Kapitel 3

Numerische Integration

In diesem Kapitel stellen wir einige wichtige Verfahren zur näherungsweisen Berechnung bestimmter Integrale $\int_a^b f(x)\,dx$ vor.

Integrationsaufgabe:

Zu gegebenem integrierbarem $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ berechne

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

Schon für relativ einfache Funktionen läßt sich die Stammfunktion nicht analytisch angeben, etwa $\frac{\sin x}{x}$ und e^{-x^2}. Man ist dann auf numerische Integrationsverfahren angewiesen.

Wichtige numerische Integrationsverfahren beruhen darauf, f mit Hilfe einiger Stützpunkte $(x_i, f(x_i))$, $x_i \in [a,b]$ durch ein Polynom p_n zu interpolieren und dann dieses zu integrieren. Diese Vorgehensweise liefert die Integralapproximation

$$I_n(x) = \int_a^b p_n(x)\,dx$$

und wird als *interpolatorische Quadratur* bezeichnet.

3.1 Newton-Cotes-Quadratur

3.1.1 Geschlossene Newton-Cotes-Quadratur

Wir wählen für $n \in \mathbb{N}$ die äquidistanten Stützstellen

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \dots, n, \quad \text{mit } h = \frac{b-a}{n}.$$

Dann lautet das Interpolationspolynom p_n in Lagrange-Darstellung

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_{i,n}(x), \quad L_{i,n}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Wir erhalten nun die numerische Quadraturformel

$$I_n(f) = \int_a^b p_n(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b L_{i,n}(x)\, dx.$$

Mit der Substitution $x = a + sh$ und $s \in [0, n]$ ergibt sich die

Geschlossene Newton-Cotes Formel:

$$I_n(f) = h \sum_{i=0}^{n} \alpha_{i,n} f(x_i),$$

$$\text{mit} \quad \alpha_{i,n} = \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{s - j}{i - j}\, ds. \tag{3.1}$$

Die Zahlen $\alpha_{0,n}, \ldots, \alpha_{n,n}$ heißen *Gewichte*. Sie sind *unabhängig* von f und $[a, b]$ und somit tabellierbar. Es gilt stets

$$\sum_{i=0}^{n} h\alpha_{i,n} = b - a.$$

Definition 3.1.1 *Eine Integrationsformel* $J(f) = \sum_{i=0}^{n} \beta_i f(x_i)$ *heißt* exakt vom Grad n, *falls sie alle Polynome bis mindestens vom Grad* n *exakt integriert.*

Die geschlossene Newton-Cotes Formel $I_n(f)$ ist nach Konstruktion exakt vom Grad n.

Es ist wichtig, eine Abschätzung für den Fehler

$$E_n(f) := I(f) - I_n(f)$$

zur Verfügung zu haben. Nach Korollar 2.1.3 gilt

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{|f^{(n+1)}(\xi)|}{(n+1)!}(b - a)^{n+1}$$

mit einem $\xi \in [a, b]$. Dies ergibt mit einem (unter Umständen anderen) $\xi \in [a, b]$

$$\left| \int_a^b f(x)\, dx - \int_a^b p_n(x)\, dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - p_n(x)|\, dx \leq \frac{|f^{(n+1)}(\xi)|}{(n+1)!}(b - a)^{n+2}.$$

Eine verfeinerte Restgliedabschätzung ergibt sich durch Taylorentwicklung. Dies liefert die folgende Tabelle.

n	$\alpha_{i,n}$					Fehler $E_n(f)$	Name
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				$-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}h^3$	Trapezregel
2	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$			$-\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}h^5$	Simpson-Regel
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$		$-\frac{3f^{(4)}(\xi)}{80}h^5$	3/8-Regel
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$	$-\frac{8f^{(6)}(\xi)}{945}h^7$	Milne-Regel

Für $n \geq 7$ treten leider negative Gewichte auf und die Formeln werden dadurch zunehmend numerisch instabil, da Auslöschung auftritt.

