

Numerische Mathematik für Maschinenbauer

Numerische Integration

A. Reusken

K.-H. Brakhage, I. Voulis, H. Saß

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2017

Heute in der Vorlesung

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 10.1-10.3

Numerische Integration

- ▶ Grundidee der numerischen Integration
- ▶ Trapezregel, Simpson-Regel, Fehlerformeln
- ▶ Newton-Cotes-Formeln
- ▶ Gauß-Quadratur

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Wie konstruiert man eine wiederholte Trapez- oder Simpson-Regel
- ▶ Wie sehen die Fehlerschranken dazu aus
- ▶ Was sind die Grundideen und wichtige Unterschiede der Newton-Cotes- und Gauß-Methoden

Kondition

$$\text{Sei } I = \int_a^b f(x) dx, \quad \tilde{I} = \int_a^b \tilde{f}(x) dx$$

Es gilt

$$\begin{aligned} |I - \tilde{I}| &= \left| \int_a^b f(x) - \tilde{f}(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - \tilde{f}(x)| dx \\ &\leq (b - a) \|f - \tilde{f}\|_\infty. \end{aligned}$$

\Rightarrow absolute Kondition ist gut.

$$\frac{|I - \tilde{I}|}{|I|} \leq (b - a) \frac{\|f - \tilde{f}\|_\infty}{\left| \int_a^b f(x) dx \right|} = \underbrace{\frac{\int_a^b \|f\|_\infty dx}{\left| \int_a^b f(x) dx \right|}}_{= \kappa_{\text{rel}}} \cdot \frac{\|f - \tilde{f}\|_\infty}{\|f\|_\infty}.$$

\Rightarrow relative Kondition kann beliebig schlecht sein.

Grundlegende Idee

Die gängige Strategie zur näherungsweise Berechnung des Integrals

$$\int_a^b f(x) dx = ?$$

lässt sich folgendermaßen umreißen:

1. Man unterteile $[a, b]$ in Teilintervalle $[t_{k-1}, t_k]$ z.B. mit $t_j = a + jh$, $j = 0, \dots, n$, $h = (b - a)/n$.
2. **Approximiere f** auf jedem Intervall $[t_{k-1}, t_k]$ durch eine **einfach zu integrierende Funktion g_k** , und verwende

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n \int_{t_{k-1}}^{t_k} g_k(x) dx$$

als Näherung für das exakte Integral.

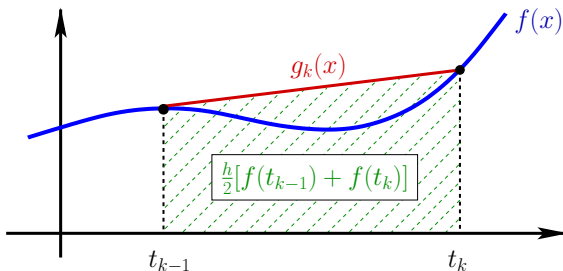
Trapezregel

- ▶ Lineare Interpolation an den Intervallenden von $[t_{k-1}, t_k]$, d.h.

$$g_k(x) = \frac{x - t_{k-1}}{h} f(t_k) + \frac{t_k - x}{h} f(t_{k-1}),$$

- ▶ Das Integral ist damit gegeben durch

$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} g_k(x) dx = \frac{h}{2} [f(t_{k-1}) + f(t_k)].$$



Summierte Trapezregel

Wiederholtes Anwenden der Trapezregel auf jedem Teilintervall $[t_{k-1}, t_k]$ als Näherung für $\int_a^b f(x) dx$ liefert die

Summierte Trapezregel

$$T(h) = h \left[\frac{1}{2} f(a) + f(t_1) + \dots + f(t_{n-1}) + \frac{1}{2} f(b) \right]$$

Für den Verfahrensfehler der Teilintegrale gilt folgende Darstellung:

Lemma 10.1

Sei $f \in C^2([t_{k-1}, t_k])$. Es gilt:

$$\frac{h}{2} [f(t_{k-1}) + f(t_k)] = \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x) dx + \frac{f''(\xi_k)}{12} h^3,$$

für $\xi_k \in [t_{k-1}, t_k]$.

