Kapitel 4

Numerische Integration

Problem: Berechne für gegebene Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ das Riemann-Integral

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

Oft ist nur eine numerische Näherung möglich.

Beispiel 19.

(i) Rechteckregel: Wir approximieren $I(f)$ durch das Rechteck

$$I(f) \approx (b-a)f(a).$$

(ii) Mittelpunktregel: Wir werten die Funktion im Unterschied zu (i) im Mittelpunkt $\frac{a+b}{2}$ aus:

$$I(f) \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2}).$$

(iii) Trapezregel: Bei der Rechteck- und der Mittelpunktregel haben wir die Funktion f durch eine konstante Funktion approximiert. Bei der Trapezregel wählen wir die lineare Funktion, welche durch die Punkte $(a, f(a))$ und $(b, f(b))$ verläuft:

$$I(f) \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}.$$

(iv) Simpsonregel: Wir legen eine Parabel durch die drei Punkte $(a, f(a))$, $(\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$ und $(b, f(b))$ und berechnen die Fläche unter der Parabel:

$$I(f) \approx \frac{b-a}{6}\big(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\big).$$

Bevor wir uns etwas konkreter mit numerischen Verfahren zur Berechnung einer Näherungslösung beschäftigen betrachten wir Eigenschaften des bestimmten Integrals $I(f)$ und die Kondition des Problems.

Eigenschaften des bestimmten Integrals:

(i) Das Integral $\int_a^b f(x)dx$ existiert für stückweise stetige Funktionen. Ohne Einschränkung sei f im Folgenden stetig (siehe (ii)), d.h.

$$I:\ C[a,b] \to \mathbb{R}, \quad f \mapsto I(f)$$

auf dem Raum der stetigen Funktionen auf $[a,b]$.

(ii) Für jedes $c \in [a,b]$ gilt:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx$$

d.h. das Integral ist additiv bezüglich einer Zerlegung des Integrationsintervalls.

(iii) I ist linear, d.h. für alle stetigen Funktionen f, g und alle reellen Zahlen $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ gilt

$$I(\lambda f + \mu g) = \lambda I(f) + \mu I(g).$$

(iv) I ist monoton, d.h. falls $f \geq g$ auf $[a,b]$, dann auch

$$\int_a^b f(x)dx \geq \int_a^b g(x)dx.$$

Aus der Monotonie folgt

$$|\int_a^b f(x)dx| \leq \int_a^b |f(x)|dx,\ \forall_{f\in C[a,b]}. \tag{4.1}$$

Tatsächlich ist diese Aussage eine Charakterisierung, d.h. eine äquivalente Definition, der Monotonie.

Um Störungen der Eingabedaten (hier $f \in C[a,b]$) messen zu können, führen wir folgende Norm ein:

$$\|f\|_1 := \int_a^b |f(x)|dx = I(|f|).$$

In dieser Norm finden wir die Kondition des Problems:

Lemma 5. *Die (relative) Kondition der Integralberechnung* $\int_a^b f(x)dx$ *bezüglich der Norm* $\|.\|_1$ *ist*

$$\mathrm{cond}_1 = \frac{I(|f|)}{|I(f)|},$$

d.h. es gilt

$$\frac{\left|\int_a^b f(x)dx - \int_a^b \hat{f}(x)dx\right|}{\left|\int_a^b f(x)dx\right|} \leq \mathrm{cond}_1 \frac{\|f-\hat{f}\|_1}{\|f\|_1}.$$

Beweis: Folgt unmittelbar aus der Linearität und der Monotonie des Integrals:

$$\left|\int_a^b f(x)dx - \int_a^b \hat{f}(x)dx\right| \leq \int_a^b |f(x)-\hat{f}(x)|dx.$$

□

Das Problem ist somit schlecht konditioniert, wenn das Integral über den Betrag der Funktion im Verhältnis zum Betrag des Integrals sehr groß ist. Interpretieren wir das Integral als unendliche Summe, so wird die Analogie zur Auslöschung bei der Addition deutlich. Insbesondere bei stark oszillierenden Integranden, wo sich "die Flächen gegenseitig auslöschen" ist die Kondition des Problems schlecht. Solche Integranden treten in zahlreichen Anwendungen auf.

4.1 Quadratur-Formel

Die allgemeine Form einer Quadratur-Formel ist gegeben durch:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \overbrace{\sum_{i=1}^{s} b_i f(\underbrace{a + c_i(b-a)}_{\text{Stützstelle}})}^{\text{gewichtetes Mittel der Funktionswerte an den Stützstellen}}.$$

Dabei bezeichnen wir die b_i als Gewichte und die c_i als die Knoten der Quadraturformel. Tatsächlich ist eine Quadraturformel durch die Gewichte und Knoten eindeutig bestimmt. Wir schreiben daher kurz $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$.

