§ 10 Numerische Berechnung von Integralen

Aufgabenstellung 10.1:
Es seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, und $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ sei eine stetige Funktion. Das Integral

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

ist näherungsweise zu berechnen.

Bemerkung 10.2, Approximation von f durch Interpolationspolynome:
Für fixierten $n \in \mathbb{N}$ setzen wir $h := \frac{1}{n} \cdot (b-a)$, und die äquidistant verteilten Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a,b]$ seien gegeben durch

(10.2 a) $$x_i := a + i \cdot h \quad \text{für } 0 \le i \le n.$$

Weiter sei $P_n \in \Pi_n$ das eindeutig bestimmte Interpolationspolynom mit

(10.2 b) $$P_n(x_i) = f_i := f(x_i) \quad \text{für } 0 \le i \le n.$$

Mit

(10.2 c) $$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad \text{für } 0 \le i \le n$$

folgt dann also:

(10.2 d) $$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot L_i(x).$$

Schließlich definieren wir für $0 \le i \le n$ die Funktion $\ell_i : [0,n] \to \mathbb{R}$ durch

(10.2 e) $\quad \ell_i(s) := \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{s-j}{i-j}$

und setzen

(10.2 f) $\quad \alpha_i := \int_0^n \ell_i(s)\,ds.$

Man beachte dabei: $\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_n$ hängen zwar von n, aber nicht von a, b und f ab.

<u>Satz 10.3, Die Integrationsformeln von Newton-Cotes:</u>

Unter den in Bemerkung 10.2 getroffenen Konventionen gilt:

(10.3) $\quad \int_a^b P_n(x)\,dx = h \cdot \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot \alpha_i\,.$

<u>Beweis:</u>

Definiere φ: $[0,n] \to [a,b]$ durch

(10.3 a) $\quad \varphi(s) := a + h \cdot s.$

Für $0 \leq i \leq n$ ist $\varphi(i) = x_i$, und für $0 \leq s \leq n$ und $x = \varphi(s)$ erhalten wir:

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{\varphi(s)-\varphi(j)}{\varphi(i)-\varphi(j)} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{s-j}{i-j} = \ell_i(s).$$

Also folgt mittels (10.2 d) und Variablen = substitution:

$$\int_a^b P_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot \int_a^b L_i(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot \int_0^n L_i(\varphi(s)) \cdot \varphi'(s)\,ds$$

$$= \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot h \cdot \int_0^n \ell_i(s)\,ds = h \cdot \sum_{i=0}^{n} f_i \cdot \alpha_i\,.$$

$\square$

Korollar 10.4:

Es gilt:

(10.4) $$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i = n.$$

Beweis:

Weil die Koeffizienten $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ nur von n und nicht von f abhängen, können wir die obigen Überlegungen auf $f \equiv 1$ anwenden. Dann ist auch $P_n \equiv 1$, und (10.3) liefert:

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

Wegen $h = \frac{1}{n} \cdot (b-a)$ folgt nun die Behauptung.

$\square$

Korollar 10.5:

Für $0 \leq i \leq n$ gilt:

(10.5) $$\alpha_i = \alpha_{n-i} .$$

Beweis:

Für $0 \leq s \leq n$ ist

$$\ell_{n-i}(n-s) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq n-i}}^{n} \frac{(n-s)-j}{(n-i)-j} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq n-i}}^{n} \frac{s-(n-j)}{i-(n-j)}$$

$$= \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{s-k}{i-k} = \ell_i(s).$$

Damit folgt weiter:

$$\alpha_{n-i} = \int_0^n \ell_{n-i}(s)\,ds = \int_0^n \ell_{n-i}(n-s)\,ds = \int_0^n \ell_i(s)\,ds = \alpha_i .$$

$\square$

Satz 10.6, Die Trapezregel:

Sei speziell $n = 1$. Dann gilt:

(10.6a) $\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{1}{2}$

und damit

(10.6b) $\int_a^b P_1(x)dx = (b-a) \cdot \frac{f(a)+f(b)}{2}$.

Beweis:

Aus Korollar 10.4 und Korollar 10.5 folgt:

$$\alpha_0 + \alpha_1 = 1 \quad \wedge \quad \alpha_0 = \alpha_1 .$$

Damit erhalten wir (10.6a).

