10.3 Numerische Berechnung der Fourier–Koeffizienten

Numerische Quadratur

Kapitel 11: Numerische Quadratur

Zu berechnen sei ein bestimmtes Integral

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

Berechnung über Stammfunktion nicht möglich: Fehlerfunktion

Numerische Quadratur

$$I_n[f] = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i) \qquad \textbf{Quadraturformel}$$

1) **Knoten**

$$x_i \in [a, b], \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

2) **Gewichte**

$$g_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

11.1 Newton–Cotes Formeln

Interpolationspolynom für $x_i \in [a,b], \quad i = 0,1,\ldots,n$ und integriere

$$I_n[f] = \int_a^b p_n(x)\,dx$$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i), \quad l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Quadraturformel

$$I_n[f] = \int_a^b p_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i)$$

mit Gewichten

$$g_i = \int_a^b l_i(x)\,dx$$

Trapezregel:

Wähle $n = 1$, $x_0 = a$ und $x_1 = b$. Damit gilt

$$p_1(x) = \frac{x-b}{a-b} \cdot f(a) + \frac{x-a}{b-a} \cdot f(b)$$

Berechne die beiden Gewichte g_0 und g_1:

$$g_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,dx = \frac{b-a}{2}$$

$$g_1 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,dx = \frac{b-a}{2}$$

Daraus folgt die **Trapezregel**:

$$I[f] \approx I_1[f] = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

Simpsonregel:

Wähle $n = 2$, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{b+a}{2}$ und $x_2 = b$. Damit berechnet man die Gewichte

$$\begin{aligned} g_0 &= \int_a^b l_0(x)\,dx = \frac{b-a}{6} \\ g_1 &= \int_a^b l_1(x)\,dx = \frac{2}{3}(b-a) \\ g_2 &= \int_a^b l_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6} \end{aligned}$$

Daraus folgt die **Simpsonregel**:

$$I[f] \approx I_2[f] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b)\right)$$

3/8–Regel:

$$I_3[f] = \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f\left(a + \frac{b-a}{3}\right) + 3f\left(a + 2\frac{(b-a)}{3}\right) + f(b)\right)$$

Milne–Regel:

$$\begin{aligned} I_4[f] &= \frac{b-a}{90}\left(7f(a) + 32f\left(a + \frac{b-a}{4}\right) + 12f\left(a + 2\frac{b-a}{4}\right)\right. \\ &\qquad \left. + 32f\left(a + 3\frac{(b-a)}{4}\right) + 7f(b)\right) \end{aligned}$$

Satz:

Die Newton–Cotes–Formel $I_n[f]$ integriert Polynome vom Grad $\leq n$ exakt.

Zusammengesetzte Newton–Cotes–Formeln:

Höhere Genauigkeit durch Unterteilung des Intervalls $[a, b]$

Gegeben sei die äquidistante Unterteilung mit den Knoten

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, N, \quad h = \frac{b-a}{N}$$

Verwende auf jedem Teilintervall Quadraturformel der Ordnung n.

Beispiel: Zusammengesetzte Trapezregel

$$\begin{aligned} T(h) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_{i+1}) \\ &= h\left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \ldots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right) \end{aligned}$$

Beispiel: Zusammengesetzte Simpsonregel

$$\begin{aligned} S(h) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{6}(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \\ &= \frac{h}{6}\left(f(a) + 4f(a+h/2) + 2f(a+h) + \ldots\right. \\ &\qquad \left.+2f(b-h) + 4f(b-h/2) + f(b)\right) \end{aligned}$$

Quadraturfehler der (zunächst einfachen) Newton–Cotes Formeln:

Abschätzung für den Interpolationsfehler:

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(n+1)}(\xi)| \cdot \left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right|$$

Daraus folgt:

$$
\begin{aligned}
\left| \int_a^b (f(x) - p_n(x))\, dx \right| &\leq \int_a^b |f(x) - p_n(x)|\, dx \\
&\leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(n+1)}(\xi)| \int_a^b \left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right| dx
\end{aligned}
$$

Beispiel: Trapezregel

$$
\int_a^b \left| \prod_{i=0}^{1} (x - x_i) \right| dx = \int_a^b (x-a)(b-x)\, dx = \frac{(b-a)^3}{6}
$$

Wir erhalten also:

$$
\left| \int_a^b f(x)\, dx - I_1[f] \right| \leq \frac{(b-a)^3}{12} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(2)}(\xi)|
$$

Tabelle der Integrationsfehler:

Trapezregel:	$\frac{(b-a)^3}{12} \cdot \|f^{(2)}\|_\infty$
Simpsonregel:	$\frac{(b-a)^5}{2880} \cdot \|f^{(4)}\|_\infty$
3/8–Regel:	$\frac{(b-a)^5}{6480} \cdot \|f^{(4)}\|_\infty$
Milneregel:	$\frac{(b-a)^7}{967680} \cdot \|f^{(6)}\|_\infty$

Bemerkung:

Man beachte die **vergleichsweise** höhere Genauigkeit der Simpson– und Milneregel (n gerade!):

$$
n = 1 \,:\, (b-a)^3,\; n = 2 \,:\, (b-a)^{4 \to 5}, n = 3 \,:\, (b-a)^5,\; n = 4 \,:\, (b-a)^{6 \to 7}
$$

Fehlerabschätzungen bei zusammengesetzten Newton–Cotes Formeln

Beispiel: Zusammengesetzte Trapezregel

Es gilt:

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| \le \frac{h^2}{12}(b-a)\|f^{(2)}\|_\infty$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| &= \left| \sum_j^{n-1} \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j[f] \right) \right| \\
&\le \sum_j^{n-1} \left| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j[f] \right|
\end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| &= \left| \sum_j^{n-1} \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j[f] \right) \right| \\
&\le \sum_j^{n-1} \left| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j[f] \right|
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\le \sum_j^{n-1} \frac{(x_{j+1}-x_j}{12}\,\|f^{(2)}\|_\infty \\
&\le \frac{n}{12}h^3\,\|f^{(2)}\|_\infty \\
&= \frac{h^2}{12}(b-a)\,\|f^{(2)}\|_\infty
\end{aligned}$$

Beispiel: Zusammengesetzte Simpsonregel
Es gilt:

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - S(h) \right| \le \frac{h^4}{2880}(b-a)\|f^{(4)}\|_\infty$$

Satz: (Konvergenz)
Die Funktion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ sei hinreichend oft stetig differenzierbar.
Dann konvergieren die

zusammengesetzten Newton–Cotes Formeln

im Grenzwert $h \to 0$ gegen das Integral

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

11.2 Gauß–Quadratur

Approximiere Integrale der Form

$$I[f] = \int_a^b w(x)f(x)\,dx$$

durch die Quadratur

$$I[f] \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

mit einer speziellen Wahl von Stützstellen x_i.

Gaußsche Quadraturformeln mit

$(n+1)$ Punkten

integrieren Polynome vom Grad $2n+1$ exakt

11.3 Extrapolation

Berechne Quadratur mittels Trapezregel

$$I[f] \approx T[h_i]$$

für verschiedene h_i, $i = 1, \ldots, k$ und interpoliere die Funktion

$$g(y) := T[y]$$

an den Stützstellen $y_i = h_i$, $i = 1, \ldots, k$.

Extrapolation:

Werte das Interpolationspolynom an der Stelle $y = 0$ aus