3.1.2 Offene Newton-Cotes-Quadratur

Hier wählen wir für $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ die in $]a, b[$ liegenden äquidistanten Stützstellen

$$x_i = a + ih, \quad i = 1, \dots, n+1, \quad \text{mit } h = \frac{b-a}{n+2}.$$

Geht man völlig analog vor, dann erhält man wiederum interpolatorische Interpolationsformeln, die

Offene Newton-Cotes Formel:

$$\tilde{I}_n(f) = h \sum_{i=1}^{n+1} \tilde{\alpha}_{i,n} f(x_i), \quad \tilde{\alpha}_{i,n} = \int_0^{n+2} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n+1} \frac{s-j}{i-j}\, ds.$$

Für den Quadraturfehler ergeben sich ähnliche Formeln wie im geschlossenen Fall:

n	$\alpha_{i,n}$			Fehler $\tilde{E}_n(f)$	Name
0	2			$\frac{f^{(2)}(\xi)}{3}h^3$	Rechteck-Regel
1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$		$\frac{3f^{(2)}(\xi)}{4}h^3$	
2	$\frac{8}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{8}{3}$	$\frac{28f^{(4)}(\xi)}{90}h^5$	

3.2 Die summierten Newton-Cotes-Formeln

Die Newton-Cotes-Formeln liefern nur genaue Ergebnisse, solange das Integrationsintervall klein und die Zahl der Knoten nicht zu groß ist. Es bietet sich wieder an, das Intervall $[a, b]$ in kleinere Intervalle zu zerlegen und auf diesen jeweils mit einer Newton-Cotes-Formel zu arbeiten.

Wir zerlegen dazu das Intervall $[a, b]$ in m Teilintervalle der Länge $H = \frac{b-a}{m}$, wenden die Newton-Cotes-Formeln vom Grad n einzeln auf diese Teilintervalle an und summieren die

Teilintegrale auf: Mit

$$N = m \cdot n, \quad H = \frac{b-a}{m}, \quad h = \frac{H}{n}$$
$$x_i = a + ih, i = 0, \ldots, N,$$
$$y_j = a + jH, j = 0, \ldots, m$$

ergibt sich wegen

$$I(f) = \sum_{j=0}^{m-1} \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x)\,dx$$

die

Summierte geschlossene Newton-Cotes-Formel

$$S_N^{(n)}(f) = h \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n} \alpha_{i,n} f(x_{jn+i}).$$

Die Gewichte $\alpha_{i,n}$ ergeben sich wieder aus (3.1). Der Quadraturfehler

$$R_N^{(n)}(f) = I(f) - S_N^{(n)}(f)$$

ergibt sich durch Summation der Fehler auf den Teilintervallen.

Satz 3.2.1 *Sei $f \in C^{n+2}([a,b])$. Dann existiert eine Zwischenstelle $\xi \in]a,b[$ mit*

$$R_N^{(n)}(f) = \begin{cases} C(n) f^{(n+2)}(\xi)(b-a)h^{n+2} & \text{für gerades } n, \\ C(n) f^{(n+1)}(\xi)(b-a)h^{n+1} & \text{für ungerades } n. \end{cases}$$

Hierbei ist $C(n)$ eine nur von n abhängige Konstante.

Wir geben noch die gebräuchlichsten summierten Formeln mit Quadraturfehler an:

Summierte Trapezregel: (geschlossen, $n = 1$)

$$S_N^{(1)}(f) = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{m-1} (f(x_j) + f(x_{j+1})), \quad x_j = a + jh.$$

Fehler: $R_N^{(1)}(f) = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)h^2$.

Summierte Simpson-Regel: (geschlossen, $n = 2$)

$$S_N^{(2)}(f) = \frac{h}{3} \sum_{j=0}^{m-1} (f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1}) + f(x_{2j+2})), \quad x_j = a + jh.$$

Fehler: $R_N^{(2)}(f) = -\dfrac{f^{(4)}(\xi)}{180}(b-a)h^4$

Summierte Rechteck-Regel: (offen, $n = 0$, $2m = N$, $h = \frac{b-a}{N}$)

$$\tilde{S}_N^{(0)}(f) = 2h \sum_{j=1}^{m} f(x_{2j-1}), \quad x_j = a + jh.$$

Fehler: $\tilde{R}_N^{(0)}(f) = \dfrac{f''(\xi)}{6}(b-a)h^2$