Numerische Verfahren und Grundlagen der Analysis

Rasa Steuding

Hochschule RheinMain Wiesbaden

Wintersemester 2011/12

Quadraturverfahren

Motivation

Es soll das bestimmte Integral

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

berechnet werden. Diese Aufgabe kann man für eine gewisse Klasse von Funktionen durch explizite Angabe einer Stammfunktion $F(x)$ lösen:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

In vielen Fällen lässt sich aber die Stammfunktion nicht in geschlossener Form angeben und man ist auf Näherungsverfahren angewiesen.

Die numerische Berechnung von $I(f)$ bezeichnet man auch als **numerische Quadratur**. Diesen Namen für numerische Integration gab die klassische Aufgabe der *Quadratur des Kreises*, das (wegen der *Transzendenz* von π) nicht lösbare Problem, mit Zirkel und Lineal ein Quadrat mit dem Flächeninhalt des Einheitskreises zu konstruieren.

Gauß'sche Glockenkurve. I

Einige wichtige Funktionen erlauben keine explizite Darstellung der Stammfunktion, wie das folgende Beispiel zeigt.

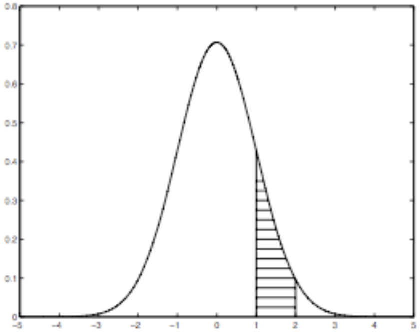
Ist eine Variable x normalverteilt, so beschreiben der Mittelwert μ und die Standardabweichung σ die gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung mittels der Funktion

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-x^2-\mu^2}{2\sigma^2}\right).$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Wert x zwischen a und b auftritt ist durch das Intergral

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_a^b \exp\left(\frac{-x^2-\mu^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

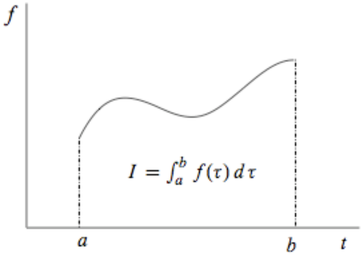
gegeben, das wir **nur numerisch** berechnen können.



Gauß'sche Glockenkurve für $\mu = 0$, $\sigma = 1$. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine $(0, 1)$-normalverteilte Zufallsvariable einen Wert zwischen 1 und 2 annimmt, entspricht der Größe der markierten Fläche.

Bestimmte Integral als Fläche

Das bestimmte Integral lässt sich interpretieren als die Fläche unter dem Funktionsgraphen von $f(x)$. Daher ist $I(f)$ genau die Größe der von $f(x)$ und der x-Achse begrenzten Fläche zwischen a und b.



Mit Hilfe dieser geometrischen Bedeutung des Integrals können wir $I(f)$ approximieren, in dem wir die dazugehörigen Fläche approximieren.

Rechteckregel. I

Aufgrund der Definition des Riemannschen Integrals durch Riemannschen Summen liegt es nahe, zur Berechnung von $I(f)$ die so genannte **Rechteckregel** zu verwenden:

Wir unterteilen das Intervall $[a, b]$ gemäß der Zerlegung

$$Z_n : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

in n disjunkte Teilintervalle (x_j, x_{j+1}). Die Summe

$$Qf := \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j^*)(x_{j+1} - x_j) \text{ mit einem } x_j^* \in [x_j, x_{j+1}]$$

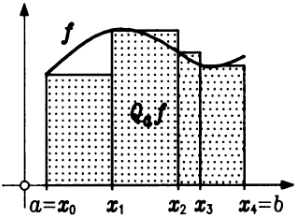
bildet einen Nährungswert an das bestimmte Integral $I(f)$.