Für die im Beispiel 19 erwähnten Quadraturformeln gilt:

Rechteckregel:	$s = 1$	$b_1 = 1$	$c_1 = 0$
Mittelpunktregel:	$s = 1$	$b_1 = 1$	$c_1 = \frac{1}{2}$
Trapezregel:	$s = 2$	$b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$	$c_1 = 0, c_2 = 1$
Simpsonregel:	$s = 3$	$b_1 = b_2 = \frac{1}{6}$, $b_2 = \frac{4}{6}$	$c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{2}$, $c_3 = 1$

Bemerkung 19. *Die Quadraturformel ist ebenfalls linear in f und monoton für $b_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, n$.*

Mit der Anzahl s von Knoten und Gewichten steigt der Aufwand der Quadraturformel gemessen in Funktionsauswertungen von f. Bei größerem Aufwand erwarten wir eine bessere Näherungslösung des Integrals. Die Approximationsgüte einer Quadraturformel wird durch die so genannte Ordnung charakterisiert.

Ordnung einer Quadraturformel: Jede Quadraturformel sollte zumindest Integrale mit konstantem Integranden K exakt berechnen können, d.h.

$$\int_a^b K dx = (b-a)K = (b-a)\sum_{i=1}^{s} b_i K.$$

Diese Mindestanforderung führt auf die Bedingung

$$\sum_{i=1}^{s} b_i = 1.$$

Um entsprechende Bedingungen für lineare, quadratische, kubische,... Integranden herzuleiten, gehen wir ohne Einschränkung von $a = 0$ und $b = 1$ aus.

$$\frac{1}{2} = \int_0^1 x dx = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i$$
$$\frac{1}{3} = \int_0^1 x^2 dx = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2$$

bzw. allgemein:

$$\frac{1}{p} = \int_0^1 x^{p-1} dx = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{p-1}.$$

Definition 10. *Eine Quadraturformel $(b_i, c_i)_{i=1,\dots,s}$ hat die Ordnung p, falls sie exakte Lösungen für alle Polynome vom Grad $\leq p-1$ liefert.*

Nach den Überlegungen oben ist dies äquivalent zu der Bedingung

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q} \text{ für } q = 1, \dots, p. \tag{4.2}$$

Nachtrag zur ohne Einschränkung gemachten Annahme $a = 0,\ b = 1$. Für ein Polynom $f(x)$ vom Grad $q \leq p-1$ gilt nach der Substitutionsregel:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= (b-a)\int_0^1 \underbrace{f(a+\tau(b-a))}_{\substack{\text{ebenfalls ein Polynom}\\ \text{vom Grad } q}} d\tau \\ &= (b-a)\sum_{i=1}^{s} b_i f(a + c_i(b-a)).\end{aligned}$$

Beispiel 20. *Die Ordnungen der im Beispiel 19 angegebenen Quadraturformeln sind*

Rechteckregel:	$p = 1$	$(s = 1)$	
Mittelpunktregel:	$p = 2$!	$(s = 1)$	
Trapezregel:	$p = 2$	$(s = 2)$	
Simpsonregel:	$p = 4$!	$(s = 3)$	$(q = 5 : \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5})$

Warum ist die Mittelpunktregel auch exakt für lineare Funktionen und die Simpsonregel auch für Polynome vom Grad 3?

Definition 11. *Eine Quadraturformel heißt symmetrisch, falls gilt:*

$$c_i = 1 - c_{s+1-i}$$
$$b_i = b_{s+1-i},$$

d.h. die Knoten sind symmetrisch zum Punkt $\frac{1}{2}$ verteilt und der Gewichtsvektor liest sich von oben nach unten oder von unten nach oben identisch.

Satz 25. *Die Ordnung einer symmetrischen Quadraturformel ist gerade.*

Beweis: Wir nehmen an, die Ordnung sei ungerade, und führen dies zu einem Widerspruch. Konkret nehmen wir an, die Quadraturformel sei exakt für Polynome vom Grad $\leq 2m-2$, und zeigen, dass sie tatsächlich exakt für Polynome bis zum Grad $\leq 2m-1$ ist.

