

7 Numerische Integration

Ziel numerischer Integration (**Quadratur**): Näherungswerte für

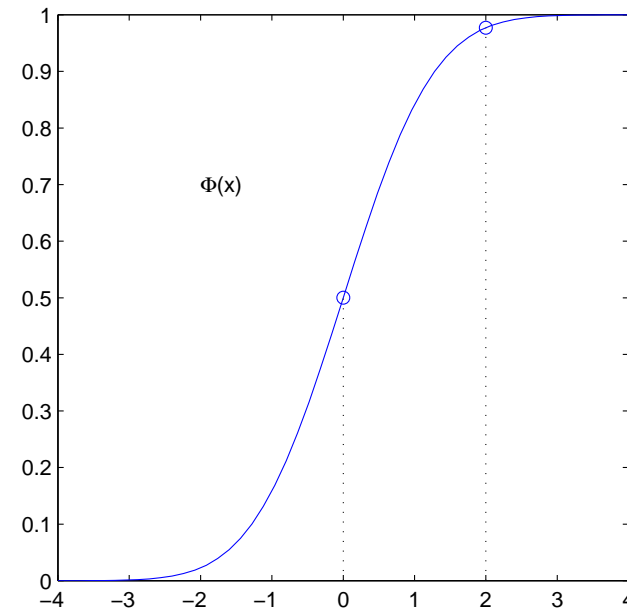
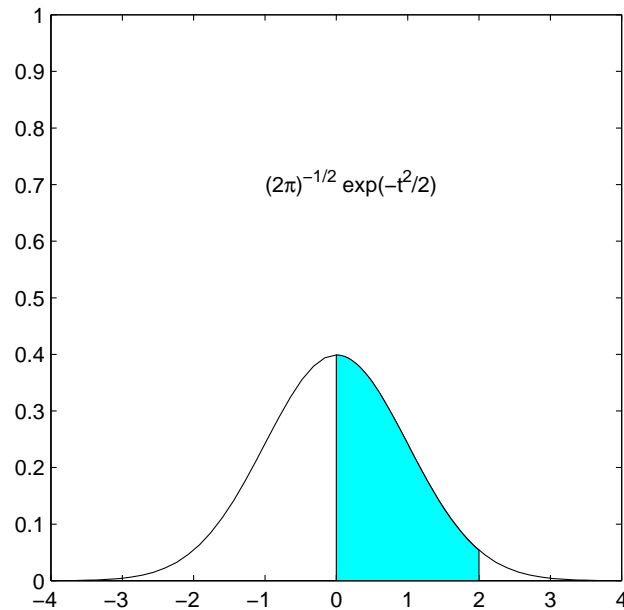
$$\int_a^b f(t) dt.$$

Wozu? Ein Beispiel: Eine Apparatur liefere Messwerte

$$\tilde{x}_i = x_i + \varepsilon_i.$$

Angenommen, die Messfehler ε_i sind standardnormalverteilt (wähle Einheiten entsprechend!): Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit P , dass ein spezifischer Messwert den wirklichen Wert um weniger als zwei Einheiten überschätzt?

$$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^2 \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt = \Phi(2) - \Phi(0) (\approx .477).$$



Aber: Es gibt keine geschlossene Formel für den Wert von

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt$$

(und vieler anderer Integrale). Selbst wenn geschlossene Formeln bekannt sind, ist eine numerische Approximation oft ökonomischer.

Inhalt Kapitel 7:

7.1 Newton-Cotes-Formeln

7.2 Zusammengesetzte Integrationsformeln

7.3 Romberg-Extrapolation

7.4 Adaptive Integrationsformeln

7.5 Gauß-Quadratur

7.6 Kubatur

7.1 Newton-Cotes-Formeln

Gesucht: Wert von $I := \int_a^b f(x) dx$.

Idee der **interpolatorischen Quadraturformeln**: Wähle $(n + 1)$ Knoten $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n \leq b$, bestimme das zugehörige Interpolationspolynom $p_n \in \mathcal{P}_n$ für f

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) \ell_j(x) \quad \text{mit} \quad \ell_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i}$$

(Lagrange-Form) und betrachte als Näherung für I

$$\int_a^b p_n(x) dx = \sum_{j=0}^n f(x_j) \underbrace{\int_a^b \ell_j(x) dx}_{=:\gamma_j} = \sum_{j=0}^n \gamma_j f(x_j).$$

γ_j bzw. x_j heißen **Gewichte** bzw. **Knoten** der Integrationsformel.

Newton-Cotes-Formeln

$$I \approx \sum_{j=0}^n \gamma_j^{(n)} f(x_j)$$

sind interpolatorische Quadraturformeln mit äquidistanten Knoten

$$x_j = a + jh \quad (j = 0, 1, \dots, n), \quad \text{wobei } h = (b - a)/n.$$

Bestimmung der Gewichte. Mit der Substitution $x = a + ht$, $t \in [0, n]$:

$$\gamma_j^{(n)} = \int_a^b \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i} dx = h \int_0^n \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{t - i}{j - i} dt =: h\alpha_j^{(n)}$$

$(\alpha_j^{(n)})$ sind unabhängig von f , a und b).

Für jedes n gelten $\alpha_0^{(n)} + \alpha_1^{(n)} + \dots + \alpha_n^{(n)} = n$

und $\alpha_j^{(n)} = \alpha_{n-j}^{(n)}, \quad j = 0, 1, \dots, n.$

Tabelle der Newton-Cotes-Gewichte: $I \approx \frac{b-a}{n} \sum_{j=0}^n \alpha_j^{(n)} f(a + jh)$

n	Name	$\alpha_j^{(n)} (j = 0, 1, \dots, n)$						
1	Trapezregel	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
2	Simpson-Regel	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$				
3	3/8-Regel	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$			
4	Milne-Regel	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$		
5		$\frac{95}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{95}{288}$	
6	Weddle-Regel	$\frac{41}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{272}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{41}{140}$

Für größere n treten negative Gewichte auf, die Newton-Cotes-Formeln werden numerisch unbrauchbar.

Fehler der Newton-Cotes-Formeln:

$$E_n(f) = \int_a^b f(x) dx - h \sum_{j=0}^n \alpha_j^{(n)} f(a + jh) = \int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\zeta(x)) dx,$$

wenn $f \in C^{(n+1)}[a, b]$ (vgl. Satz 6.4).

Insbesondere werden Polynome vom Grad $\leq n$ durch die n -te Newton-Cotes-Formel exakt integriert.

Man kann zeigen: Ist n gerade, so werden sogar Polynome vom Grad $n + 1$ exakt integriert.

$$\text{Exaktheitsgrad der } n\text{-ten Newton-Cotes-Formel} = \begin{cases} n, & \text{falls } n \text{ ungerade,} \\ n + 1, & \text{falls } n \text{ gerade.} \end{cases}$$

Wir bezeichnen die dividierten Differenzen einer Funktion bezüglich der $n + 2$ paarweise verschiedenen Knoten x_0, \dots, x_n, x mit $f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]$.

Lemma 7.1 (Alternatives Restglied bei Polynominterpolation). *Wird die Funktion f durch das Polynom $p \in \mathcal{P}_n$ an den Knoten $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n \leq b$ interpoliert, so gilt*