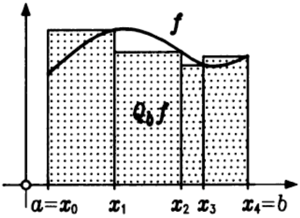
Rechteckregel. II

Die folgende Wahl für x_j^* ist üblich:

- $x_j^* = x_j$ führt zu $Q_a f := \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j)(x_{j+1} - x_j)$.
- $x_j^* = x_{j+1}$ führt zu $Q_b f := \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{j+1})(x_{j+1} - x_j)$.
- $x_j^* = \frac{x_{j+1}+x_j}{2}$ führt zur sogenanten **(Mittelpunktregel)**

  $Q_M f := \sum_{j=0}^{n-1} f(\frac{x_{j+1}+x_j}{2})(x_{j+1} - x_j)$.





Ist die Intervallteilung äquidistant gewählt,

$$h := x_{j+1} - x_j = \frac{b-a}{n}, \quad 0 \le j \le n-1,$$

erhält man

$$Q_a f = h \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j), \quad Q_b f = h \sum_{j=1}^{n} f(x_j) \text{ und } Q_M f = h \sum_{j=0}^{n-1} f\left(x_j + \frac{h}{2}\right).$$

Beispiel: Wir berechnen eine Näherung für $\int_1^2 x^2 dx$ mit der Rechteckregel $Q_b f$ für 4 Teilintervale. Wir erhalten
$h = (2-1)/4 = 1/4$, $x_0 = 1$, $x_1 = 1 + 1/4$, $x_2 = 1 + 2/4$, $x_3 = 1 + 3/4$, $x_4 = 2$ und

$$Q_b = \frac{1}{4}\left(\left(\frac{5}{4}\right)^2 + \left(\frac{6}{4}\right)^2 + \left(\frac{7}{4}\right)^2 + 2^2\right) = \frac{87}{32} = 2.71\ldots$$

Zum Vergleich:

$$\int_1^2 x^2 dx = \frac{2^3 - 1^3}{3} = \frac{7}{3} = 2.33\ldots$$

Fehlerschranke für die Rechteckregeln. I

Für eine auf (a, b) stetig differenzierbare Funktion f erhalten wir über den Mittelwertsatz

$$f(x) = f(x_j^*) + f'(\xi_j)(x - x_j^*), \quad \xi_j^* \in (\min(x, x_j^*), \max(x, x_j^*)),$$

die Fehlerdarstellung

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - hf(x_j^*) = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f'(\xi_j)(x - x_j^*)dx,$$

wobei $h := x_{j+1} - x_j$. Für $x_j^* = x_j$ gilt also

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - hf(x_j) = f'(\xi_j^*)\frac{h^2}{2}, \quad \xi_j^*(x_j, x_{j+1}),$$

da ξ_j stetig von x abhängt.

Fehlerschranke für die Rechteckregeln. II

Für den Quadraturfehler $R_n f$, der bei der Näherung

$$\int_a^b f(x)dx = Q_a f + R_n f$$

auftritt, ergibt sich damit

$$R_n f = \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{n-1} f'(\xi_j^*) = \frac{h}{2}(b-a)\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} f'(\xi_j^*) = \frac{h}{2}f'(\xi)(b-a)$$

mit $\xi \in (a,b)$ nach dem Zwischenwertsatz. Für die Quadraturformel $Q_b f$ mit $x_j^* = x_{j+1}$ ergibt sich entsprechend

$$R_n f = -\frac{h}{2}f'(\hat{\xi})(b-a), \quad \hat{\xi} \in (a,b),$$

so dass man sowohl für $Q_a f$ als auch für $Q_b f$ die Fehlerschranke

$$|R_n f| \leq \frac{h}{2}\max_{x\in[a,b]}|f'(x)|(b-a)$$

erhält.