Sei $f(x)$ ein Polynom vom Grad $2m-1$. Dann lässt sich f darstellen als

$$f(x) = K(x - \frac{1}{2})^{2m-1} + g(x),$$

wobei $g(x)$ maximal den Grad $2m-2$ besitzt. Somit gilt aufgrund der Linearität des Integrals

$$\int_0^1 f(x)dx = K \int_0^1 (x - \frac{1}{2})^{2m-1} dx + \underbrace{\int_0^1 g(x)dx}_{\substack{\text{wird exakt durch die} \\ \text{Quadraturformel be-} \\ \text{rechnet}}}.$$

Wir betrachten den ersten Summanden genauer:

$$\int_0^1 (x - \frac{1}{2})^{2m-1} dx = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} x^{2m-1} dx = 0.$$

Für die entsprechende Quadraturformel gilt

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{s} b_i (\underbrace{c_i - \frac{1}{2}}_{\frac{1}{2} - c_{s+1-i}})^{2m-1} &= \sum_{i=1}^{s} b_{s+1-i} (\frac{1}{2} - c_{s+1-i})^{2m-1} \\ &= - \sum_{j=1}^{s} b_j (c_j - \frac{1}{2})^{2m-1} \end{aligned}$$

und daher auch

$$\sum_{i=1}^{s} b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} = 0.$$

Insgesamt erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &= \int_0^1 g(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{s} b_i g(c_i) = \sum_{i=0}^{s} b_i f(c_i). \end{aligned}$$

□

Im folgenden Satz wird deutlich, dass bei vorgegebenen Knoten $c_1 < \ldots < c_s$ die Quadraturformel schon eindeutig bestimmt ist, wenn wir mindestens die Ordnung s fordern. Die Gewicht $b_1, \ldots, b_s$ lassen sich dann eindeutig aus den Ordnungsbedingungen (4.2) (p ersetzt durch s) berechnen. Dies ist leicht einzusehen. Denn (4.2) ist in diesem Fall äquivalent zu

$$\begin{pmatrix} c_1^0 & c_2^0 & \ldots & c_s^0 \\ c_1^1 & c_2^1 & \ldots & c_s^1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & \ldots & c_s^{s-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \vdots \\ \frac{1}{s} \end{pmatrix}$$

und die Vandermonde-Matrix C ist genau dann invertierbar, wenn die Knoten c_i paarweise verschieden sind. Insbesondere gilt mit $\tau = (1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{s})^T$ die Darstellung

$$b = C^{-1}\tau.$$

Alternativ gilt für das i-te Lagrange-Polynom $L_i(x)$ zu den paarweise verschiedenen Knoten $c_1, .., c_s$ die Gleichung

$$b_i = \sum_{j=1}^{s} b_j L_i(c_j) = \int_0^1 L_i(x)dx.$$

Das i-te Lagrange-Polynom der Knoten $c_1 < \dots < c_s$ ist das eindeutig bestimmte Polynom vom Grad $= s-1$, welches in allen Knoten c_j, $j \neq i$, verschwindet und in c_i den Wert 1 annimmt:

$$\deg L_i = s-1, \qquad L_i(c_j) = \begin{cases} 0, & \text{falls} \quad i \neq j \\ 1, & \text{falls} \quad i = j. \end{cases}$$

Satz 26. *Seien Knoten $c_1 < \dots < c_s$ vorgegeben. Verlangen wir von einer Quadraturformel $(b_i, c_i)_{i=1,\dots,s}$ mindestens die Ordnung s, so sind die Gewichte eindeutig bestimmt durch*

$$b = C^{-1}\tau$$

bzw.

$$b_i = \int_0^1 L_i(x)dx,$$

wobei

$$L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{s} \frac{x - c_j}{c_i - c_j}$$

das i-te Lagrange-Polynom bezüglich der Knoten c_j ist.

4.1.1 Quadraturformeln mit erhöhter Ordnung

Satz 26 macht deutlich: Sind die Knoten $c_1 < \dots < c_s$ erst einmal gewählt, so sind die Gewichte einer Quadraturformel mit Ordnung $p \geq s$ und somit die Formel insgesamt bereits festgelegt. Eine Frage, die sich nun stellt ist, wie die Knoten gewählt werden sollten, um die Ordnung $p \geq s$ zu maximieren. Wie groß kann die Ordnung überhaupt sein?

Wir suchen Quadraturformeln mit Ordnung $p = s + m$, $m \geq 1$, d.h. Polynome vom Grad $\leq s + m - 1$ sollen exakt integriert werden. Um entsprechende Bedingungen an die Knoten herzuleiten, benutzen wir das Polynom

$$M(x) = (x - c_1)(x - c_2) \cdot \ldots \cdot (x - c_s).$$

Offenbar ist der Grad von $M(x)$ gleich s und für jedes Polynom $f(x)$ vom Grad $\leq s + m - 1$ finden wir

$$f(x) = M(x)g(x) + r(x),$$

wobei $g(x)$ und $r(x)$ Polynome vom Grad $\leq m - 1$ bzw. $\leq s - 1$ sind. Damit gilt

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 M(x)g(x)dx + \int_0^1 r(x)dx$$
$$\sum_{i=1}^{s} b_i f(c_i) = \sum_{i=1}^{s} b_i \underbrace{M(c_i)}_{=0} g(c_i) + \sum_{i=0}^{s} b_i r(c_i),$$

wobei jeweils die letzten Summanden gleich sind. Wir erhalten somit: