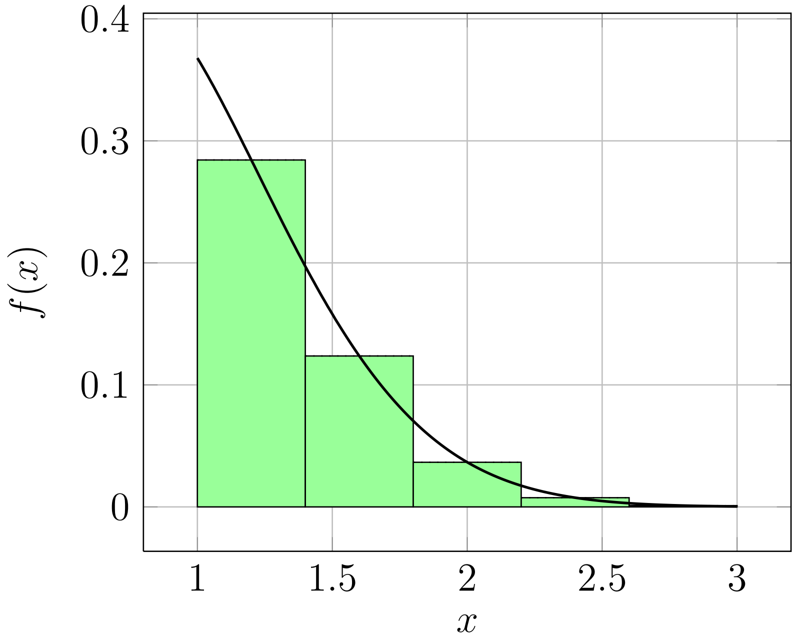

Abbildung 6: Beispiel 1: Summierte Mittelpunktsregel mit 5 Teilintervallen

Summierte Simpson-Regel: (m=2)

$$\frac{(b-a)^5}{2880n^4}\|f^{(4)}\|_\infty \overset{!}{\leq} \varepsilon \Leftrightarrow n \overset{!}{\geq} \left(\frac{(b-a)^5}{2880\varepsilon}\|f^{(4)}\|_\infty\right)^{\frac{1}{4}} = 1.67...$$

$$\Rightarrow n = 2 \text{ reicht sicher aus } \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = 1$$

$$I_2^2 = \frac{h}{6}\left[f(1) + 4f(\frac{3}{2}) + 2f(2) + 4f(\frac{5}{2}) + f(3)\right] = 0.1822...$$

$$|I_2^2 - I| = 1.67... \cdot 10^{-3} < 10^{-2}$$

Gauß-Quadratur

Problem Newton-Cotes:

Für großes m: Gewichte c_j mit wechselnden Vorzeichen $\rightarrow$ Auslöschung.