Summierte Trapezregel

Für den Verfahrensfehler des gesamten Integrals $T(h)$ ergibt sich damit die Abschätzung

$$\begin{aligned} \left| T(h) - \int_a^b f(x) dx \right| &= \left| \sum_{k=1}^n \frac{f''(\xi_k)}{12} h^3 \right| \\ &\leq \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^n |f''(\xi_k)| \leq \frac{h^3}{12} n \cdot \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|. \end{aligned}$$

Mit $n \cdot h = b - a$ ergibt sich insgesamt die

Fehlerschranke

$$\left| T(h) - \int_a^b f(x) dx \right| \leq \frac{h^2}{12} (b - a) \cdot \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

Summierte Trapezregel

Ebenfalls erhält man wegen

$$E(h) := T(h) - \int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n h^3 \frac{f''(\xi_k)}{12} = \frac{h^2}{12} \sum_{k=1}^n h f''(\xi_k)$$

und

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{E(h)}{h^2} = \frac{1}{12} \int_a^b f''(x) dx = \frac{1}{12} (f'(b) - f'(a))$$

die

Fehlerschätzung

$$E(h) \approx \hat{E}(h) := \frac{h^2}{12} (f'(b) - f'(a))$$

Beispiel 10.2

Zur näherungsweise Berechnung von

$$I = \int_0^{\pi/2} (x \cos x + e^x) dx = \frac{\pi}{2} + e^{\frac{1}{2}\pi} - 2$$

mit der Trapezregel ergeben sich die in folgender Tabelle angegebenen Näherungswerte, Verfahrensfehler und Fehlerschätzungen.

n	$T(h)$	$ E(h) = T(h) - I $	$ \hat{E}(h) = \frac{h^2}{12} f'(\frac{\pi}{2}) - f'(0) $
4	4.396928	1.57e-02	1.59e-02
8	4.385239	3.97e-03	3.98e-03
16	4.382268	9.95e-04	9.96e-04
32	4.381523	2.49e-04	2.49e-04

Newton-Cotes-Formeln

- ▶ Für ein typisches Teilintervall $[t_{k-1}, t_k]$ stehe der Einfachheit halber im Folgenden $[c, d]$.
- ▶ Seien nun $x_0, \dots, x_m \in [c, d]$ paarweise verschiedene Punkte.
- ▶ Integration des Interpolationspolynoms liefert die Quadraturformel

$$I_m(f) = \int_c^d P(f|x_0, \dots, x_m)(x) dx.$$

Satz 10.3.

Sei $I_m(f)$ wie oben. Für jedes Polynom $Q \in \Pi_m$ gilt

$$I_m(Q) = \int_c^d Q(x) dx.$$

Man sagt, die Quadraturformel ist **exakt vom Grade m** .

Newton-Cotes-Formeln

Wir erhalten damit als Näherung für das exakte Integral

$$\begin{aligned}
 \int_c^d P(f|x_0, \dots, x_m)(x) dx &= \int_c^d \sum_{j=0}^m f(x_j) \ell_{jm}(x) dx \\
 &= \sum_{j=0}^m f(x_j) \int_c^d \ell_{jm}(x) dx \\
 &= \sum_{j=0}^m f(x_j) \int_c^d \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx \\
 &= h \sum_{j=0}^m f(x_j) \underbrace{\frac{1}{h} \int_c^d \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx}_{c_j} \\
 &= h \sum_{j=0}^m f(x_j) \cdot c_j
 \end{aligned}$$

Newton-Cotes-Formeln

Lemma 10.4

Es gibt Gewichte c_0, \dots, c_m , so dass $I_m(f)$ die Form

$$I_m(f) = h \sum_{j=0}^m c_j f(x_j)$$

hat, wobei wieder $h = d - c$. Die c_j sind durch

$$c_j = \frac{1}{h} \int_c^d \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx = \frac{1}{h} \int_c^d \ell_{jm}(x) dx$$

gegeben, wobei ℓ_{jm} ($0 \leq j \leq m$) die Lagrange-Fundamentalpolynome zu den Stützstellen x_0, \dots, x_m sind.

Newton-Cotes-Formeln

Wählt man speziell die Stützstellen x_j äquidistant

$$x_0 = c + \frac{1}{2}h =: c + \xi_0 h, \quad \text{wenn } m = 0$$

$$x_j = c + \frac{j}{m}h =: c + \xi_j h, \quad j = 0, \dots, m, \quad \text{wenn } m > 0,$$

erhält man die **Newton-Cotes-Formeln**.

