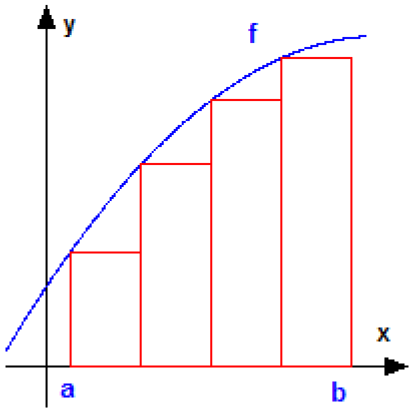
Numerisches Integrieren

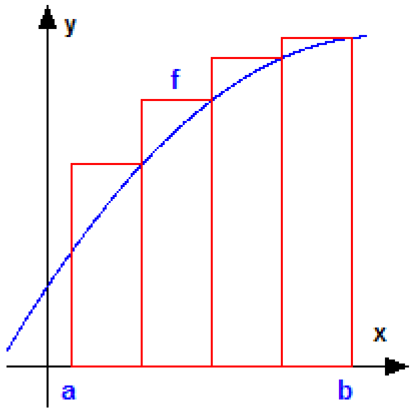
Ac

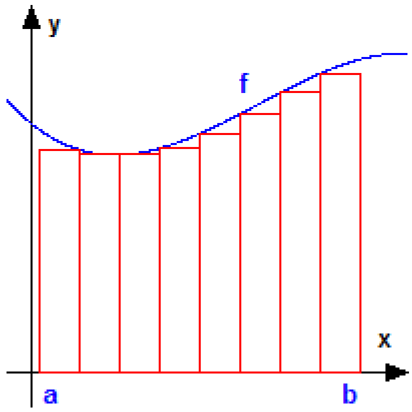
In der Praxis werden Integrale in der Regel numerisch, also approximativ, bestimmt. Dazu sollen hier verschiedene Algorithmen betrachtet werden (Rechteck, Mittenrechteck, Trapez, Simpson, Romberg).

Die Rechtecksintegration (Untersumme;Obersumme)

Hier werden zwischen Graph von f und x-Achse über [a;b] Rechtecke einbeschrieben bzw. umbeschrieben.







Die Summe der Rechtecksflächeninhalte nennt man „Untersumme U_n“ bzw. „Obersumme O_n“ , wobei n die Anzahl der Zerlegungsstreifen angibt. Für die Breite h jedes einzelnen Rechtecks gilt: h = (b-a) / n .

Falls f monoton steigend ist, so gilt: $\boxed{U_n = h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f(a + i \cdot h)}$ und $\boxed{O_n = h \cdot \sum_{i=1}^{n} f(a + i \cdot h)}$

Für monoton fallendes f gilt das Umgekehrte.

Für nicht monotone f (Grafik Nr. 3) muss man andere Formeln verwenden, bei denen das Maximum bzw. Minimum von f im betreffenden Teilintervall gesucht werden muss .

Algorithmus für monoton steigende Funktionen:

```
Eingabe (a, b, n, f)
h = (b-a)/n
summe = 0
x = a
für i von 0 bis n-1 wiederhole
    summe = summe + f(x)
    x = x + h
Ende
untersumme = summe·h
obersumme = untersumme + (f(b)-f(a))·h
```

Beispiel: $f(x) = x^3$; [0 ; 2]

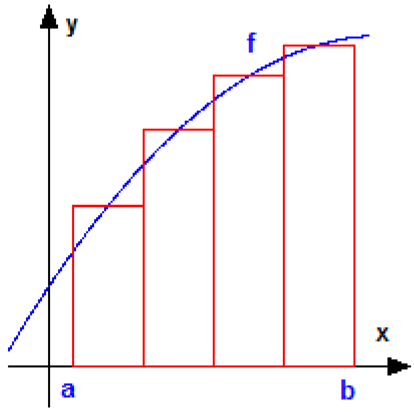
$U_{10} = 0{,}2 \cdot (0{,}2^3 + 0{,}4^3 + \ldots + 1{,}8^3) = 3{,}24$ $O_{10} = 0{,}2 \cdot (0{,}2^3 + 0{,}4^3 + \ldots + 2{,}0^3) = 4{,}84$

