Numerische Mathematik für Maschinenbauer

Numerische Integration II

A. Reusken

K.-H. Brakhage, Amira El Amouri, Thomas Jankuhn

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2019

Heute in der Vorlesung

Themen: Dahmen & Reusken Kap 10.1-10.3, 10.5

- Einleitung
- Trapezregel, Simpson-Regel, Fehlerformeln
- Newton-Cotes-Formeln
- Gauß-Quadratur

Was Sie mitnehmen sollten:

- Grundidee der numerischen Integration
- 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

Grundlegende Idee

Die gängige Strategie zur näherungsweisen 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 $t_j = a + j\,h,\ j = 0, \ldots, n,\ h = (b - a)/n.$
2. Approximiere f auf jedem Intervall $[t_{k-1}, t_k]$ durch eine einfach/exakt zu integrierende Funktion g_k, und verwende

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

als Näherung für das exakte Integral.

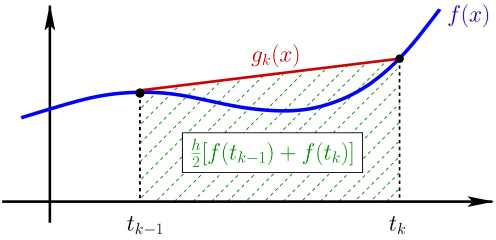
Trapezregel

- 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

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



Summierte Trapezregel

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

Summierte Trapezregel

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

Für den Verfahrensfehler der Teilintegrale gilt folgende Darstellung:

Lemma 10.1.

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

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

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

Fehlerschranke

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

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

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

die

Fehlerschätzung

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

Beispiel 10.2.

Zur näherungsweise Berechnung von

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

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

n	$T(h)$	$\lvert E(h)\rvert = \lvert T(h) - I\rvert$	$\lvert\hat{E}(h)\rvert = \frac{h^2}{12}\lvert f'\left(\frac{\pi}{2}\right) - f'(0)\rvert$
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

Allgemeine Quadraturformel

- Für ein typisches Teilintervall $[t_{k-1}, t_k]$ stehe der Einfachheit halber im Folgenden $[c, d]$.
- Seien nun $x_0, \ldots, x_m \in [c, d]$ paarweise verschiedene Punkte.

Quadratur: Integration des Interpolationspolynoms

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

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.

Allgemeine Quadraturformel

Wir erhalten damit als Näherung für das exakte Integral

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

Allgemeine Quadraturformel

Lemma 10.4.

Es gibt Gewichte $c_0, \ldots, c_m$, 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-Fundamental-polynome zu den Stützstellen $x_0, \ldots, x_m$ sind.

Newton-Cotes-Formeln

Wählt man speziell die Stützstellen x_j äquidistant

$$
\begin{aligned}
x_0 &= c + \frac{1}{2} h =: c + \xi_0 h, \quad \text{wenn } m = 0 \\
x_j &= c + \frac{j}{m} h =: c + \xi_j h, \quad j = 0, \dots, m, \ \text{wenn } m > 0,
\end{aligned}
$$

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

Beispiel

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

$$
\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{h} \int_c^d \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{1}{2}, \\
c_1 &= \frac{1}{h} \int_c^d \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \frac{1}{2}.
\end{aligned}
$$

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	$-\frac{1}{24}\, h^3\, f^{(2)}(\zeta)$
1	Trapezregel	$0, 1$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}\, h^3\, f^{(2)}(\zeta)$
2	Simpson-Regel	$0, \frac{1}{2}, 1$	$\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6}$	$\frac{1}{90}\left(\frac{1}{2}h\right)^5 f^{(4)}(\zeta)$
3	$\frac{3}{8}$-Regel	$0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$	$\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{80}\left(\frac{1}{3}h\right)^5 f^{(4)}(\zeta)$
4	Milne-Regel	$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1$	$\frac{7}{90}, \frac{32}{90}, \frac{12}{90}, \frac{32}{90}, \frac{7}{90}$	$\frac{8}{945}\left(\frac{1}{4}h\right)^7 f^{(6)}(\zeta)$

Summierte Newton-Cotes-Formeln

Beispiel: Summierte Simpson-Regel

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

mit

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

und Fehlerschranke

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

für $\zeta_k \in [t_{k-1}, t_k]$.

Summierte Newton-Cotes-Formeln

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

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

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

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.

Wie in Beispiel 10.2. ergeben sich für die näherungsweise Berechnung von

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

die Resultate, die in folgender Tabelle dargestellt sind.

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

Gauß-Quadratur

Zielvorgabe

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

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

mit:

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

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

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

Gauß-Quadratur

- Exaktheitsgrad kann höchstens $2\,m+1$ sein.

  $\Rightarrow$ Gaußsche Quadraturformeln

Satz 10.6

Sei $m \geq 0$. Es existieren Stützstellen $x_0, \ldots, x_m \in (c, d)$ und positive Gewichte $w_0, \ldots, w_m$, 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 $\xi \in [c, d]$

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

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

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

Wir erhalten folgende Werte ...

Numerische Test

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

- Für $I_{2\cdot k,n}$ und $I_{k,2\cdot n}$ wird die Anzahl der Funktionsauswertungen etwa verdoppelt im Vergleich zu $I_{k,n}$.
- In obiger Tabelle kann man sehen, dass man

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

  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.

Wie in Beispiel 10.2. ergeben sich für die Gauß-Quadratur von

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

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

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

$$I_1(f) = 2\left(c_0\, f(x_0) + c_1\, f(x_1)\right)$$

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

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

  für $p(x) = x^k, k = 0, 1, 2, 3.$

- Aus

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

  erhält man die Gleichungen …

Beispiel 10.8.

erhält man die Gleichungen

$$2 = 2\,(c_0 + c_1), \qquad 0 = 2\,(c_0\,x_0 + c_1\,x_1),$$
$$\tfrac{2}{3} = 2\,(c_0\,x_0^2 + c_1\,x_1^2), \quad 0 = 2\,(c_0\,x_0^3 + c_1\,x_1^3).$$

- Dieses nichtlineare Gleichungssystem hat genau zwei Lösungen:

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

Daraus ergibt sich

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

Zusammenfassung

- Numerische Integration basiert auf Integration des Interpolationspolynoms auf einem Teilintervall
- $I_m(f) = \int_c^d P(f \mid x_0, \ldots, x_m)(x)dx, \quad [c, d]$: 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 $x_0, \ldots, x_m$
- Gauß-Quadratur: spezifisch gewählte Stützstellen

Unterschiede

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

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

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

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

Es seien $a = 0$, $b = 1$ und $I_2(f)$ die Simpson-Regel.

Berechnen Sie den Fehler $I(x^3+1) - I_2(x^3+1)$. $\boxed{0}$

$\boxed{\text{W}}$ Es seien $I_m^{NC}(f)$ und $I_m^{G}(f)$ die Newton-Cotes und die Formel der Gauß-Quadratur.
Für $m \ge 1$ 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

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

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

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