Beispiel

Für $m = 1$ erhalten wir $x_0 = c$, $x_1 = d$ und

$$c_0 = \frac{1}{h} \int_c^d \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{1}{2}$$

$$c_1 = \frac{1}{h} \int_c^d \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \frac{1}{2}.$$

Newton-Cotes-Formeln

Man kann die Quadraturformel in der Form

$$I_m(f) = h \sum_{j=0}^m c_j f(c + \xi_j h)$$

mit **normierten** Stützstellen ξ_j und Gewichten c_j schreiben, die jetzt **unabhängig vom speziellen Intervall** $[c, d]$ sind, z.B.

m		ξ_j	c_j	$I_m(f) - \int_c^d f(x) dx$
0	Mittelpunktsregel	$\frac{1}{2}$	1	$-\frac{1}{24} h^3 f^{(2)}(\xi)$
1	Trapezregel	0, 1	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{12} h^3 f^{(2)}(\xi)$
2	Simpson-Regel	$0, \frac{1}{2}, 1$	$\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6}$	$\frac{1}{90} (\frac{1}{2} h)^5 f^{(4)}(\xi)$
3	$\frac{3}{8}$ -Regel	$0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$	$\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{80} (\frac{1}{3} h)^5 f^{(4)}(\xi)$
4	Milne-Regel	$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1$	$\frac{7}{90}, \frac{32}{90}, \frac{12}{90}, \frac{32}{90}, \frac{7}{90}$	$\frac{8}{945} (\frac{1}{4} h)^7 f^{(6)}(\xi)$

Summierte Newton-Cotes-Formeln

Beispiel: Summierte Simpson-Regel.

$$S(h) = \int_a^b f(x) dx + E(h)$$

mit

$$S(h) = \frac{h}{6} \left[f(t_0) + 4f\left(\frac{t_0 + t_1}{2}\right) + 2f(t_1) + 4f\left(\frac{t_1 + t_2}{2}\right) + 2f(t_2) + \cdots + 2f(t_{n-1}) + 4f\left(\frac{t_{n-1} + t_n}{2}\right) + f(t_n) \right]$$

und Fehlerschranke

$$E(h) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{90} \left(\frac{1}{2}h\right)^5 f^{(4)}(\xi_k) = \frac{h^4}{2880} \sum_{k=1}^n h f^{(4)}(\xi_k),$$

für $\xi_k \in [t_{k-1}, t_k]$.

Summierte Newton-Cotes-Formeln

Es gilt, wegen $n \cdot h = b - a$,

$$|E(h)| \leq \frac{h^4}{2880} (b - a) \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$E(h) \approx \frac{h^4}{2880} \int_a^b f^{(4)}(x) dx = \frac{h^4}{2880} (f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)).$$

Beachte: Beim **Aufsummieren** der einzelnen Teilintegrale,

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x) dx,$$

geht im Fehler eine h -Potenz verloren.

Beispiel 10.5

Zur näherungsweise Berechnung von (siehe Beispiel 10.2)

$$I = \int_0^{\pi/2} (x \cos x + e^x) dx = \frac{\pi}{2} + e^{\frac{1}{2}\pi} - 2$$

ergeben sich die Resultate wie in folgender Tabelle.

n	$S(h)$	$ E(h) $	$\frac{h^4}{2880} f^{(3)}(\frac{\pi}{2}) - f^{(3)}(0) $
4	4.381343022	6.93e - 05	6.92e - 05
8	4.381278035	4.33e - 06	4.33e - 06
16	4.381273978	2.70e - 07	2.70e - 07
32	4.381273725	1.69e - 08	1.69e - 08

Gauß-Quadratur

Zielvorgabe

Entwickle für $m \in \mathbb{N}$ eine Formel

$$\sum_{i=0}^m \hat{w}_i f(x_i) = \int_c^d P(f|x_0, \dots, x_m)(x) dx$$

mit:

- ▶ positiven Gewichten $\hat{w}_i, i = 0, \dots, m$
- ▶ mit möglichst hohem Exaktheitsgrad $n \geq m$, d.h.

$$\int_c^d Q(x) dx = \sum_{i=0}^m \hat{w}_i Q(x_i), \quad \forall Q \in \Pi_n.$$

Zur Erinnerung: Der Exaktheitsgrad bei Newton-Cotes-Formeln $I_m(f)$ ist entweder m oder $m + 1$.

