13 Numerische Quadratur

Ausgangssituation: Zu berechnen sei ein bestimmtes Integral

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

mit einem *numerischen* Algorithmus.

Verwenden Numerische Quadratur (Quadraturformel) der Form

$$I[f] \approx I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i)$$

mit

- Knoten $x_i \in [a, b]$, für $i = 0, 1, \ldots, n$;
- Gewichten g_i für $i = 0, 1, \ldots, n$.

13.1 Newton-Cotes Formeln

Grundidee: Verwende Interpolationspolynom p_n zu Daten

$$(x_i, f(x_i)) \qquad i = 0, 1, \ldots, n$$

und integriere die Interpolante

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

Ergebnis: Quadraturformel

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

mit Gewichten

$$g_i = \int_a^b L_i(x)\,dx \qquad \text{für } 0 \le i \le n.$$

Konstruktion der Newton-Cotes Formeln.

Vereinfachung: Verwenden äquidistante Knoten

$$x_i = a + ih, \qquad 0 \le i \le n, \qquad \text{wobei } h = (b-a)/n.$$

Ergebnis: Newton-Cotes-Quadraturformel

$$I_n[f] = \int_a^b p_n(x)\,dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} \alpha_{in} f(x_i)$$

mit Gewichten

$$\alpha_{in} = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\,dx = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{s-j}{i-j}\,ds \qquad \text{für } 0 \le i \le n,$$

unter Verwendung der Substitution $s = (x-a)/h$. □

Die Trapezregel.

Wähle $n = 1$ und somit $x_0 = a$ und $x_1 = b$. Damit gilt

$$p_1(x) = \frac{x-a}{b-a}\cdot f(b) + \frac{b-x}{b-a}\cdot f(a)$$

und somit bekommt man die beiden Gewichte

$$\begin{aligned}\alpha_{01} &= \int_0^1 (1-x)\,dx = \frac{1}{2}\\ \alpha_{11} &= \int_0^1 x\,dx = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Daraus folgt die Trapezregel

$$I[f] \approx I_1[f] = (b-a)\cdot\frac{f(a)+f(b)}{2}.$$

Die Simpsonregel.

Wähle $n = 2$ und somit

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{b+a}{2}, \quad x_2 = b.$$

Damit bekommt man die drei Gewichte

$$\begin{aligned}
\alpha_{02} &= \frac{1}{4}\int_0^2 (x-1)(x-2)\,dx = \frac{1}{6} \\
\alpha_{12} &= \frac{1}{2}\int_0^2 x(2-x)\,dx = \frac{2}{3} \\
\alpha_{22} &= \frac{1}{4}\int_0^2 x(x-1)\,dx = \frac{1}{6}
\end{aligned}$$

Daraus folgt die `Simpsonregel`

$$I[f] \approx I_2[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b)\right).$$

Zwei weitere Newton-Cotes-Formeln.

- `3/8-Regel.`

$$I_3[f] = \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f\left(a + \frac{b-a}{3}\right) + 3f\left(a + 2\frac{(b-a)}{3}\right) + f(b)\right)$$

- `Milne-Regel.`

$$\begin{aligned}
I_4[f] &= \frac{b-a}{90}\left[7f(a) + 32f\left(a + \frac{b-a}{4}\right) + 12f\left(a + \frac{b-a}{2}\right)\right. \\
&\qquad \left. + 32f\left(a + 3\frac{(b-a)}{4}\right) + 7f(b)\right]
\end{aligned}$$

Übersicht: Gewichte der Newton-Cotes Formeln.

n	α_{in}					
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				Trapezregel
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$			Simpson-Regel
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		3/8-Regel
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$	Milne-Regel

Satz:
Die Newton-Cotes-Formel $I_n[f]$ *integriert Polynome vom Grad* $\leq n$ *exakt.*

Beweis: Das Interpolationspolynom $p_n \in \mathcal{P}_n$ zu den $n+1$ Daten $(x_i, f(x_i))$, $0 \leq i \leq n$, rekonstruiert $f \in \mathcal{P}_n$ exakt, d.h. $f \equiv p_n$, und daher gilt

$$I[f] = I[p_n] = \int_a^b p_n(x)\,dx = I_n[f] \qquad \text{für alle } f \in \mathcal{P}_n. \qquad \blacksquare$$

Quadraturfehler der Newton-Cotes Formeln.