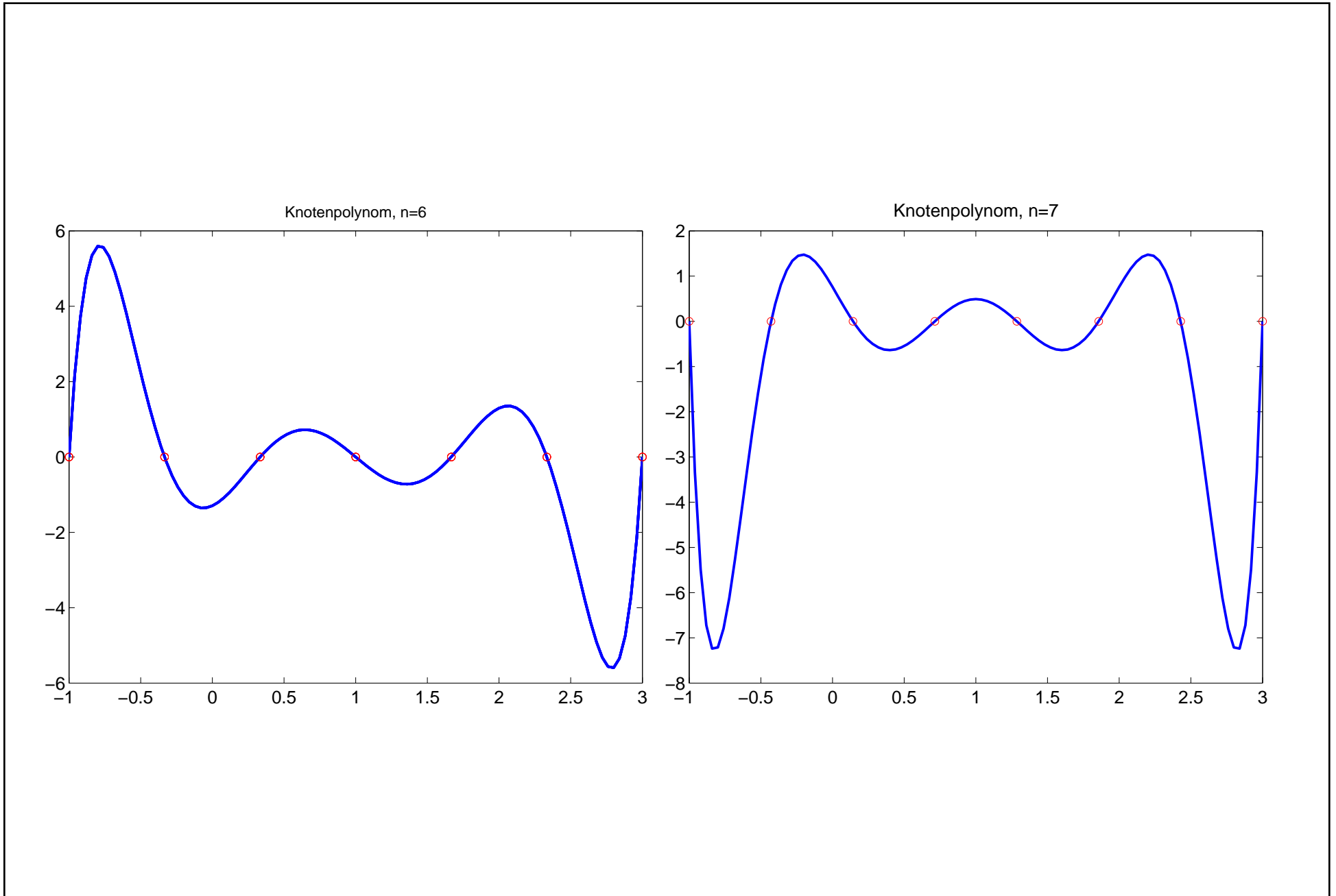
$$f(x) - p(x) = \omega_{n+1}(x) f[x_0, x_1, \dots, x_n, x].$$

Lemma 7.2. *Für das Knotenpolynom $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_n)$ bezüglich der Knoten $x_j = a + jh, h = (b - a)/n$, gilt mit $x_{n/2} := x_0 + hn/2$*

(a) $\omega_{n+1}(x_{n/2} + \xi) = (-1)^{n+1} \omega_{n+1}(x_{n/2} - \xi).$

(b) *Für $a < \xi + h \leq x_{n/2}$ mit $\xi \neq x_0, \dots, x_n$ gilt $|\omega_{n+1}(\xi + h)| < |\omega_{n+1}(\xi)|.$*

(c) *Für $x_{n/2} \leq \xi < b$ mit $\xi \neq x_0, \dots, x_n$ gilt $|\omega_{n+1}(\xi)| < |\omega_{n+1}(\xi + h)|.$*



Lemma 7.3. *Definiert man $\Omega_{n+1}(x) := \int_a^x \omega_{n+1}(\xi) d\xi$, ($n \geq 1$), so gilt*

(a) $\Omega_{n+1}(a) = \Omega_{n+1}(b) = 0$ und $\Omega_{n+1}(x) > 0$, $x \in (a, b)$ für n gerade.

(b) $\Omega_{n+1}(a) = 0$, $\Omega_{n+1}(b) = 2\Omega_{n+1}(x_{n/2})$, sowie $\Omega_{n+1}(x) < 0$, $x \in (a, b]$, für n ungerade.

Satz 7.4. *Ist $f \in C^{n+2}[a, b]$, so gilt für den Fehler der Newton-Cotes Formeln für n gerade*

$$E_n(f) = \frac{K_n}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\eta), \quad \eta \in (a, b)$$

mit

$$K_n := \int_a^b x \omega_{n+1}(x) dx < 0.$$

Fehlerschranken

$$|E_n(f)| = \left| \int_a^b f(x) dx - h \sum_{j=0}^n \alpha_j^{(n)} f(a + jh) \right| \leq S_n(f)$$

n	Name	$S_n(f)$
1	Trapezregel	$h^3 \frac{1}{12} M_2$
2	Simpson-Regel	$h^5 \frac{1}{90} M_4$
3	3/8-Regel	$h^5 \frac{3}{80} M_4$
4	Milne-Regel	$h^7 \frac{8}{945} M_6$
5		$h^7 \frac{275}{12096} M_6$
6	Weddle-Regel	$h^9 \frac{9}{1400} M_8$

mit $M_k := \max_{a \leq x \leq b} |f^{(k)}(x)|$ und $h = (b - a)/n$.

Beispiel. $\int_0^1 \exp(x) dx = e - 1 \approx 1.7183$

n	Name	$E_n(f)$	$S_n(f)$
1	Trapezregel	$-1.409 \cdot 10^{-1}$	$2.265 \cdot 10^{-1}$
2	Simpson-Regel	$-5.793 \cdot 10^{-4}$	$9.438 \cdot 10^{-4}$
3	3/8-Regel	$-2.583 \cdot 10^{-4}$	$4.195 \cdot 10^{-4}$
4	Milne-Regel	$-8.595 \cdot 10^{-7}$	$1.405 \cdot 10^{-6}$
5		$-4.845 \cdot 10^{-7}$	$7.910 \cdot 10^{-7}$
6	Weddle-Regel	$-1.059 \cdot 10^{-9}$	$1.734 \cdot 10^{-9}$

7.2 Zusammengesetzte Integrationsformeln

Idee: Unterteile das Integrationsintervall $[a, b]$ in N Teilintervalle der Länge $H := (b - a)/N$ und wende auf jedes Teilintervall

$$[a + jH, a + (j + 1)H] \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N - 1),$$

d.h. zur näherungsweise Berechnung von $\int_{a+jH}^{a+(j+1)H} f(x) dx$, die n -te Newton-Cotes-Formel (mit Schrittweite $h = H/n$) an:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{j=0}^{N-1} \int_{jH}^{(j+1)H} f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} h \sum_{k=0}^n \alpha_k^{(n)} f(a + jH + kh) \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} h \sum_{k=0}^n \alpha_k^{(n)} f(a + (jn + k)h). \end{aligned}$$

Beispiel für $n = 1$: zusammengesetzte Trapezregel.

Hier $H = (b - a)/N = h$,

also $N + 1$ Stützstellen: $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, N$:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + f(x_N) \right] =: T(h). \quad (7.1)$$

Fehler:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - T(h) \right| \leq \frac{b-a}{12} M_2 h^2 \quad \text{mit } M_2 := \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|.$$

Aufwand zur Berechnung von $T(h)$: $N + 1$ Funktionsauswertungen.

Beispiel für $n = 2$: zusammengesetzte Simpson-Regel.

Hier $H = (b - a)/N = 2h$, d.h. $h = (b - a)/(2N)$,

also $2N + 1$ Stützstellen: $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, 2N$:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4 \sum_{j=0}^{N-1} f(x_{2j+1}) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} f(x_{2j}) + f(x_{2N}) \right] =: S(h).$$

Fehler:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S(h) \right| \leq \frac{b-a}{180} M_4 h^4 = \frac{b-a}{2880} M_4 H^4$$

$$\text{mit } M_4 := \max_{a \leq x \leq b} |f^{(iv)}(x)|.$$

Aufwand zur Berechnung von $S(h)$: $2N + 1$ Funktionsauswertungen.