Fehlerschranke für die Rechteckregeln. III

Beispiel: Im obigen Beispiel gilt

$$\begin{aligned} |R_n f| &\leq \frac{h}{2} \max_{x\in[a,b]} |f'(x)|(b-a) \\ &= \frac{1}{4\cdot 2} \max_{x\in[1,2]} |(x^2)'|(2-1) \\ &= \frac{1}{8} \max_{x\in[1,2]} |2x| = \frac{1}{8}\cdot 4 = 0.5 \end{aligned}$$

Bei der Mittelpunktregel ist jedoch mehr zu erreichen, wenn die Funktion f zwei mal stetig differenzierbar ist. In diesem Fall erhält man

$$|R_n f| \leq \frac{h^2}{24} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|(b-a).$$

Bemerkungswert ist die Tatsache, dass diese Schranke von Ordnung $O(h^2)$ ist.

Bis jetzt haben wir die Funktion f auf jedem der Teilintervallen (x_j, x_{j+1}), $0 \leq j \leq n-1$, durch eine Konstante $f(x_j^*)$, $x \in [x_j, x_{j+1}]$, *interpoliert*. Interpoliert man die Funktion f über den Teileintervallen stückweise linear, so erhält man als die Summe der enstehenden Trapezenflächen

$$T_n f := \sum_{j=0}^{n-1} \frac{y_j + y_{j+1}}{2}(x_{j+1} - x_j), \quad y_j = f(x_j),$$

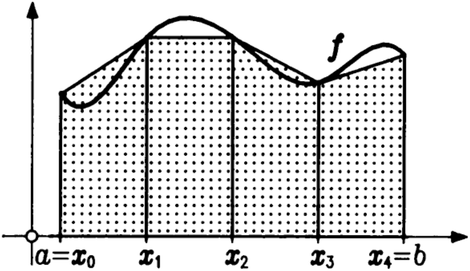
einen Näherungswert für das bestimmte Integral

$$\int_a^b f(x)dx = T_n f + R_n f$$

mit

$$|R_n f| \leq \frac{h^2}{12} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|(b-a).$$

Trapezregel. II



Trapezregel. III

Mit equidistanten Stützstellen nimmt diese Trapezregel die Form

$$T_n f = h\left(\frac{1}{2}y_0 + \sum_{j=1}^{n-1} y_j + \frac{1}{2}y_n\right)$$

an.

Beispiel: Wir berechnen einen Näherungswert T_4 für $\int\limits_1^2 x^2 dx$ mit Hilfe der Trapezregel für 4 Teilintervalle. Wir erhaten
$h = (2-1)/4 = 1/4$, $x_0 = 1$, $x_1 = 1 + 1/4$, $x_2 = 1 + 2/4$, $x_3 = 1 + 3/4$, $x_4 = 2$ und

$$T_4 = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2}1^2 + \frac{5}{4}^2 + \frac{3}{2}^2 + \frac{7}{4}^2 + \frac{1}{2}2^2\right) = \frac{75}{32} = 2.34\ldots$$

Zum Vergleich:

$$\int_1^2 x^2 dx = \frac{2^3 - 1^3}{3} = \frac{7}{3} = 2.33\ldots$$

Newtonsche Inerpolationspolynom

Wir wählen die Indizierung der Stützstellen wie folgt: $x_j = x_0 + jh$, $0 \leq j \leq n$ mit der festen Srittweite h. Das Inerpolationspolynom nach dem Ansatz von mit Newton nimmt die Gestalt

$$p(x) = f(x_0) + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \cdots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_0)\ldots(x - x_{n-1})$$

an, wobei

$$\begin{aligned} \Delta^0 y_j &:= y_j \\ \Delta^m y_j &:= \Delta^{m-1} y_{j+1} - \Delta^{m-1} y_j, \quad (m \geq 1). \end{aligned}$$