$R_n[f] := I_n[f] - I[f]$ heißt Quadraturfehler der Quadraturformel $I_n(f)$.

Erinnerung: Darstellung für den Interpolationsfehler:

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Beispiel: Für den Quadraturfehler der Trapezregel $(n = 1)$ gilt

$$\begin{aligned} R_1[f] &= \int_a^b (p_1(x) - f(x))\,dx = -\int_a^b \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx \\ &= -\frac{f^{(2)}(\tilde{\xi})}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = \frac{1}{12} f^{(2)}(\tilde{\xi})(b-a)^3 \end{aligned}$$

und somit gilt für $h = b - a$ die Fehlerabschätzung

$$|R_1[f]| = |I_1[f] - I[f]| \leq \frac{1}{12} \|f^{(2)}\|_\infty \cdot h^3.$$

Quadraturfehler der Newton-Cotes Formeln.

n	$R_n[f]$	
1	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	Trapezregel
2	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	Simpson-Regel
3	$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi)$	3/8-Regel
4	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	Milne-Regel

wobei jeweils

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

Zusammengesetzte Newton-Cotes Formeln.

Ziel: Höhere Genauigkeit durch Unterteilung des Intervalls $[a, b]$.

Gegeben sei die äquidistante Unterteilung mit den Knoten

$$t_i = a + ih \qquad i = 0, 1, \ldots, N, \quad h = \frac{b-a}{N}.$$

Verwende auf jedem Teilintervall $[t_i, t_{i+1}]$ Quadraturformel der Ordnung n.

Beispiel: `Zusammengesetzte Trapezregel`

$$\begin{aligned} T(h) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{2}\Big(f(t_i) + f(t_{i+1})\Big) \\ &= h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right). \end{aligned}$$

$\square$

Fehlerabschätzung zusammengesetzte Trapezregel.

Satz: *Für die zusammengesetzte Trapezregel gilt die Fehlerabschätzung*

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - T(h)\right| \le \frac{h^2}{12}(b-a)\|f^{(2)}\|_\infty.$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b f(x)\,dx - T(h)\right| &= \left|\sum_{j=0}^{N-1}\left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^{(j)}[f]\right)\right| \\
&\le \sum_{j=0}^{N-1}\left|\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^{(j)}[f]\right| \\
&\le \sum_{j=0}^{N-1}\frac{(t_{j+1}-t_j)^3}{12}\|f^{(2)}\|_\infty \\
&\le \frac{N}{12}h^3\|f^{(2)}\|_\infty = \frac{h^2}{12}(b-a)\|f^{(2)}\|_\infty \qquad \blacksquare
\end{aligned}$$

Die zusammengesetzte Simpson-Regel.

Wende die Simpson-Regel auf die Teilintervalle $[t_{2i}, t_{2i+2}]$ an, mit Knoten

$$t_{2i}, \quad t_{2i+1}, \quad t_{2i+2} \qquad \text{für } 0 \le i \le N/2-1,$$

wobei N gerade. Dann bekommt man die `zusammengesetzte Simpson-Regel`

$$\begin{aligned}
S(h) &= \frac{h}{3}\sum_{i=0}^{N/2-1}\left(f(t_{2i}) + 4f(t_{2i+1}) + f(t_{2i+2})\right) \\
&= \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + \ldots + 4f(b-h) + f(b)\right)
\end{aligned}$$

Satz: *Für die zusammengesetzte Simpson-Regel gilt die Fehlerabschätzung*

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - S(h)\right| \le \frac{h^4}{180}(b-a)\|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis: analog wie bei der zusammengesetzten Trapezregel. $\square$