Kapitel 5

Numerische Integration

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

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

kann schwierig oder sogar analytisch nicht durchführbar sein. Jede explizite Formel, die eine Näherung für $I(f)$ darstellt, wird Quadraturformel genannt.

5.1 Interpolatorische Quadraturformeln

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

$$I_n(f) := \int_a^b f_n(x)\, dx.$$

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 die Gestalt, siehe (4.4),

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

Man erhält

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

Das ist eine spezielle Form der Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i). \tag{5.1}$$

Die Punkte x_i in (5.1) werden Knoten genannt und die Werte α_i Gewichte. Falls $f(x)$ eine konstante Funktion ist, $f(x) = c$, so verlangt man, dass die Quadraturformel exakt sein soll, also $I_n(f) = I(f)$. Aus dieser Bedingung folgt

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

also
$$\left(\sum_{i=0}^{n} \alpha_i\right) = b - a.$$

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.

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. 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.

Mittelpunktregel

In der Mittelpunktregel wird f durch eine konstante Funktion ersetzt, deren Wert der Funktionswert in der Mitte des Intervalls ist

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

Sei $f \in C^2([a, b])$. 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 $f(x)$ durch die Taylor–Entwicklung, erhält man für den Quadraturfehler

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

Bei der Rechnung wurde ausgenutzt, dass der lineare Term der Taylor–Entwicklung bezüglich des Intervallmittelpunktes eine ungerade Funktion ist und somit das Integral verschwindet. Es folgt, dass die Mittelpunktregel exakt für konstante und lineare Polynome ist, da dort die zweite Ableitung gleich Null ist. Sie besitzt die Ordnung $r = 1$.

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

$$I(f) - I_{0,m}(f) = \frac{b-a}{24} H^2 f''(\xi).$$

Trapezregel

Bei dieser Quadraturformel verwendet man das Lagrange–Interpolationspolynom vom Grad 1 bezüglich a und b. Man erhält

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

Für den Quadraturfehler kann man mit Taylor–Entwicklung zeigen, dass

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

mit $\xi \in [a, b]$. Damit ist die Trapezregel auch von erster Ordnung. Die zusammengesetzte Trapezregel für eine gleichmäßige Zerlegung von $[a, b]$ wie oben hat die Form

$$I_m(f) = \frac{H}{2}\sum_{k=0}^{m-1}\left(f(x_k)+f(x_{k+1})\right) = H\left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + \ldots + f(x_{m-1}) + \frac{f(b)}{2}\right),$$

wobei hier $x_k = a + kH$, $k = 0, \ldots, m$, die Grenzen der Teilintervalle sind.

Simpson–Regel

Bei der Simpson–Regel wird f durch das Interpolationspolynom 2. Grades bezüglich der Knoten $x_0 = a$, $x_1 = (a + b)/2$ und $x_2 = b$ ersetzt. Man erhält die Quadraturformel

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

Der Quadraturfehler ist

$$I(f) - I_2(f) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\xi),$$

falls $f \in C^4([a, b])$, mit $\xi \in [a, b]$. Die Simpson–Regel ist von dritter Ordnung genau. Die zusammengesetzte Simpson–Regel für eine äquidistante Zerlegung von $[a, b]$ hat die Gestalt

$$I_{2,m}(f) = \frac{H}{6}\left[f(x_0) + 2\sum_{r=1}^{m-1} f(x_{2r}) + 4\sum_{s=0}^{m-1} f(x_{2s+1}) + f(x_{2m})\right],$$

wobei $x_k = a + kH/2$, $k = 0, \ldots, 2m$, die Knoten sind.

5.2 Weiterführende Quadraturformeln

Die im vorherigen Abschnitt angegebenen Quadraturformeln lassen sich systematisch verallgemeinern. Man erhält die sogenannte Newton–Cotes–Formeln. In diesen Formeln besitzten die Knoten in $[a, b]$ den gleichen Abstand und $f(x)$ wird durch ein Polynom n–ten Grades approximiert. Die Ordnung der Newton–Cotes–Formeln ist n oder $n + 1$. Das ist jedoch nicht die maximale Ordnung, die man mit einem Polynom n–ten Grades erreichen kann. Um eine höhere Genauigkeit zu erreichen, muss man noch die Einschränkung, dass die Knoten äquidistant sein sollen, fallenlassen. Dann kommt man zu den Gaußschen Quadraturformeln, bei denen man sogar die Ordnung $2n + 1$ erhält.