Somit folgt weiter (10.6b) aus Satz 10.3 und den Beziehungen

$$h = b - a, \quad f_0 = f(a), \quad f_1 = f(b).$$

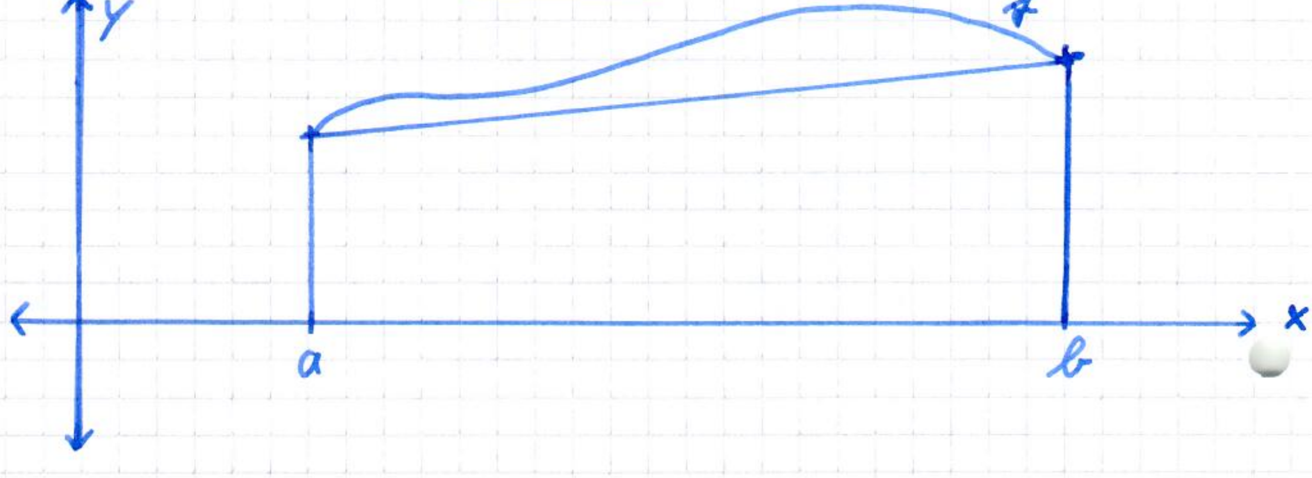
$\square$

Bemerkung 10.7, Geometrische Interpretation:

Ist $f(a) > 0$ und $f(b) > 0$, so folgt aus (10.6b):

$\int_a^b P_1(x)dx$ ist der Flächeninhalt des Trapezes, das von den Eckpunkten $(a,0)$, $(b,0)$, $(b, f(b))$, $(a, f(a))$ aufgespannt wird.

Skizze



Bemerkung 10.8, Die zusammengesetzte Trapezregel:

Es sei $k \in \mathbb{N}$ und

(10.8 a) $\quad t_i := a + \frac{i}{k} \cdot (b-a) \quad$ für $0 \le i \le k$.

$t_0, t_1, \ldots, t_k$ sind also äquidistant verteilte Stützstellen in $[a, b]$.

Wenden wir die Trapezregel an auf jedes Teilintervall $[t_{i-1}, t_i]$, $1 \le i \le k$, so ergibt sich für $I(f)$ der Näherungswert

(10.8 b)
$$T_k(f) := \frac{b-a}{2k} \cdot \sum_{i=1}^{k} \left(f(t_{i-1}) + f(t_i)\right)$$
$$= \frac{b-a}{k} \cdot \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{k-1} f(t_i) + \frac{f(b)}{2} \right).$$

Satz 10.9, Das Restglied bei der zusammengesetzten Trapezregel:

Ist $f: [a, b] \to \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar, so gibt es ein $\xi = \xi_k \in [a, b]$ mit:

(10.9 a) $\quad I(f) - T_k(f) = -\frac{(b-a)^3}{12 k^2} \cdot f''(\xi_k)$.

Weil f'' auf $[a, b]$ beschränkt ist, folgt insbesondere:

(10.9 b) $\quad \lim_{k \to \infty} T_k(f) = I(f)$.

Beispiel:

Definiere $f : [0,1] \to \mathbb{R}$ durch

$$f(x) := \sqrt{1+x^4}.$$

Für alle $x \in [0,1]$ ist

$$f'(x) = \frac{2x^3}{\sqrt{1+x^4}},$$

$$0 \le f''(x) = \frac{6x^2+2x^6}{(1+x^4)^{3/2}} \le f''(1) = 2^{\frac{3}{2}} = \sqrt{8}.$$

Damit liefert (10.9a) für alle $k \in \mathbb{N}$:

$$-\frac{\sqrt{2}}{6k^2} \le I(f) - T_k(f) \le 0.$$

Speziell ist $\frac{\sqrt{2}}{6 \cdot 5^2} < \frac{1}{100}$ und folglich

$$I(f) = T_5(f) - \Theta' \cdot 10^{-2} = 1{,}095 - \Theta \cdot 10^{-2}$$

mit passenden $\Theta', \Theta \in [0,1]$.