7.3 Romberg-Extrapolation

Idee der Extrapolation: Es bezeichne $T(h)$ die Trapezregel-Näherung für das Integral $I = \int_a^b f(x) dx$. Ist f genügend glatt, so gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} T(h) = I.$$

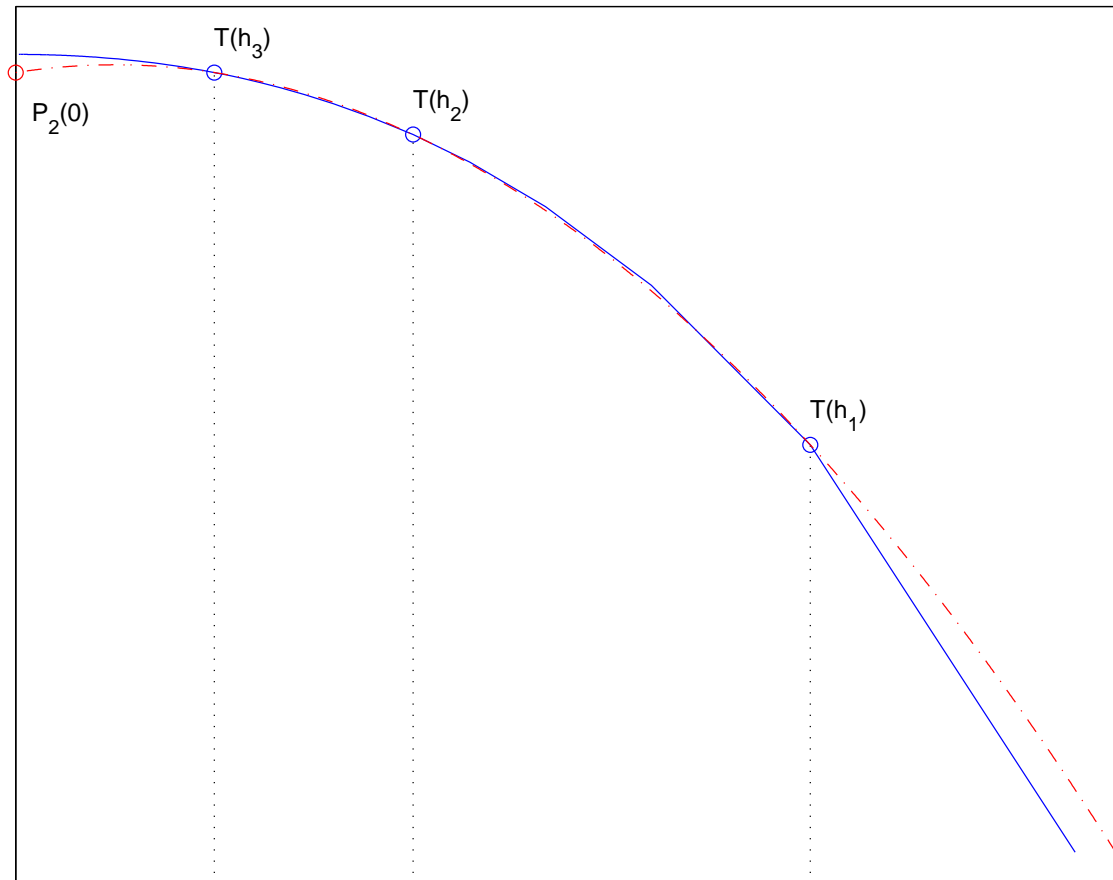
Interpretiere I als Wert von $T = T(h)$ an der Stelle $h = 0$:

$$I = T(0).$$

Wir können $T(h)$ nur für $h > 0$, aber nicht an der Stelle $h = 0$ auswerten. Um $T(0)$ zu approximieren interpolieren wir T an den Stützstellen $h_0, h_1, \dots, h_k > 0$, d.h. wir bestimmen ein Polynom $P_k \in \mathcal{P}_k$ mit

$$P_k(h_j) = T(h_j) \quad (j = 0, 1, \dots, k),$$

und betrachten $P_k(0)$ als Näherung für $T(0) = I$.



$P_k(0)$ ist (hoffentlich) eine bessere Näherung
für $I = T(0)$ als $T(h_0), T(h_1), T(h_2), \dots$

7.3.1 Die Euler-Maclaurinsche Summenformel

Die Konvergenz dieses Extrapolationsverfahrens wird wesentlich dadurch beschleunigt, dass $T(h)$ eine asymptotische Entwicklung in h^2 besitzt. Dies ist eine Folgerung aus folgendem Ergebnis:

Lemma 7.5. *Ist $g \in C^{2m+2}[0, 1]$, so gilt*

$$\int_0^1 g(t) dt = \frac{1}{2}[g(0) + g(1)] + \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} [g^{(2k-1)}(0) - g^{(2k-1)}(1)] - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} g^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (0, 1). \quad (7.2)$$

Hierbei sind B_k die *Bernoulli-Zahlen*

$$B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \quad B_8 = -\frac{1}{30}, \dots$$

Lemma 7.5 enthält die einfachste Variante der **Euler-Maclaurinschen Summenformel**. Die allgemeinere Form erhält man durch Anwendung von (7.2) auf die Integrale

$$\int_i^{i+1} g(t) dt \quad (i = 0, \dots, N - 1)$$

und Aufsummieren:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}g(0) + g(1) + \dots + g(N - 1) + \frac{1}{2}g(N) &= \int_0^N g(t) dt \\ &+ \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} [g^{(2k-1)}(N) - g^{(2k-1)}(0)] + \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} N g^{(2m+2)}(\xi) \end{aligned} \quad (7.3)$$

mit einem $\xi \in (0, 1)$.

Anwendung auf beliebiges Intervall $[a, b]$, äquidistante Knoten

$$\{x_i = a + ih\}_{i=0}^N, \quad h = (b - a)/N, \quad f \in C^{2m+2}[a, b] :$$

Transformation von $\int_a^b f(t) dt$ auf $[0, N]$ und Anwendung von (7.3) liefert

$$T(h) = \int_a^b f(t) dt + \sum_{k=1}^m h^{2k} \frac{B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] \quad (7.4)$$

$$+ h^{2m+2} \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b - a) f^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b)$$

mit $T(h)$ die Approximation der zusammengesetzten Trapezregel gemäß (7.1).

Entscheidend: (7.4) stellt eine asymptotische Entwicklung von $T(h)$ in Potenzen von h^2 dar.

Auf diese Entwicklung wird das Extrapolationsverfahren angewandt.

7.3.2 Das Romberg-Verfahren

Wähle Schrittweitenfolge $h_0 = b - a$, $h_j = h_{j-1}/2 = (b - a)/2^j$ und bestimme $P_k(0)$ mit dem Algorithmus von Neville-Aitken (die Abszissen sind hier h_j^2):

$$T_{0,0} = T(h_0) = \frac{b - a}{2} [f(a) + f(b)],$$

$$T_{j,0} = T(h_j) = \frac{h_j}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{2^j - 1} f(a + ih_j) + f(b) \right]$$

$$= \frac{1}{2} T_{j-1,0} + h_j \sum_{i=1}^{2^{j-1}} f(a + (2i - 1)h_j), \quad j = 1, 2, \dots$$

$$T_{j,k} = \frac{2^{2k} T_{j,k-1} - T_{j-1,k-1}}{2^{2k} - 1} = \frac{4^k T_{j,k-1} - T_{j-1,k-1}}{4^k - 1} \quad \text{für } k \leq j, j \geq 1.$$

Beispiel.

$$\int_1^2 \frac{dx}{x} = \log(2) = .6931471806 \dots$$

T-Tafel:

.7500000000

.7083333333 .6944444444..6970238095 .6932539683 .6931746032..6941218504 .6931545307 .6931479015 .6931474776..6933912022 .6931476528 .6931471843 .6931471831 .6931471819

Fehler beim Romberg-Verfahren:

Ist $f \in C^{2m+2}[a, b]$, so besitzt die Trapezsumme $T(h)$ zur Schrittweite $h = (b - a)/n$ gemäß (7.4) die asymptotische Entwicklung

$$T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_m h^{2m} + \beta_{m+1}(h) h^{2m+2}.$$

Dabei sind $I = \int_a^b f(x) dx$ das gesuchte Integral, $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ von h unabhängige Konstanten und $\beta_{m+1}(h)$ bleibt beschränkt für $h \rightarrow 0$.