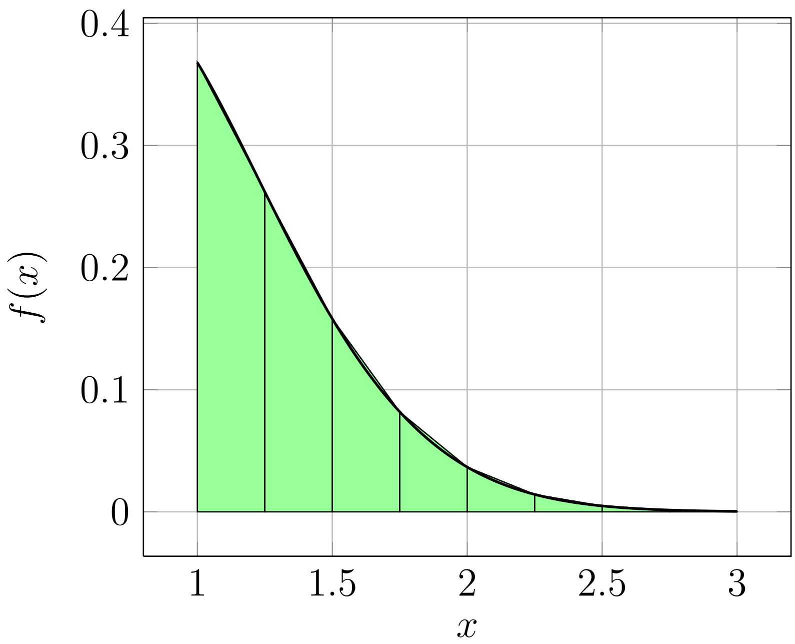

Abbildung 7: Beispiel 1: Summierte Trapez-Regel mit 8 Teilintervallen

Gauß-Quadratur

- positive Gewichte w_i , $i = 0, ..., m$
- Stützstellen $x_0, ...x_m$ nicht mehr äquidistant

$\Rightarrow 2m + 2$ Freiheitsgrade verfügbar

Die $2m + 2$ Freiheitsgrade werden verwendet um ein Polynom vom Grad $2m + 1$ (eindeutig bestimmt durch $2m + 2$-Werte) exakt wiederzugeben.

$\rightarrow$ höherer Exaktheitsgrad als Newton-Cotes: $2m + 1 \leftrightarrow m$ bzw. $m + 1$

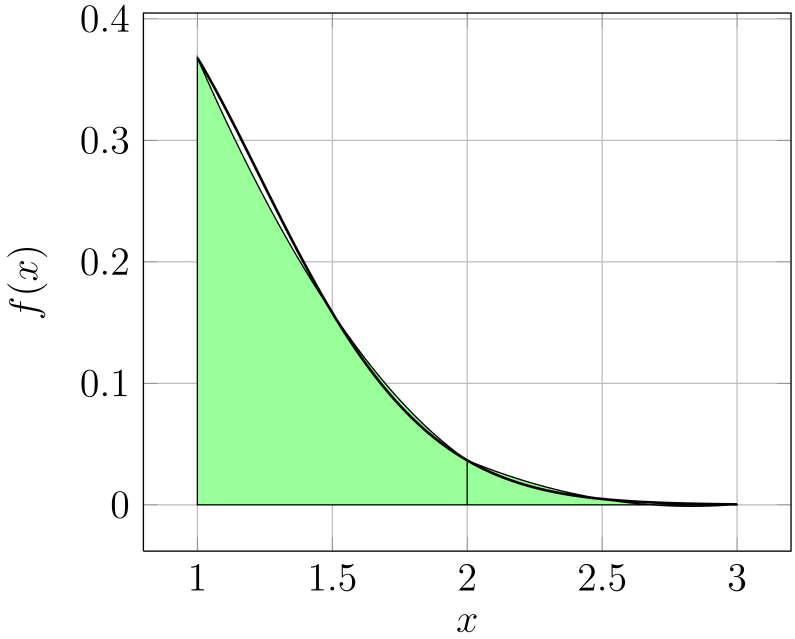

Abbildung 8: Beispiel 1: Summierte Simpson-Regel mit 2 Teilintervallen

Integraltransformationen

Geg.: Integrationsvorschrift auf Intervall $[c, d]$

Ges.: Wert des Integrals auf $[a, b]$: $\int_a^b f(x)dx =?$

Transformation:

$$
\begin{aligned}
t \in [c, d] &\overset{x(t)}{\to} x \in [a, b] \\
x(t) :&\ \text{affine (längentreue) Abbildung} \\
x(t) :&\ \frac{t-c}{d-c} b + \frac{d-t}{d-c} a
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx = \int_{a=x(c)}^{b=x(d)} f(x)dx &= \int_c^d \underbrace{f(x(t))}_{g(t)} x'(t)dt \\
&= \underbrace{x'(t)}_{\text{hier: const.}} \int_c^d g(t)dt
\end{aligned}
$$

Verständnisfrage: VF 13 F2009

Beispielaufgabe: A 5 H2008