Anhang B

Numerische Quadratur

Bemerkung B.1 Motivation. Sei $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ eine integrierbare Funktion. Die Berechnung von

$$I(f) := \int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x$$

kann schwierig oder sogar analytisch nicht durchführbar sein.

Der bekannte Weg aus der Analysis besteht darin, dass man

- zuerst eine Stammfunktion von $f(x)$ berechnet
- und dann die Integrationsgrenzen a und b einsetzt.

Dafür gibt es auch leistungsfähige Software, zum Beispiel MAPLE oder MATHEMATICA. □

B.1 Interpolatorische Quadraturformeln

Jede explizite Formel, die eine Näherung für $I(f)$ darstellt, wird Quadraturformel genannt.

Bemerkung B.2 Grundidee. Eine Näherung $I_n(f)$ an $I(f)$ erhält man, indem man die Funktion $f(x)$ durch eine Approximation $f_n(x)$ ersetzt, die man einfacher integrieren kann

$$I_n(f) := \int_a^b f_n(x) \, \mathrm{d}x.$$

Polynome sind Funktionen, die sich einfach integrieren lassen. Wählt man $(n+1)$ paarweise verschiedene Stützstellen aus $[a, b]$, so hat das Lagrange–Interpolationspolynom von $f(x)$ die Gestalt, siehe Abschnitt 3.2.1,

$$p_n f(x) = \sum_{i=0}^{n} \underbrace{\left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)}_{=: l_i(x)} f(x_i).$$

Man erhält

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x) \, \mathrm{d}x. \tag{B.1}$$

Das ist eine spezielle Form einer interpolatorischen Quadraturformel. □

Definition B.3 Interpolatorische Quadraturformel. Eine interpolatorische Quadraturformel besitzt die Gestalt

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i).$$

Die Punkte x_i werden Knoten genannt und die Werte α_i Gewichte. □

Definition B.4 Ordnung einer Quadraturformel. Als Ordung oder Genauigkeit einer Quadraturformel definiert man diejenige natürliche Zahl $r \geq 0$, für die gilt $I_n(f) = I(f)$ für alle $f \in P_r$. Das bedeutet, eine Quadraturformel r–ter Ordnung integriert alle Polynome vom Grad r exakt. □

Bemerkung B.5 Im einfachsten Fall, falls $f(x)$ also eine konstante Funktion $f(x) = c$ ist, verlangt man, dass die Quadraturformel exakt sein soll, das heißt $I_n(f) = I(f)$. Aus dieser Bedingung folgt

$$I(f) = c\,(b-a) = I_n(f) = c\left(\sum_{i=0}^{n} \alpha_i\right),$$

also

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i = b - a.$$

Das liefert eine Bedingung an die Gewichte. □

B.1.1 Mittelpunktregel

Bei der Mittelpunktregel wird $f(x)$ durch eine konstante Funktion ersetzt, deren Wert der Funktionswert in der Mitte des Intervalls ist

$$I_0(f) = \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right)\,\mathrm{d}x = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a).$$

Lemma B.6 Quadraturfehler der Mittelpunktregel. *Sei $f \in C^2([a,b])$, dann gilt*

$$I(f) - I_0(f) = \frac{f''(\xi)}{3}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3$$

mit $\xi \in [a,b]$.

Beweis: Taylor–Entwicklung von $f(x)$ im Intervallmittelpunkt liefert

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi)}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2$$

mit $\xi \in [a,b]$. Ersetzt man im Integral $f(x)$ durch die Taylor–Entwicklung, erhält man für den Quadraturfehler

$$\begin{aligned} & I(f) - I_0(f) \\ = \ & \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) \\ = \ & f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot 0 + \frac{f''(\xi)}{3}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3 - f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) \\ = \ & \frac{f''(\xi)}{3}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3. \end{aligned}$$

Bei der Rechnung wurde ausgenutzt, dass der lineare Term der Taylor–Entwicklung bezüglich des Intervallmittelpunktes eine ungerade Funktion ist und somit das Integral verschwindet. ■

Folgerung B.7 Ordnung der Mittelpunktregel. *Die Mittelpunktregel ist von 1. Ordnung.*

Beweis: Für konstante und lineare Polynome verschwindet die zweite Ableitung. Damit ergibt sich die Folgerung direkt aus Lemma B.6. ■