Die Fehler in der ersten Spalte der T-Tafel (d.h. die Fehler von $\{T_{j,0}\} = \{T(h_j)\}$) streben also wie h_j^2 gegen 0.

Behauptung: Die Fehler in der k -ten Spalte der T-Tafel (d.h. die Fehler von $\{T_{j,k-1}\}_{j \geq k-1}$) streben wie h_j^{2k} gegen 0.

Aus der asymptotischen Entwicklung folgt

$$T_{j-1,0} = T(2h_j) = I + \alpha_1(2h_j)^2 + O(h_j^4),$$

$$T_{j,0} = T(h_j) = I + \alpha_1 h_j^2 + O(h_j^4).$$

Multipliziert man die zweite Gleichung mit 4 und subtrahiert beide Gleichungen, so ergibt sich:

$$T_{j,1} = \frac{4T_{j,0} - T_{j-1,0}}{4 - 1} = I + O(h_j^4),$$

die Fehler in der zweiten Spalte der T-Tafel (d.h. die Fehler von $\{T_{j,1}\}_{j \geq 1}$) streben also wie h_j^4 gegen Null.

Auf ähnliche Weise lässt sich zeigen:

$$T_{j,k} = I + O(h_j^{2^{(k+1)}}) \quad (k \text{ fest mit } 0 \leq k \leq m).$$

7.4 Adaptive Integrationsverfahren

Wendet man eine zusammengesetzte Quadraturformel auf $I = \int_a^b f(x) dx$ an, so ist es nicht immer sinnvoll, das Integrationsintervall $[a, b]$ in gleich lange Teilintervalle der Länge H zu unterteilen: Der Quadraturfehler hängt von einer (höheren) Ableitung von f ab, und diese kann in $[a, b]$ stark variieren.

Für $f(x) = x/(x^2 - 1)$, $x \in [1.001, 10]$, bewegt sich die vierte Ableitung (die den Fehler bei der zusammengesetzten Simpson-Regel kontrolliert) zwischen $1.2 \cdot 10^8$ (am linken Rand) und $2.7 \cdot 10^{-4}$ (am rechten Rand). Man erwartet, dass man am rechten Ende des Intervalls mit wesentlich weniger Stützstellen (d.h. wesentlich geringerem Rechenaufwand) eine akzeptable Näherung des Integrals bestimmen kann als in der Umgebung von 1.001.

Gegeben: Quadraturformel mit Fehlerdarstellung, z.B. die Simpson-Regel $S(H)$ mit

$$I - S(H) = cH^4 + O(H^5).$$

Gesucht: Näherung für I , zusammengesetzt aus Näherungen

$$I_0^{(j)} \approx \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x) dx$$

über Teilintervalle unterschiedlicher Länge $H_j = x_j - x_{j-1}$, so dass

$$\left| I - \sum_{j=1}^N I_0^{(j)} \right| \leq \varepsilon := \text{tol} \cdot \int_a^b |f(x)| dx$$

gilt. Weder die Anzahl N der Teilintervalle noch die Unterteilungspunkte $\{x_j\}_{j=0}^N$ sind bekannt.

Wir wollen den Fehler „gleichmäßig auf die Teilintervalle verteilen“, d.h. H_j soll so gewählt werden, dass

$$\left| \int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+H_j} f(x) dx - I_0^{(j)} \right| \leq \frac{H_j}{b-a} \varepsilon$$

erfüllt ist.

Wichtige Beobachtung: Aus

$$I - S(H) = c H^4 + O(H^5) \quad \text{und} \quad I - S(H/2) = c (H/2)^4 + O(H^5)$$

folgt

$$S(H/2) - S(H) = c (1 - 2^{-4}) H^4 + O(H^5)$$

also, falls H „genügend klein“ ist,

$$I - S(H) \approx \frac{S(H/2) - S(H)}{1 - 2^{-4}}. \quad (*)$$

Strategie zur Schrittweitenwahl (Schrittweitensteuerung):

Angenommen H_1, \dots, H_{j-1} (d.h. x_0, \dots, x_{j-1}) sind bereits bestimmt. Außerdem ist eine Vorschlagsschrittweite \tilde{H}_j gegeben.

(1) Setze $H_j = \tilde{H}_j$.

(2) Bestimme mit $I_0^{(j)} = S(H_j)$ eine Näherung für $\int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+H_j} f(x) dx$.

(3) Bestimme mit $I_1^{(j)} = S(H_j/2)$ eine „bessere“ Näherung für $\int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+H_j} f(x) dx$.

(4) Überprüfe, ob

$$|I_1^{(j)} - I_0^{(j)}| \leq (1 - 2^{-4}) \frac{H_j}{b-a} \varepsilon$$

erfüllt ist (vgl. (*)).

- Falls **ja**: Akzeptiere $I_1^{(j)}$ als Näherung.
- Falls **nein**: Setze $H_j = H_j/2$ und gehe zu (2).

(5) Überprüfe, ob

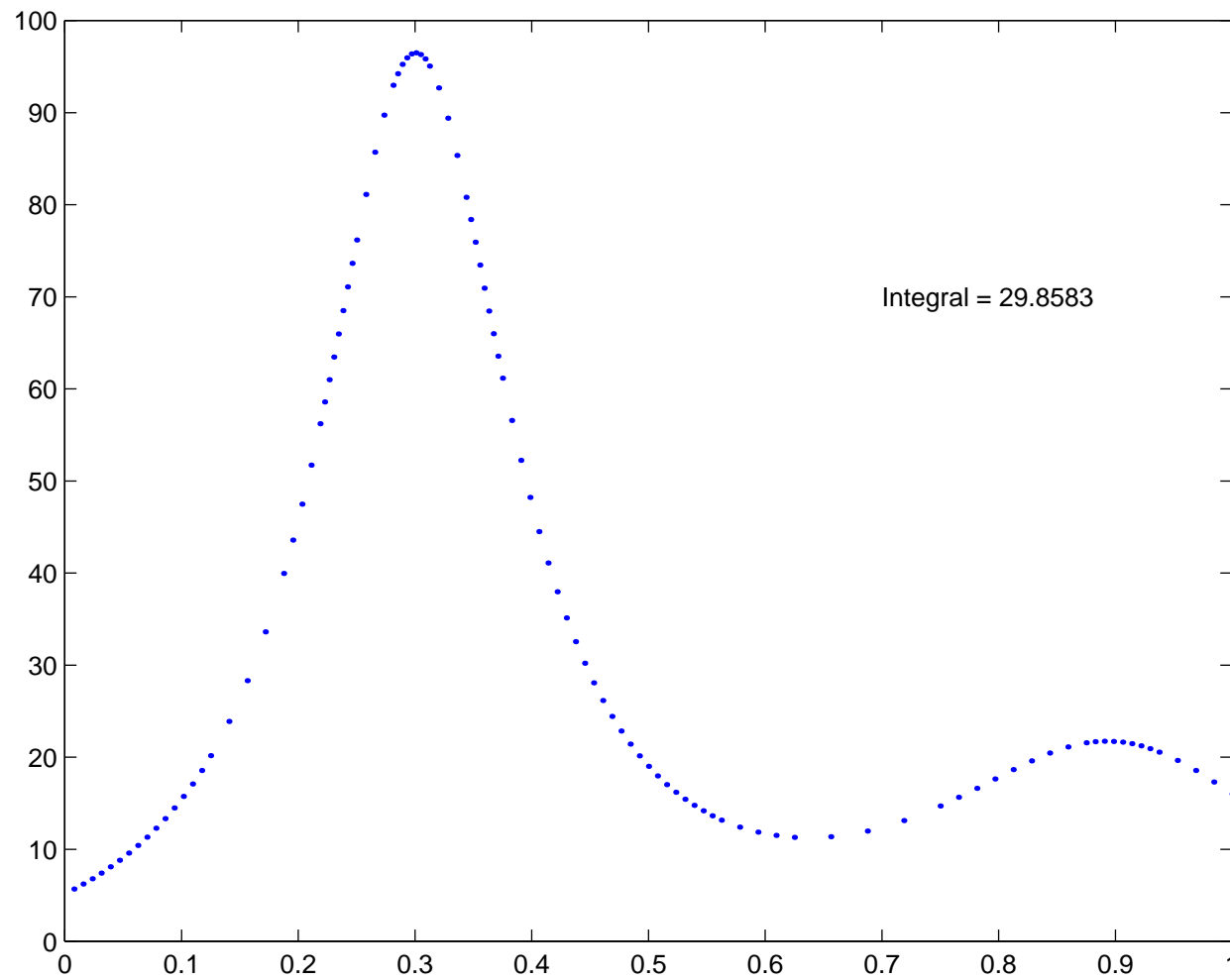
$$|I_1^{(j)} - I_0^{(j)}| \leq (2.5)^{-4} (1 - 2^{-4}) \frac{H_j}{b-a} \varepsilon$$

erfüllt ist (2.5 = Sicherheitsfaktor).