Beispiel: Für die Stützstellen $(-1, 0)$, $(0, 2)$, $(1, 0)$ erhält man

$$\begin{aligned} p(x) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x0)(x - x_1) \\ &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta y_1 - \Delta y_0}{2!h^2}(x - x0)(x - x_1) \\ &= 0 + \frac{2 - 0}{1}(x - (-1)) + \frac{(0 - 2) - (2 - 0)}{2 \cdot 1^2}(x - (-1))(x - 0) \\ &= 2 - 2x^2. \end{aligned}$$

Die Simpsonsche Regel. I

Ene Näherung höheren Grades könnte man dadurch erreichen, dass der Integrand f über dem Doppelintevall $[x_{2k}, x_{2k+2}]$ durch ein quadratisches Polynom interpoliert wird (unter Annahme n ist gerade). Dann gilt

$$\tilde{p}(x) = y_{2k} + \frac{\Delta y_{2k}}{h}(x - x_{2k}) + \frac{\Delta^2 y_{2k}}{2h^2}(x - x_{2k})(x - x_{2k+1})$$

für $x \in [x_{2k}, x_{2k+2}]$ und daher

$$\int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} \tilde{p}(x)dx = \frac{h}{3}(y_{2k} + 4y_{2k+1} + y_{2k+2}).$$

Damit erhalten wir eine Näherung für das bestimmte Integral

$$\int_{x_0}^{x_{2k}} f(x)dx = S_{2k}f + R_{2k}f$$

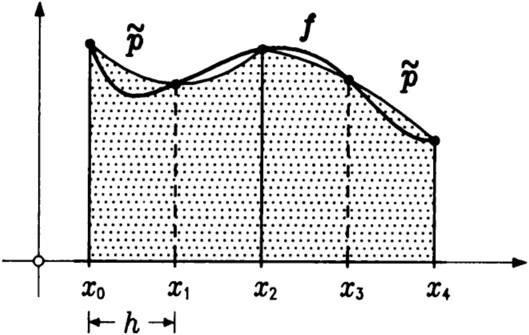
mit **Simpsonsche Regel**

$$S_{2k}f = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 \cdots + 4y_{2k-1} + y_{2k})$$

und Fehlerabschätzung

$$|R_{2k}f| \leq \frac{h^4}{180} \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|(b-a).$$

Die Simpsonsche Regel. III



Die Simpsonsche Regel. IV

Beispiel: Wir berechnen eine Näherung für $\int_1^2 x^2 dx$ mit der Simpsonregel $Q_b f$ für 4 Teilintervale. Wir erhalten
$h = (2-1)/4 = 1/4$, $x_0 = 1$, $x_1 = 1 + 1/4$, $x_2 = 1 + 2/4$, $x_3 = 1 + 3/4$,
$x_4 = 2$ und

$$\begin{aligned} S_4 &= \frac{h}{3}(y_0 + 2y_1 + 4y_2 + 2y_3 + y_4) \\ &= \frac{1}{4 \cdot 3}\left(1^2 + 4\left(\frac{5}{4}\right)^2 + 2\left(\frac{6}{4}\right)^2 + 4\left(\frac{7}{4}\right)^2 + 2^2\right) = \frac{448}{192} = \frac{7}{3}\ldots \end{aligned}$$

Zum Vergleich:

$$\int_1^2 x^2 dx = \frac{2^3 - 1^3}{3} = \frac{7}{3} = 2.33\ldots$$

Keplersche Fassregel

Auf die Idee, sich mit der Berechnung von Flächeninhalten unter einer Fasskurve und dem entsprechenden Fassvolumen zu befassen, kam Johannes Kepler, als er einige Fässer Wein, die er für seine zweite Hochzeit brauchte, bezahlen musste. Er erkannte dabei, dass der Preis, welcher sich nach dem Volumen des Fasses richtete, auf Grund von Ungenauigkeiten beim Errechnen des Volumens des gefüllten Fasses nicht exakt war. (Quelle: http://www.kepler-gesellschaft.de)