Gauß-Quadratur

- ▶ Exaktheitsgrad kann **höchstens** $2m + 1$ sein.
 \Rightarrow **Gaußsche Quadraturformeln**

Satz 10.6

Sei $m \geq 0$. Es **existieren** Stützstellen $x_0, \dots, x_m \in (c, d)$ und **positive** Gewichte w_0, \dots, w_m , so dass mit $h = d - c$

$$h \sum_{i=0}^m w_i f(x_i) = \int_c^d f(x) dx + E_f(h)$$

und

$$E_Q = 0 \quad \text{für alle } Q \in \Pi_{2m+1}.$$

Ferner gilt für passendes $\xi \in [c, d]$

$$|E_f(h)| = \frac{((m+1)!)^4}{((2m+2)!)^3 (2m+3)} h^{2m+3} |f^{(2m+2)}(\xi)|.$$

Numerische Tests

- ▶ Betrachte Quadraturformel

$$I_{k,n} \approx \int_a^b f(x) dx = I(f),$$

wobei $[a, b]$ in n Teilintervalle mit Länge $(b - a)/n = h$ unterteilt wird und auf jedem Teilintervall eine Gauß-Quadratur mit $k = m + 1$ Stützstellen angewandt wird.

- ▶ Für glatte Funktionen (d.h. $|f^{(2k)}|$ wird nicht allzu groß, wenn k größer wird) wird die Genauigkeit der Gauß-Quadratur im Wesentlichen durch den Faktor $C_{k,h}$ bestimmt:

$$C_{k,h} := \frac{(k!)^4}{((2k)!)^3(2k+1)} h^{2k+1}.$$

Wir erhalten folgende Werte ...

Numerische Test: Werte für $C_{k,h}$

$h = (b - a)/n$	$k = 2$	$k = 4$	$k = 8$
4	2.4e - 01	1.5e - 04	2.9e - 13
2	7.4e - 03	2.9e - 07	2.2e - 18
1	2.3e - 04	5.6e - 10	1.7e - 23
0.5	7.2e - 06	1.1e - 12	1.3e - 28

- ▶ Für $I_{2k,n}$ und $I_{k,2n}$ wird die Anzahl der Funktionsauswertungen etwa verdoppelt im Vergleich zu $I_{k,n}$.

- ▶ In obiger Tabelle kann man sehen, dass man

$$|I - I_{2k,n}| \ll |I - I_{k,2n}|$$

erwarten darf.

- ▶ In der Praxis wird daher bei der Gauß-Quadratur n in der Regel klein gewählt, oft sogar $n = 1$.

Matlab-Demo

Beispiel 10.7.

Gauß-Quadratur zur Berechnung von (siehe Beispiel 10.2)

$$I = \int_0^{\pi/2} (x \cos x + e^x) dx = \frac{\pi}{2} + e^{\frac{1}{2}\pi} - 2$$

mit $[c, d] = [0, \frac{\pi}{2}]$ (d.h. $n = 1$) ergibt die Resultate:

m	I_m	$ I_m - I $
1	4.3690643196	1.22e - 03
2	4.3813023502	2.86e - 05
3	4.3812734352	2.73e - 07
4	4.3812737083	5.18e - 10

Die Genauigkeit der Gauß-Quadratur mit 5 Funktionswerten ($m = 4; k = 5$) ist besser als die der Simpson-Regel angewandt auf $n = 32$ Teilintervalle (vgl. Beispiel 10.5), wobei insgesamt 65 Funktionswerte benötigt werden.

Beispiel 10.8.

- ▶ **Aufgabe:** Berechnung der Stützstellen und Gewichte der Gauß-Quadratur für $[c, d] = [-1, 1]$ und $m = 1$.
- ▶ Die Gauß-Quadraturformel

$$I_1(f) = 2(c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1))$$

muss für $p \in \Pi_3$ exakt sein, d.h.

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = 2(c_0 p(x_0) + c_1 p(x_1))$$

für $p(x) = x^k$, $k = 0, 1, 2, 3$.