- Falls **ja**: Neue Vorschlagsschrittweite: $\tilde{H}_{j+1} = 2H_j$.
- Falls **nein**: Neue Vorschlagsschrittweite: $\tilde{H}_{j+1} = H_j$.

Praxis: Unter- und Obergrenzen für H_j (zu kleine Schrittweiten führen zu verstärktem Rundungsfehlereinfluß, zu große Schrittweiten können dazu führen, daß Bereiche, in denen f stark variiert, übersprungen werden).

Beispiel: $f(x) = \frac{1}{(x - .3)^2 + .01} + \frac{1}{(x - .9)^2 + .04} - 6, \quad a = 0, b = 1.$



7.5 Gauß-Quadratur

Die in diesem Abschnitt behandelte Theorie der Gauß-Quadratur gilt allgemein für Integrale der Form

$$I = \int_{\mathbb{R}} f(x) d\mu(x).$$

Hierbei ist μ ein positives Maß auf \mathbb{R} und es wird lediglich gefordert, dass die sogenannten **Momente**

$$\mu_k := \int_{\mathbb{R}} x^k d\mu(x), \quad k = 0, 1, \dots$$

existieren.

Wichtige Spezialfälle sind **diskrete Maße**, welche auf endlich viele Punkte x_i konzentriert sind,

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) d\mu(x) = \sum_{i=1}^N w_i f(x_i), \quad w_i > 0, \quad x_i \in \mathbb{R},$$

sowie **absolutstetige Maße**

$$d\mu(x) = w(x)dx \quad \text{mit Träger} \quad (a, b) = \text{supp}(\mu) \subset \mathbb{R},$$

sodass

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) d\mu(x) = \int_{\text{supp}(\mu)} f(x) d\mu(x) = \int_a^b f(x)w(x) dx.$$

Im letzteren Fall, mit dem wir uns ausschließlich befassen, ist $a = -\infty$ bzw. $b = \infty$ ausdrücklich zugelassen.

Die **Gewichtsfunktion** $w(x)$ muss dabei gewisse Bedingungen erfüllen (z.B. $w(x) \geq 0$ für alle $x \in [a, b]$).

Gebräuchliche Gewichtsfunktionen sind:

$[a, b]$	$w(x)$	Bezeichnung
$[-1, 1]$	1	Gauß-Legendre
$[-1, 1]$	$(1 - x^2)^{-1/2}$	Gauß-Tschebyscheff
$[-1, 1]$	$(1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta, \alpha, \beta > -1$	Gauß-Jacobi
$[0, \infty]$	$\exp(-x)$	Gauß-Laguerre
$[-\infty, \infty]$	$\exp(-x^2)$	Gauß-Hermite

Prinzip: Gauß-Formeln sind interpolatorische Quadraturformeln

$$\int_a^b f(x) w(x) dx = \sum_{j=1}^n \eta_j f(\xi_j) + R_n(f). \quad (7.5)$$

$R_n(f)$ bezeichnet den Quadraturfehler.

Im Gegensatz zu den Newton-Cotes-Formeln wählt man die Knoten ξ_j **nicht** äquidistant, sondern bestimmt Knoten ξ_j und Gewichte η_j so, dass sich ein **möglichst hoher Exaktheitsgrad** ergibt.

Heuristik: Für jedes $k = 0, 1, 2, \dots$ ist die Forderung

$$\int_a^b x^k w(x) dx = \sum_{j=1}^n \eta_j \xi_j^k$$

eine nichtlineare Gleichung mit $2n$ freien Parametern $\{\xi_j, \eta_j\}_{j=1}^n$.

Es scheint möglich, diese Gleichung für $k = 0, \dots, 2n - 1$ zu erfüllen (Exaktheitsgrad $2n - 1$).

Es bezeichne \mathcal{P} den Raum aller Polynome (beliebigen Grades) in einer Variablen.

Satz 7.6 (Jacobi, 1826). *Sei $m \in \mathbb{N}_0$. Die Quadraturformel (7.5) besitzt genau dann Exaktheitsgrad $d = n - 1 + m$, wenn folgende beide Bedingungen erfüllt sind:*

(a) *(7.5) ist interpolatorisch.*

(b) *Das Knotenpolynom $\omega_n(x) = \prod_{j=1}^n (x - \xi_j)$ ist orthogonal zu \mathcal{P}_{m-1} bezüglich des Innenproduktes*

$$(p, q) = \int_a^b p(x)q(x)w(x)dx, \quad p, q \in \mathcal{P}. \quad (7.6)$$

Bemerkung 7.7. *Der maximale Exaktheitsgrad ist $d = 2n - 1$, also $m = n$.*

Satz 7.6 legt ein Konstruktionsprinzip nahe für (7.5) mit möglichst hohem Exaktheitsgrad: wähle als Knoten die Nullstellen des Orthogonalpolynoms vom Grad n bezüglich (7.6) und die Gewichte so, dass (7.5) interpolierend ist.

Definition 7.8. Eine Folge $\{p_k\}_{k \geq 0}$ von Polynomen heißt **System von Orthogonalpolynomen** bezüglich eines Innenproduktes (\cdot, \cdot) , falls

(a) $\deg p_k = k, k = 0, 1, \dots$ und

(b) $(p_j, p_k) = 0$ falls $j \neq k$.

Orthogonalpolynome sind jeweils bis auf einen konstanten Faktor bestimmt. Als **monisch** bezeichnet man Polynome mit Höchstkoeffizient Eins, **Orthonormalpolynome** sind durch $(p_k, p_k) = 1$ charakterisiert.

Satz 7.9. Die Nullstellen der Orthogonalpolynome bezüglich (7.6) sind reell, einfach und liegen in (a, b) .

Lemma 7.10. *Der Vektor $[a_0^{(n)}, \dots, a_{n-1}^{(n)}]^\top$ der Koeffizienten des n -ten monischen Orthogonalpolynoms bezüglich (7.6)*

$$p_n(x) = x^n + a_{n-1}^{(n)}x^{n-1} + \dots + a_1^{(n)}x + a_0^{(n)}$$

ist die eindeutig bestimmte Lösung des linearen Gleichungssystems

$$M_n \mathbf{x} = -\mathbf{m}_n, \quad M_n = \begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_n \\ \vdots & & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \dots & \mu_{2n-2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{m}_n = \begin{bmatrix} \mu_n \\ \mu_{n+1} \\ \vdots \\ \mu_{2n-1} \end{bmatrix}$$

*mit der **Momentenmatrix** M_n gegeben durch*

$$[M_n]_{j,k} = (x^j, x^k) = \int_a^b x^{j+k} w(x) dx = (x^{j+k}, 1) =: \mu_{j+k}.$$

Satz 7.11. *Ein System von Orthogonalpolynomen bezüglich (7.6) genügt einer dreistufigen Rekursionsformel*

$$\gamma_n p_n(x) = (x - \alpha_n) p_{n-1}(x) - \beta_n p_{n-2}(x), \quad n = 1, 2, \dots$$

mit

$$p_{-1} := 0 \quad \text{und} \quad p_0(x) = \text{const.}$$

Die Koeffizienten sind gegeben durch

$$\alpha_n = \frac{(x p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-1}, p_{n-1})}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\gamma_n = \frac{(x p_{n-1}, p_n)}{(p_n, p_n)}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\beta_n = \frac{(x p_{n-2}, p_{n-1})}{(p_{n-2}, p_{n-2})} = \gamma_{n-1} \frac{(p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-2}, p_{n-2})}, \quad n = 2, 3, \dots, \quad \beta_1 \text{ beliebig.}$$

Bemerkungen 7.12. (a) Mit $\{p_k\}_{k \geq 0}$ sind auch $\hat{p}_k = \delta_k p_k$, $\delta_k \neq 0$, Orthogonalpolynome. Die zugehörigen Rekursionskoeffizienten lauten

$$\hat{\alpha}_k = \alpha_k, \quad \hat{\gamma}_k = \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k} \gamma_k, \quad k = 1, 2, \dots,$$

$$\hat{\beta}_k = \frac{\delta_{k-1}}{\delta_{k-2}} \beta_k, \quad k = 2, 3, \dots$$

(b) Für die monischen Orthogonalpolynome ergibt sich für die Rekursion $\gamma_k = 1 \forall k$. d.h.

$$p_{-1} = 0, \quad p_0(x) = 1, \quad p_k(x) = (x - \alpha_k)p_{k-1}(x) - \beta_k p_{k-2}(x).$$

Ferner gilt

$$\beta_k = \frac{(p_{k-1}, p_{k-1})}{(p_{k-2}, p_{k-2})} > 0, \quad k \geq 2.$$

(c) Für Orthonormalpolynome ist $\beta_k = \gamma_{k-1}$, $k \geq 2$.

