VI. Numerische Integration

$f(x) = \frac{\sin x}{x}$ $\quad g(x) = e^{-x^2}$ $\quad x \in [a,b]$

Ziel: $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$ mit f auf $[a,b]$ integrierbar

Vorgehensweise:

Auswertung der Funktion $f(x)$ an vorgegebenen Stützstellen $x_i \in [a,b]$ mit $i = 0, \dots, n$ sowie die Bestimmung der Integralnäherung aus

$$I(f) \simeq I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \qquad (1)$$

exaktes Integral — approximiertes Integral

Bemerkung:

Eine Integralapproximation vom Typ (1) heißt Quadraturformel. Der Quadraturfehler ist gegeben durch:

$$R_n(f) = I(f) - I_n(f)$$

Definition:

Eine Quadraturformel heißt exakt vom Grad m, wenn Polynome vom Grad m exakt integriert werden, d. h.

$$R_n(P_m) = 0 \;\forall\, P_m \in \Pi_m$$

6.1. Gauss Quadratur

Bei geeigneter Stützstellen - und Gewichtswahl kann gezeigt werden, dass die Gauss-Quadratur mit $n+1$ Stützstellen einen Exaktheitsgrad von $2n+1$ hat

Herleitung der Stützstellen und Gewichte für die Gauss-Quadratur

2 Stützstellen:
$2 = n+1$
$\Leftrightarrow n = 1$

geg: 2 Stützstellen, 2 Gewichte $\Big\} \; I_1(f) = \sum_{i=0}^{1} w_i f(x_i)$

ges: w_0, w_1, x_0, x_1

Annahme: $I_1(f)$ integriert Polynome bis zum Grad 3 exakt

Lösung:

Quadratur Formel

1) $\int_{-1}^{1} 1 \, dx = x\Big|_{-1}^{1} = 1+1 = 2 = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1$
$f(x) = 1$

2) $\int_{-1}^{1} x \, dx = \frac{1}{2}x^2\Big|_{-1}^{1} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 = w_0 \cdot x_0 + w_1 x_1$
$f(x) = x$
↳ $f(x_0) = x_0, \ldots$

3) $\int_{-1}^{1} x^2 \, dx = \frac{1}{3}x^3\Big|_{-1}^{1} = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3} = w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2$
$f(x) = x^2$
↳ $f(x_0) = x_0^2$

4) $\int_{-1}^{1} x^3 \, dx = \frac{1}{4}x^4\Big|_{-1}^{1} = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = 0 = w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3$
$f(x) = x^3$

—> ein nicht lineares System:

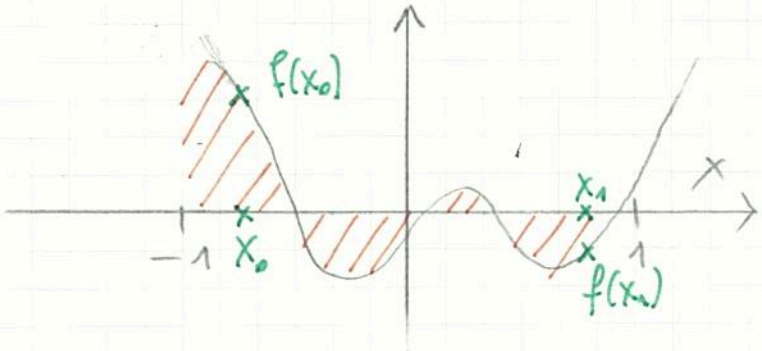
$$\begin{aligned} w_0 + w_1 &= 2 \\ w_0 x_0 + w_1 x_1 &= 0 \\ w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 &= 2/3 \\ w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 &= 0 \end{aligned}$$

-> die ausgewählten Polynome repräsentieren alle Polynome von x^0 bis x^3

-> 4 Gleichungen für 4 Unbekannte

-> Lösen des nicht-linearen Problems liefert:

$w_0 = w_1 = 1 \qquad x_1 = -\sqrt{1/3} \qquad x_2 = +\sqrt{1/3}$



$I(f)_{[-1,1]} = 1 \cdot f(x_0) + 1 \cdot f(x_1)$

$= w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$

L> Approximation des Integrals bis Polynom 3. Grades ok.

Modellierung und Simulation in der Biomechanik
GAUSS Quadratur

Die NEWTON–CÔTES–Formeln erreichen bei $n+1$ äquidistanten Stützstellen $(0, \ldots, n)$ bzw. $(1, \ldots, n+1)$ höchstens den Exaktheitsgrad n. Daher versucht man bei der GAUSS Quadratur durch geeignete Wahl der Stützstellen einen möglichst hohen Exaktheitsgrad zu erreichen. Man kann zeigen, dass die Wahl der Stützstellen als Nullstellen des $(n+1)$-ten Orthogonalpolynoms zu einem Exaktheitsgrad $2n+1$ führt und dass dieser Exaktheitsgrad nicht überschritten werden kann (Optimalität).
In der folgenden Tabelle sind die Nullstellen x_j und Gewichte γ_j für die GAUSS–LEGENDRE–Quadraturformeln

$$G_n(f) := \sum_{j=0}^{n} \gamma_j f(x_j) \approx \int_{-1}^{1} f(x)\,dx$$

bis $n = 3$ angegeben:

n	$P_{n+1}(x)$	Nullstellen $x_0, \ldots, x_n$	Gewichte $\gamma_0, \ldots \gamma_n$
0	x	0	2
1	$x^2 - \frac{1}{3}$	$-0.57735\,02692 = -\sqrt{1/3}$	1
		$0.57735\,02692 = \sqrt{1/3}$	1
2	$x^3 - \frac{3}{5}x$	$-0.77459\,66692 = -\sqrt{3/5}$	0.55555 55556
		0.0	0.88888 88889
		$0.77459\,66692 = \sqrt{3/5}$	0.55555 55556
3	$x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$	−0.86113 63116	0.34785 48451
		−0.33998 10436	0.65214 51549
		0.33998 10436	0.65214 51549
		0.86113 63116	0.34785 48451

Da die verwendeten LEGENDRE–Polynome auf dem Intervall $[-1, 1]$ definiert sind, muss man zur numerischen Berechnung eines beliebigen Integrals auf dem Intervall $[a, b]$ die Transformation

$$t = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x \quad \text{für} \quad x \in [-1, 1]$$

vorschalten. Dies ergibt wegen $dt/dx = \frac{b-a}{2}$:

$$\int_a^b f(t)\,dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{j=0}^{n} \gamma_j f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x_j\right).$$