Bemerkung B.8 Zusammengesetzte interpolatorische Quadraturformeln. Bei der praktischen Berechnung von $I_n(f)$ wird man im allgemeinen nicht $f(x)$ durch $p_n f(x)$ im gesamten Intervall $[a,b]$ ersetzen. Dies ist für kleine n zu ungenau und führt für große n zu unbrauchbaren Interpolationen. Stattdessen wird man $[a,b]$ zuerst in Teilintervalle $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, n$, $x_0 = a$, $x_n = b$, zerlegen und auf jedem Teilintervall $f(x)$ durch $p_n f(x)$ approximieren. Das liefert die sogenannten zusammengesetzten interpolatorischen Quadraturformeln. □

Bemerkung B.9 Zusammengesetzte Mittelpunktregel. Teilt man $[a,b]$ in m gleichlange Teilintervalle der Länge $h=(b-a)/m$ und seien $x_k=a+(2k+1)h/2$, $k=0,\ldots,m-1$, die Mittelpunkte der Teilintervalle. Dann hat die zusammengesetzte Mittelpunktregel die Gestalt

$$I_{0,m}(f)=h\sum_{k=0}^{m-1}f(x_k).$$

Analog zu oben erhält man für den Quadraturfehler

$$I(f)-I_{0,m}(f)=\frac{b-a}{24}h^2f''(\xi),\quad \xi\in[a,b].$$

Halbiert man also die Intervalllänge, dann reduziert sich der Fehler um den Faktor 4 und man hat Konvergenz des Fehlers von zweiter Ordnung. □

Beispiel B.10 Wählt man für $f(x)$ die Funktion aus Beispiel 4.13, so erhält man für unterschiedliche Anzahlen von Intervallen

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler zum MAPLE–Wert	Konvergenz
1	1.92995981	0.0044223426	
2	1.92667855	0.0011410811	1.95
4	1.92582534	0.00028786718	1.99
8	1.92560961	7.2137514e-05	2
16	1.92555551	1.8045197e-05	2
32	1.92554198	4.511978e-06	2
64	1.92553860	1.1280369e-06	2
128	1.92553775	2.8201189e-07	2
256	1.92553754	7.0503139e-08	2
512	1.92553749	1.7625794e-08	2
1024	1.92553747	4.4064479e-09	2
2048	1.92553747	1.1016124e-09	2
4096	1.92553747	2.7540237e-10	2

Man erkennt die zweite Ordnung in der Konvergenz. □

B.1.2 Trapezregel

Bemerkung B.11 Herangehensweise. Man wird erhoffen, dass die Ergebnisse genauer werden, wenn man die Funktion $f(x)$ nicht durch eine stückweise konstante Funktion approximiert, sondern durch eine stückweise Funktion mit Polynomen höheren Grades, zum Beispiel durch eine stückweise lineare Funktion. Verwendet man das Lagrange–Interpolationspolynom vom Grad 1 bezüglich a und b, so erhält man die sogenannte Trapezregel

$$\begin{aligned}
I_1(f) &= f(a)\int_a^b\frac{x-b}{a-b}\,\mathrm{d}x+f(b)\int_a^b\frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x\\
&= -\frac{f(a)}{a-b}\frac{(a-b)^2}{2}+\frac{f(b)}{b-a}\frac{(b-a)^2}{2}\\
&= (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}.
\end{aligned}$$

□

Lemma B.12 Quadraturfehler der Trapezregel. *Sei $f\in C^2([a,b])$, dann gilt*

$$I(f)-I_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

mit $\xi\in[a,b]$.

Beweis: Übungsaufgabe. ■

Folgerung B.13 Ordnung der Trapezregel. *Die Trapezregel ist von 1. Ordnung.*

Bemerkung B.14 Fazit. Obwohl man bei der Trapezregel ein Polynom höheren Grades als bei der Mittelpunktregel nutzt, sind beide Quadraturformeln von erster Ordnung. □

Beispiel B.15 Zusammengesetzte Trapezregel. Bei der zusammengesetzten Trapezregel wird $f(x)$ durch einen Polygonzug approximiert.

Wählt man für $f(x)$ die Funktion aus Beispiel 4.13, so erhält man für unterschiedliche Anzahlen von Intervallen

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler zum MAPLE–Wert	Konvergenz
1	1.91652690	0.0090105697	
2	1.92324335	0.0022941135	1.97
4	1.92496095	0.0005765162	1.99
8	1.92539314	0.00014432451	2
16	1.92550137	3.6093497e-05	2
32	1.92552844	9.02415e-06	2
64	1.92553521	2.256086e-06	2
128	1.92553690	5.6402454e-07	2
256	1.92553733	1.4100632e-07	2
512	1.92553743	3.5251594e-08	2
1024	1.92553746	8.8129013e-09	2
2048	1.92553747	2.2032198e-09	2
4096	1.92553747	5.5080385e-10	2

□

B.2 Die Newton–Cotes–Formeln

Bemerkung B.16 Herangehensweise. Die Newton–Cotes[1]–Formeln (NC–Formeln) sind die Verallgemeinerung der in Abschnitt B.1 eingeführten Quadraturformeln. Diese Formeln basieren auf
- der Nutzung der Lagrange–Interpolation,
- einer Zerlegung von $[a,b]$, bei welcher die Knoten den gleichen Abstand h voneinander besitzen.

□

Definition B.17 Geschlossene und offene Newton–Cotes–Formeln. Man nennt eine Newton–Cotes–Formel geschlossen, wenn die Randpunkte des Intervalls Knoten der Quadraturformel sind

$$x_0 = a,\ x_n = b,\ h = \frac{b-a}{n},\ n \ge 1.$$

Eine Newton–Cotes–Formel heißt offen, wenn die Randpunkte keine Knoten der Quadraturformel sind. Dann wählt man

$$x_0 = a + h,\ x_n = b - h,\ h = \frac{b-a}{n+2},\ n \ge 0.$$

□

Bemerkung B.18 Gewichte der Newton–Cotes–Formeln. Nach der Festlegung der Knoten, müssen jetzt noch die Gewichte der Newton–Cotes–Formeln berechnet werden. Eine wichtige Eigenschaft dieser Formeln ist, dass diese Gewichte von n und h abhängen, aber nicht vom Integrationsintervall $[a,b]$. Damit können die Gewichte unabhängig von $[a,b]$ tabelliert werden.

Betrachte die geschlossenen Newton–Cotes–Formeln. Mit der Variablentransformation $x = x_0 + th$, das heißt $t = (x - x_0)/h$ erhält man mit (B.1)

$$\alpha_i = \int_a^b l_i(x)\ \mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_n} \left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)\ \mathrm{d}x$$

[1]Roger Cotes (1682 – 1716)

$$
\begin{aligned}
&= \int_0^n \left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x_0 + th - (x_0 + jh)}{x_0 + ih - (x_0 + jh)} \right) h\ dt = h \int_0^n \left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{t-j}{i-j} \right)\ dt \\
&=: h \int_0^n \varphi_i(t)\ dt.
\end{aligned}
$$

Man erhält die geschlossene Newton–Cotes–Formel

$$
I_n(f) = h \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i) \quad \text{mit} \quad \omega_i = \int_0^n \varphi_i(t)\ dt.
$$

Für die offenen Newton–Cotes–Formeln ergibt sich die gleiche Darstellung mit

$$
\omega_i = \int_{-1}^{n+1} \varphi_i(t)\ dt,
$$

Übungsaufgabe.

Mit der Bedingung an die Gewichte aus Bemerkung B.5 erhält man

$$
\sum_{i=0}^{n} \omega_i = \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{n} \alpha_i = \frac{b-a}{h} = \begin{cases} n & \text{geschlossene NC–Formel,} \\ n+2 & \text{offene NC–Formel.} \end{cases}
$$

Polynomgrad	Gewichte pro Intervall	Name
1	$\frac{1}{2}\quad\frac{1}{2}$	Trapezregel
2	$\frac{1}{6}\quad\frac{4}{6}\quad\frac{1}{6}$	Simpson[2]–Regel
3	$\frac{1}{8}\quad\frac{3}{8}\quad\frac{3}{8}\quad\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$–Regel
4	$\frac{7}{90}\quad\frac{32}{90}\quad\frac{12}{90}\quad\frac{32}{90}\quad\frac{7}{90}$	Milne–Regel

Tabelle B.1: Gewichte einiger geschlossener Newton–Cotes–Formeln.

Polynomgrad	Gewichte pro Intervall	Name
0	2	Mittelpunktregel
1	$\frac{3}{2}\quad\frac{3}{2}$	
2	$\frac{8}{3}\quad -\frac{4}{3}\quad\frac{8}{3}$	

Tabelle B.2: Gewichte einiger offener Newton–Cotes–Formeln.

In den Tabellen B.1 und B.2 sind die Gewichte einiger Newton–Cotes–Formeln zusammengestellt. Man beachte das negative Gewicht für die offene Newton–Cotes–Formel mit $n = 2$. Man stellt fest, dass Newton–Cotes–Formeln höheren Grades, $n \geq 8$ für geschlossene und $n \geq 2$ für offene Formeln, negative Gewichte besitzen. □

Satz B.19 Quadraturfehler. *Sei $f \in C^{n+2}([a,b])$. Für n gerade sind die Newton–Cotes–Formeln von $(n+1)$–ter Ordnung genau und für n ungerade von n–ter Ordnung.*

Beweis: Relativ lang, siehe Literatur. ■

[2] Thomas Simpson (1710 – 1761)