Satz 7.13. Seien $\alpha_k, \beta_k, k \geq 1$ die Rekursionskoeffizienten der monischen Orthogonalpolynome bezüglich (7.6) und sei

$$J_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \sqrt{\beta_n} \\ & & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad (\text{Jacobi-Matrix}).$$

Dann gilt

- (a) Die Knoten der n -ten Gauß-Quadraturformel (7.5) bezüglich (7.6) sind die Eigenwerte von J_n .
- (b) Sind \mathbf{u}_j die normierten Eigenvektoren von J_n zu den Eigenwerten λ_j , d.h. $J_n \mathbf{u}_j = \lambda_j \mathbf{u}_j$, $\|\mathbf{u}_j\|_2 = 1$ ($j = 1, \dots, n$) so sind die Gewichte η_j von (7.5) gegeben durch

$$\eta_j = \beta_0 [\mathbf{u}_j]_1^2 \quad (j = 1, \dots, n), \quad \beta_0 = \int_a^b w(x) dx.$$

Beispiel: Für die Gewichtsfunktion $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ erhält man

$$\text{Knoten: } \xi_j = \cos \frac{(2j-1)\pi}{2n}, \quad \text{Gewichte: } \eta_j = \pi/n, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

(Dass die Gewichte unabhängig von j sind, trifft auf andere Gauß-Formeln nicht zu!) **Gauß-Tschebyscheff-Quadraturformel:**

$$\int_{-1}^1 f(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx = \frac{\pi}{n} \sum_{j=1}^n f \left(\cos \frac{(2j-1)\pi}{2n} \right) + R_n(f).$$

Satz 7.14. *Ist $f \in C^{2n}[a, b]$ und bezeichnen $\{p_n\}$ die monischen Orthogonalpolynome zu (7.6), so besitzt das Restglied der Gauß-Quadraturformel (7.5) die Darstellung*

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} (p_n, p_n), \quad \xi \in (a, b).$$

7.6 Kubatur

Kubatur bezeichnet Näherungsverfahren für mehrdimensionale Integrale, d.h. mit Teilgebieten des \mathbb{R}^m , $m > 1$, als Integrationsbereich.

Diese haben wie im Eindimensionalen die Form

$$I = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \gamma_i f(\mathbf{x}_i) + R_n(f). \quad (7.7)$$

mit Knoten \mathbf{x}_i und Gewichten γ_i , $i = 1, \dots, n$.

Erwünschte Eigenschaften:

1. $\mathbf{x}_i \in \Omega$, $i = 1, \dots, n$.
2. $\gamma_i > 0$, $i = 1, \dots, n$.

Die Theorie der numerischen Kubatur ist nicht annähernd so vollständig wie die der Quadraturverfahren. Dies hat im Wesentlichen zwei Ursachen:

- (i) Die Geometrie des \mathbb{R}^1 ist entscheidend einfacher als die mehrdimensionaler Räume. So sind etwa alle kompakten und zusammenhängenden Teilmengen im \mathbb{R}^1 affin äquivalent.
- (ii) Die im Eindimensionalen so hilfreiche Theorie der Orthogonalpolynome ist im Mehrdimensionalen komplizierter. So gibt es $\binom{m+k}{k}$ Polynome vom Grad $\leq k$ in m Variablen, also $\binom{m+k-1}{k}$ Polynome vom exakten Grad k . Hier kommen also nur **gemeinsame Nullstellen** von mehreren Orthogonalpolynomen als Knoten in Frage.

Wir geben hier lediglich einen kurzen Überblick über Konstruktionsprinzipien von Kubaturformeln und beschränken uns einfachheitshalber auf den Fall $m = 2$.

Eine Kubaturformel (7.7) besitzt also den **Exaktheitsgrad** d , wenn sie für alle Polynome $p(x, y)$ vom Grad $\leq d$, d.h. für alle

$$p \in \mathcal{P}_d^2 := \left\{ \sum_{i+j \leq d} \alpha_{i,j} x^i y^j : \alpha_{i,j} \in \mathbb{R} \right\}$$

(z.B. $\mathcal{P}_1^2 = \{\alpha_{0,0} + \alpha_{1,0}x + \alpha_{0,1}y\}$,

$\mathcal{P}_2^2 = \{\alpha_{0,0} + \alpha_{1,0}x + \alpha_{0,1}y + \alpha_{2,0}x^2 + \alpha_{1,1}xy + \alpha_{0,2}y^2\}$),

den exakten Integralwert liefert.

7.6.1 Interpolatorische Quadraturformeln

Wie im Eindimensionalen kann man bei n vorgegebenen verschiedenen Knoten x_i die Gewichte w_i zum Erreichen eines maximalen Exaktheitsgrades wählen. Im \mathbb{R}^2 sind hierfür erforderlich

$$n = \binom{d+2}{d} = \frac{(d+2)(d+1)}{2} \quad \text{Knoten für Exaktheitsgrad } d.$$

Satz 7.15 (Tchakaloff, 1957). *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ kompakt, w eine nichtnegative, integrierbare Gewichtsfunktion mit*

$$0 < \int_{\mathbb{R}^2} w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty$$

sowie d eine feste natürliche Zahl. Dann existiert eine Kubaturformel der Form (7.7) vom Exaktheitsgrad d mit $n \leq (d+1)(d+2)/2$, positiven Gewichten γ_i und $x_i \in \Omega$ für alle i .

7.6.2 Produktformeln

Ist es möglich – eventuell nach geeigneter Substitution – Integrale über Monome $x^i y^j$, $i, j \in \mathbb{N}_0$, so umzuformen, dass

$$\int_{\Omega} x^i y^j w(x, y) dx dy = \int_{-1}^1 \xi^i w_1(\xi) \left(\int_{-1}^1 \eta^j w_2(\eta) d\eta \right) d\xi,$$

so kann man auf die eindimensionalen Integrale jeweils eine Quadraturformel $\int_{-1}^1 g(\zeta) w_s(\zeta) d\zeta \approx \sum_{i=1}^{n_s} \gamma_i^{(s)} f(\zeta_i^{(s)})$, ($s = 1, 2$) mit Exaktheitsgrad d_s anwenden und erhält mit

$$\int_{\Omega} f(x, y) w(x, y) dx dy \approx \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \gamma_i^{(1)} \gamma_j^{(2)} f(\zeta_i^{(1)}, \zeta_j^{(2)})$$

eine Kubaturformel mit $n_1 n_2$ Knoten $\{(\zeta_i^{(1)}, \zeta_j^{(2)})\}$ und Gewichten $\{\gamma_i^{(1)} \gamma_j^{(2)}\}$, $1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2$ sowie Exaktheitsgrad $d = \min\{d_1, d_2\}$ (eigentlich etwas mehr, wieso?).

Beispiel 1: Die Gauß-Legendre Formel ($w(x) \equiv 1$) mit zwei Knoten

$$\int_{-1}^1 f(\zeta) d\zeta \approx f(\zeta_1) + f(\zeta_2), \quad \zeta_{1,2} = \frac{\pm 1}{\sqrt{3}}, \quad (\gamma_1 = \gamma_2 = 1),$$

besitzt Exaktheitsgrad $d = 3$. Mittels der Substitution

$$\begin{bmatrix} x(\xi, \eta) \\ y(\xi, \eta) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix} \right), \quad \xi, \eta \in [-1, 1],$$

approximieren wir damit das Integral

$$\begin{aligned} 1.135\dots &= \int_0^1 \int_0^1 \exp(x^2 y^2) dx dy = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \exp(x(\xi, \eta)^2 y(\xi, \eta)^2) d\xi d\eta \\ &\approx \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^2 \exp(x(\zeta_i, \zeta_j)^2 y(\zeta_i, \zeta_j)^2) = 1.133\dots \end{aligned}$$

Beispiel 2: Die Gauß-Hermite Formeln approximieren Integrale der Bauart

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) \exp(-\zeta^2) d\zeta \approx \sum_{i=1}^{n_1} \gamma_i f(\zeta_i)$$

und lassen sich daher zu Produktformeln für Integrale

$$\int_{\mathbb{R}^2} f(x, y) \exp(-x^2 - y^2) dx dy$$

kombinieren.

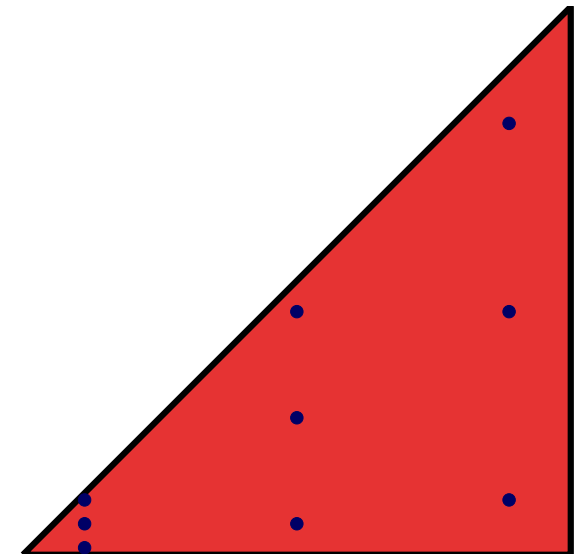
Beispiel 3: Das Integral

$$I = \int_{\Delta} f(x, y) dx dy, \quad \Delta = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq x\}$$

über das Dreieck Δ geht durch die Substitution $x = u, y = uv$ über in

$$I = \int_0^1 \int_0^1 f(u, uv) u dv du,$$

was wie in Beispiel 1 durch eine Produktformel für ein Quadrat approximiert werden kann. Für die 3-Punkt Gauß-Legendre Formel erhalten wir rechtsstehende Knoten im Dreieck Δ .



7.6.3 Zusammengesetzte Kubaturformeln

Hat man ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ vollständig oder näherungsweise in Dreiecke oder Rechtecke $\{K_i\}_{i=1}^N$ zerlegt, so kann man gemäß

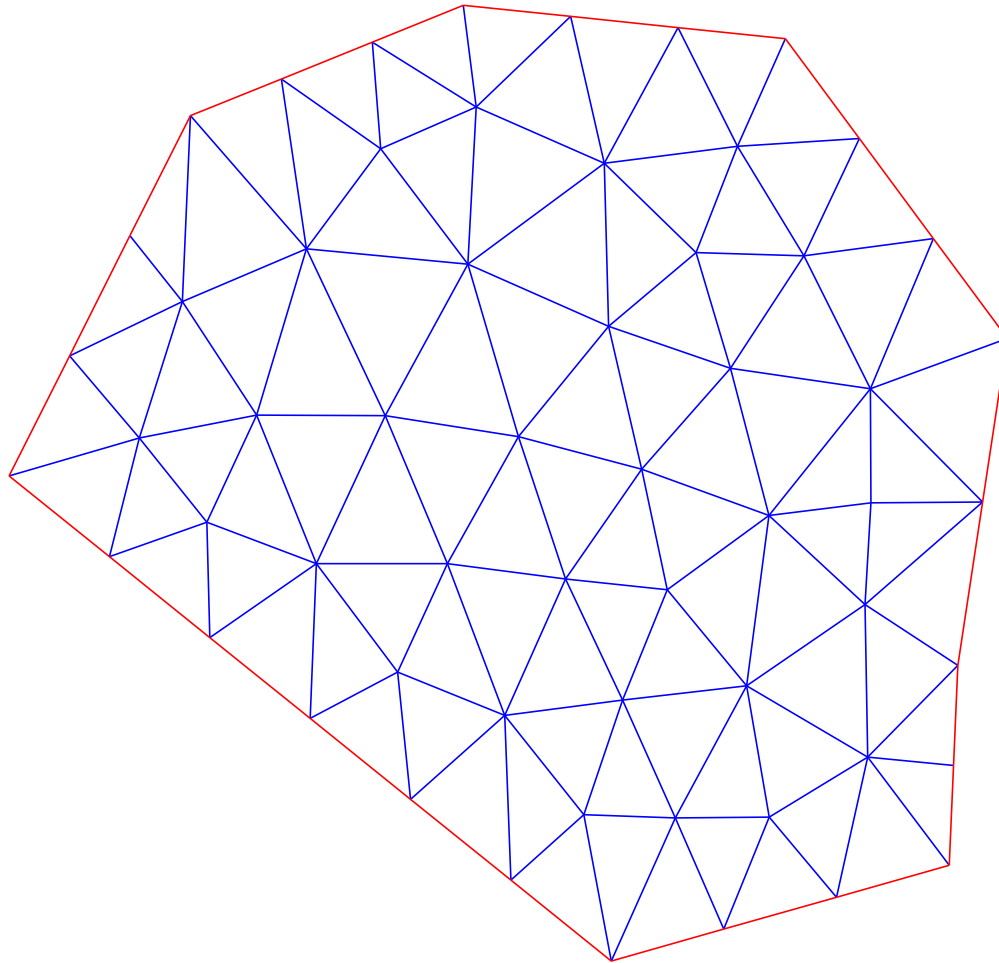
$$I = \int_{\Omega} f(x, y) \, dx dy = \sum_{i=1}^N \int_{K_i} f(x, y) \, dx dy$$

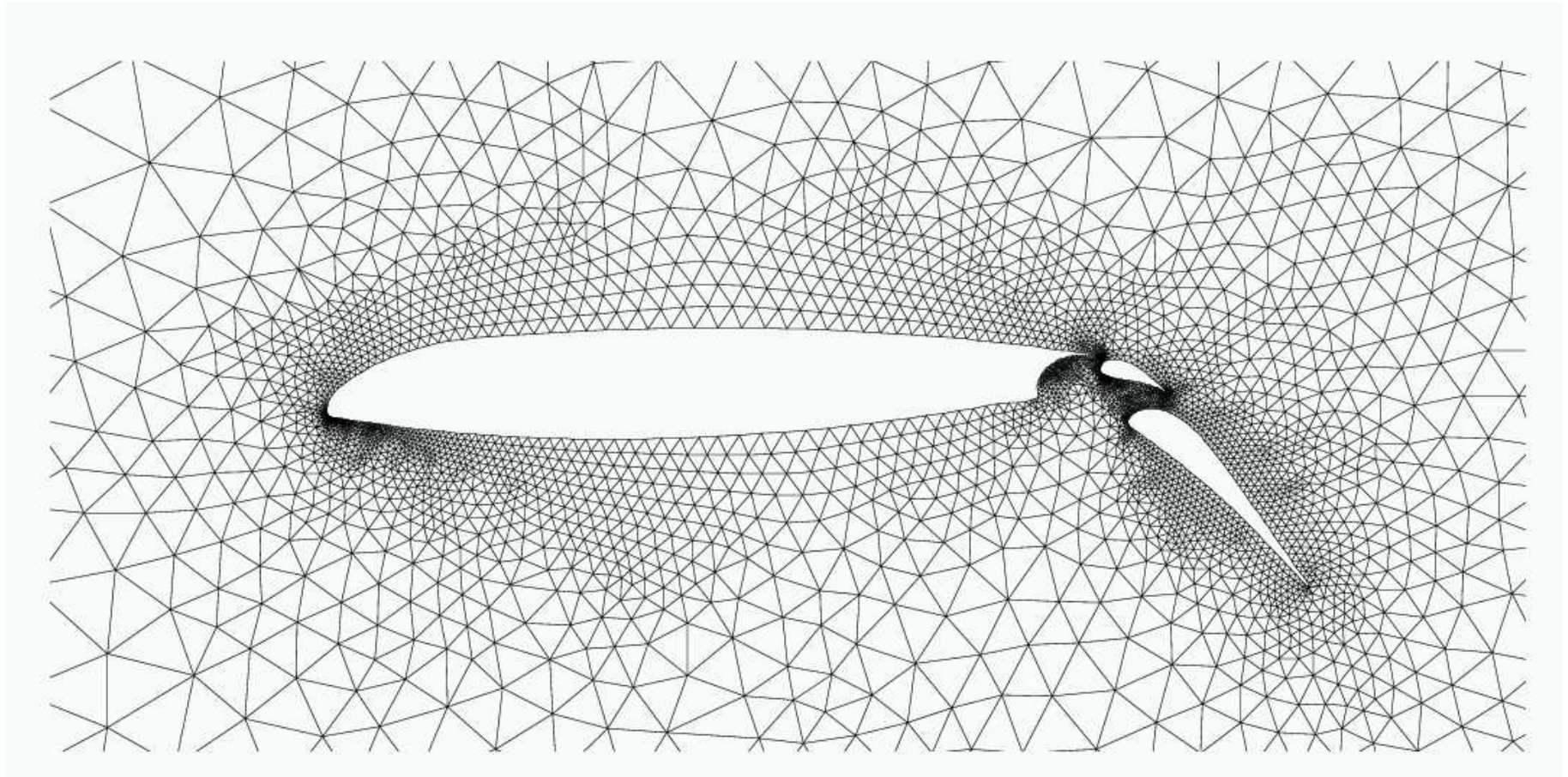
mithilfe einer Kubaturformel für Dreiecke bzw. Rechtecke I beliebig genau approximieren, sofern die Zerlegung nur hinreichend fein gewählt ist.