Satz 10.10, Die Simpson-Regel:

Für $n = 2$ liefert (10.2f):

(10.10a) $\qquad \alpha_0 = \frac{1}{3}, \quad \alpha_1 = \frac{4}{3}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{3}$

und damit

(10.10b) $\qquad \int_a^b P_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6} \cdot \left(f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right).$

Beweis:

(10.2e) und (10.2f) liefern:

$$\alpha_2 = \int_0^2 \frac{s-0}{2-0} \cdot \frac{s-1}{2-1}\,ds = \frac{1}{2} \cdot \int_0^2 (s^2 - s)\,ds$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2^3}{3} - \frac{2^2}{2}\right) = \frac{4}{3} - 1 = \frac{1}{3}.$$

Nach Korollar 10.5 ist dann auch $\alpha_0 = \frac{1}{3}$.
Schließlich liefert dann Korollar 10.4:

$$\alpha_1 = 2 - \alpha_0 - \alpha_2 = \frac{4}{3}.$$

Somit folgt weiter (10.10 b) aus Satz 10.3 und den Beziehungen

$$h = \frac{1}{2}\cdot(b-a), \quad f_0 = f(a), \; f_1 = f\left(\frac{a+b}{2}\right), \; f_2 = f(b).$$

$\square$

<u>Bemerkung 10.11, Die zusammengesetzte Simpson-Regel:</u>

Nun sei $k \in \mathbb{N}$ gerade - und wieder

(10.8 a) $\quad t_i := a + \frac{i}{k}\cdot(b-a) \quad$ für $0 \le i \le k$.

Ferner sei $k' := \frac{k}{2}$.
Wenden wir die Simpson-Regel an auf jedes Teilintervall $[t_{2i-2}, t_{2i}]$ für $1 \le i \le k'$, so ergibt sich für $I(f)$ der Näherungswert

$$s_k(f) := \frac{b-a}{6k'}\cdot\sum_{i=1}^{k'}\left(f(t_{2i-2}) + 4\cdot f(t_{2i-1}) + f(t_{2i})\right)$$

(10.11)
$$\begin{aligned} &= \frac{b-a}{3k}\cdot\big(f(a) + 4\cdot f(t_1) + 2\cdot f(t_2) \\ &\qquad + 4\cdot f(t_3) + 2\cdot f(t_4) \\ &\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \\ &\qquad + 4\cdot f(t_{k-1}) + f(b)\big). \end{aligned}$$

Satz 10.12, Das Restglied bei der zusammengesetzten Simpson-Regel:

Ist $f: [a, b] \to \mathbb{R}$ vier mal stetig differenzierbar, so gibt es zu jedem geraden $k \in \mathbb{N}$ ein $\xi = \xi_k \in [a, b]$ mit:

(10.12a) $$I(f) - S_k(f) = -\frac{(b-a)^5}{180 \cdot k^4} \cdot f^{(4)}(\xi_k).$$

Insbesondere ist

(10.12b) $$\lim_{k \to \infty} S_k(f) = I(f).$$

Beispiel:

Wir berechnen das Integral

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\, dx = \int_0^1 2 \cdot \cos(t^2)\, dt$$

nach der zusammengesetzten Simpson-Regel. Für $f(t) := 2 \cdot \cos(t^2)$ liefert (2.11) für $k = 2^j$, $1 \le j \le 8$, die Formel

$$S_k(f) = \frac{2}{3} \cdot 2^{-j} \cdot \Big(\cos 0 + 4 \cdot \sum_{i=1}^{2^{j-1}} \cos\big(((2i-1) \cdot 2^{-j})^2\big)$$

$$+ 2 \cdot \sum_{i=1}^{2^{j-1}-1} \cos\big((2i \cdot 2^{-j})^2\big) + \cos 1\Big).$$

Weiter folgt für alle $t \in [0, 1]$:

$$f'(t) = -4t \cdot \sin(t^2),$$

$$f''(t) = -4 \cdot \sin(t^2) - 8t^2 \cdot \cos(t^2),$$

$$f'''(t) = -24t \cdot \cos(t^2) + 16t^3 \cdot \sin(t^2),$$

$$f^{(4)}(t) = -24 \cdot \cos(t^2) + 96t^2 \cdot \sin(t^2) + 32t^4 \cdot \cos(t^2).$$

Damit erhalten wir weiter für alle $t \in [0,1]$:

$$|f^{(4)}(t)| \le 96 + 132 \cdot t^4 - 241 \cdot |\cos(t^2)| \le 96 + 24 = 120.$$

Satz 10.12 liefert also für $k = 2^j$, $1 \le j \le 8$:

$$\left| \int_0^1 f(t)\,dt - S_k(f) \right| \le \frac{120}{180} \cdot k^{-4} = \frac{1}{3} \cdot 2^{-4j+1}.$$

Tabelle

j	$S_k(f)$	$\frac{1}{3} \cdot 2^{-4j+1}$
1	1,805317331	$4{,}1666667 \cdot 10^{-2}$
2	1,809002530	$2{,}6041667 \cdot 10^{-3}$
3	1,809048319	$1{,}6276042 \cdot 10^{-4}$
4	1,809048505	$1{,}0172526 \cdot 10^{-5}$
5	1,809048478	$6{,}3578288 \cdot 10^{-7}$
6	1,809048476	$3{,}9736430 \cdot 10^{-8}$
7	1,809048475	$2{,}4835269 \cdot 10^{-9}$
8	1,809048476	$1{,}5522043 \cdot 10^{-10}$

Als guten Näherungswert für das gesuchte Integral erhalten wir also 1,809048476.

Warnung 10.13:

Für größere n treten in den Integrationsformeln von Newton-Cotes auch negative Werte α_i auf. Diese Formeln werden daher numerisch unbrauchbar.