- ▶ Aus

$$\int_{-1}^1 x^k dx = 2(c_0 x_0^k + c_1 x_1^k), \quad k = 0, 1, 2, 3,$$

erhält man die Gleichungen ...

Beispiel 10.8.

erhält man die Gleichungen

$$\begin{aligned} 2 &= 2(c_0 + c_1), & 0 &= 2(c_0x_0 + c_1x_1), \\ \frac{2}{3} &= 2(c_0x_0^2 + c_1x_1^2), & 0 &= 2(c_0x_0^3 + c_1x_1^3). \end{aligned}$$

- Dieses **nichtlineare Gleichungssystem** hat genau zwei Lösungen:

$$c_0 = c_1 = \frac{1}{2}, \quad x_0 = -\frac{1}{3}\sqrt{3}, \quad x_1 = \frac{1}{3}\sqrt{3}$$

$$c_0 = c_1 = \frac{1}{2}, \quad x_0 = \frac{1}{3}\sqrt{3}, \quad x_1 = -\frac{1}{3}\sqrt{3}$$

$$\Rightarrow \int_{-1}^1 f(x) dx \approx I_1(f) = 2 \left(\frac{1}{2} f\left(-\frac{1}{3}\sqrt{3}\right) + \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{3}\sqrt{3}\right) \right)$$

Zusammenfassung

- ▶ Numerische Integration basiert auf **Integration des Interpolationspolynoms** auf einem Teilintervall

$$\text{▶ } I_m(f) = \int_c^d P(f | x_0, \dots, x_m)(x) dx, \quad [c, d] : \text{Teilintervall}$$

$$\Rightarrow I_m(f) = h \sum_{j=0}^m c_j f(x_j), \quad h = d - c$$

c_j : hängt nur von den Stützstellen ab.

- ▶ Newton-Cotes: **äquidistante** Stützstellen x_0, \dots, x_m
- ▶ Gauß-Quadratur: **spezifisch gewählte** Stützstellen

Unterschiede

- ▶ Newton-Cotes: einfacher, Exaktheitsgrad m oder $m + 1$
- ▶ Gauß-Quadratur: Gewichte $c_j > 0$, Exaktheitsgrad $2m + 1$

Verständnisfragen

Es sei $f \in C[a, b]$. Das Integral $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ soll numerisch approximiert werden durch eine Quadraturformel

$$I_m(f) = (b - a) \sum_{j=0}^m w_j f(x_j), \quad a \leq x_0 < \dots < x_m \leq b.$$

Weiter sei $I_{m,n}(f)$ die aus $I_m(f)$ konstruierte summierte Quadraturformel auf den Teilintervallen $[t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, \dots, n$, mit $t_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, n$, $h = (b - a)/n$.

Es seien $a = 0$, $b = 1$ und $I_2(f)$ die Simpson-Regel. Berechnen Sie den Fehler $I(x^3 + 1) - I_2(x^3 + 1)$. 0

X Es seien $I_m^{NC}(f)$ und $I_m^G(f)$ die Newton-Cotes und die Formel der Gauß-Quadratur. Für $m \geq 1$ gilt, dass der Exaktheitsgrad von $I_m^{NC}(f)$ strikt kleiner ist als der von $I_m^G(f)$.

Verständnisfragen

Es sei $f \in C[a, b]$. Das Integral $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ soll numerisch approximiert werden durch eine Quadraturformel

$$I_m(f) = (b - a) \sum_{j=0}^m w_j f(x_j), \quad a \leq x_0 < \dots < x_m \leq b.$$

Weiter sei $I_{m,n}(f)$ die aus $I_m(f)$ konstruierte summierte Quadraturformel auf den Teilintervallen $[t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, \dots, n$, mit $t_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, n$, $h = (b - a)/n$.

- Es sei $P(f | x_0, \dots, x_m)$ das Lagrange-Interpolationspolynom. Bei Gauß-Quadratur gilt $I_m(f) = \int_a^b P(f | x_0, \dots, x_m)(x) dx$.
- Es seien $f \in C^4[a, b]$ und $I_2(f)$ die Simpson-Regel. Es gilt $|I_{2,n}(f) - I(f)| \leq ch^5$, wobei c nicht von n abhängt.
- Bei der Gauß-Quadratur hängen die Stützstellen x_j von der Funktion f ab.