Von einer zulässigen Zerlegung verlangt man, dass $\Omega = \cup_{i=1}^N K_i$ und dass $K_i \cap K_j$ für $i \neq j$ entweder leer ist oder nur aus gemeinsamen Randpunkten besteht.

Folgende Bilder zeigen Beispiele für Triangulierungen, d.h. Zerlegungen in Dreiecke.

Triangulierung eines Polygons:



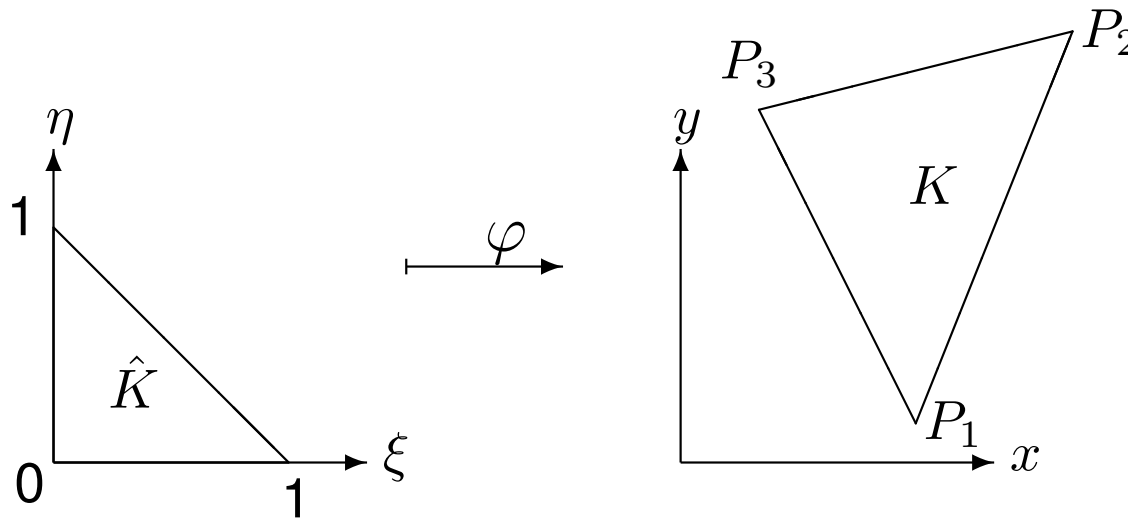


Triangulierung des Außengebiets eines Tragflächenquerschnitts.

Durch die affine Transformation

$$\varphi : \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} x(\xi, \eta) \\ y(\xi, \eta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix}$$

wird das gleichschenkelig rechtwinklige Referenzdreieck \hat{K} bijektiv auf ein bel. Dreieck $K \subset \Omega$ abgebildet mit $(0, 0) \mapsto P_1 = (x_1, y_1)$, $(1, 0) \mapsto P_2 = (x_2, y_2)$, $(0, 1) \mapsto P_3 = (x_3, y_3)$.



Mit Hilfe der Substitutionsregel

$$\int_K f(x, y) \, dx dy = \int_{\hat{K}} f(\varphi(\xi, \eta)) |\det \varphi'| \, d\xi d\eta = D \int_{\hat{K}} f(\varphi(\xi, \eta)) \, d\xi d\eta,$$

wobei

$$D = |\det \varphi'| := \left| \det \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{bmatrix} \right|$$

die Funktionaldeterminante von φ ist, lassen sich alle Einzelintegrale $\int_{K_i} f(x, y) \, dx dy$ auf Integrale über \hat{K} zurückführen.

Es genügt daher, Integrale der Bauart

$$\int_{\hat{K}} g(\xi, \eta) \, d\xi d\eta$$

zu approximieren.

Wir betrachten einige Kubaturformeln

$$\int_{\hat{K}} g(\xi, \eta) d\xi d\eta \approx \sum_{i=1}^n \gamma_i g(\xi_i, \eta_i)$$

für das Referenzdreieck \hat{K} .

Beispiel 1:. Die Schwerpunktregel

$$\int_{\hat{K}} g(\xi, \eta) d\xi d\eta \approx \frac{1}{2} g\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$$

besitzt den Exaktheitsgrad 1.

Beispiel 2: Die Formel

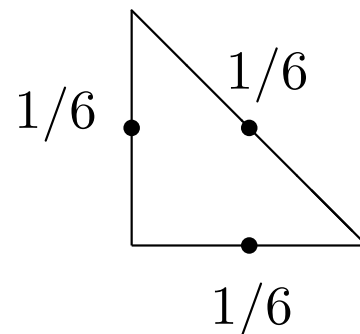
$$\int_{\hat{K}} g(\xi, \eta) d\xi d\eta \approx \frac{1}{6} \left[g\left(0, \frac{1}{2}\right) + g\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + g\left(0, \frac{1}{2}\right) \right],$$

kompakter:

i	ξ_i	η_i	γ_i
1	1/2	0	1/6
2	0	1/2	1/6
3	1/2	1/2	1/6

, besitzt den Exaktheitsgrad 2.

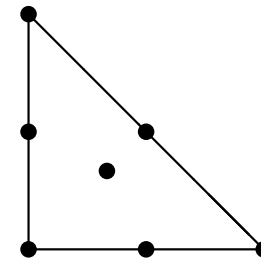
Symbolisch:



Beispiel 3: Die Formel $\int_{\hat{K}} g(\xi, \eta) d\xi d\eta \approx \sum_{k=1}^7 \gamma_k g(\xi_k, \eta_k)$ mit

i	ξ_i	η_i	γ_i
1	0	0	1/40
2	1	0	1/40
3	0	1	1/40
4	1/2	0	1/15
5	1/2	1/2	1/15
6	0	1/2	1/15
7	1/3	1/3	27/120

besitzt den Exaktheitsgrad 3.



7.6.4 Die Monte-Carlo Methode

Bei der Approximation sehr hochdimensionaler mehrfacher Integrale sind die bisher beschriebenen Methoden zu aufwendig. Hier hat sich ein stochastisches Simulationsverfahren, die sog. Monte-Carlo Methode, als „letztes Mittel“ bewährt. Hierbei wird der Integrand an einer großen Zahl N Stützstellen mit konstantem Gewicht $1/\text{Volumen}(\Omega)$ ausgewertet, wobei die Stützstellen durch einen Zufallsgenerator erzeugt werden.

Man kann Aussagen beweisen über die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert des Integrals innerhalb einer vorgegebenen Schranke von der so berechneten Approximation liegt.

Typisches Verhalten des Fehlers ist, unabhängig von der Raumdimension, eine Konvergenzrate von

$$|I_N - I| = O(N^{-1/2}).$$