$U_{100} = 0{,}02 \cdot (0{,}02^3 + 0{,}04^3 + \ldots + 1{,}98^3) = 3{,}9204$ $O_{100} = 0{,}02 \cdot (0{,}02^3 + 0{,}04^3 + \ldots + 2{,}0^3) = 4{,}0804$

Man erkennt eine Annäherung an den exakten Integralwert 4,0 .

Die Mittenrechtecksintegration

Statt der Rechtecksbegrenzungen kann man auch deren Mitten als Stützstellen der Integration verwenden. So erhält man die Mittenrechtecksformel.



$$\boxed{M_n = h \cdot \sum_{i=1}^{n} f(a + (i - 0{,}5) \cdot h)}$$

Der Vorteil ist hier, dass auch Funktionen mit Polstellen an den Rändern integriert werden können.

Algorithmus:

```
Eingabe (a, b, n, f)
h = (b-a)/n
summe = 0
x = a + h/2
für i von 1 bis n wiederhole
   summe = summe + f(x)
   x = x + h
Ende
mittenrechteckssumme = summe·h
```

Beispiel 1: $f(x) = x^3$; $[\,0\,;\,2\,]$

$M_{10} = 0{,}2 \cdot (0{,}1^3 + 0{,}3^3 + \ldots + 1{,}9^3) = 3{,}98$

$M_{100} = 0{,}02 \cdot (0{,}01^3 + 0{,}03^3 + \ldots + 1{,}99^3) = 3{,}9998$

Die Annäherung an den exakten Integralwert 4,0 ist ersichtlich .

Beispiel 4: $f(x) = x^{-2/3} = \dfrac{1}{\sqrt[3]{x^2}}$; $[\,0\,;\,1\,]$; f besitzt eine Polstelle bei x = 0 .

Es entsteht ein sog. „uneigentliches“ Integral mit dem Wert 3,0 !

$M_{10} = 0{,}1 \cdot (0{,}05^{-2/3} + 0{,}15^{-2/3} + \ldots + 0{,}95^{-2/3}) \approx 2{,}33$

$M_{100} = 0{,}01 \cdot (0{,}005^{-2/3} + 0{,}015^{-2/3} + \ldots + 0{,}995^{-2/3}) \approx 2{,}69$

$M_{1000} = 0{,}001 \cdot (0{,}0005^{-2/3} + 0{,}0015^{-2/3} + \ldots + 0{,}9995^{-2/3}) \approx 2{,}86$

$M_{10000} = 0{,}0001 \cdot (0{,}00005^{-2/3} + 0{,}00015^{-2/3} + \ldots + 0{,}99995^{-2/3}) \approx 2{,}93$

$M_{100000} = 0{,}00001 \cdot (0{,}000005^{-2/3} + 0{,}000015^{-2/3} + \ldots + 0{,}999995^{-2/3}) \approx 2{,}97$

Die Annäherung an den exakten Wert ist „mühsam“ .

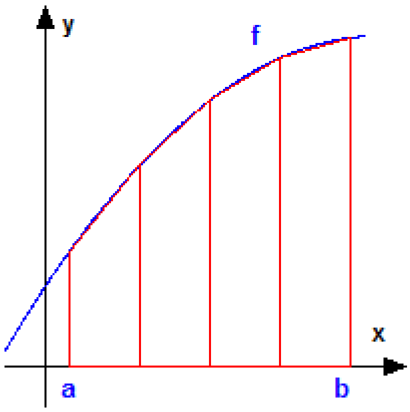
Die Trapezintegration

Bildet man das arithmetische Mittel aus Untersumme und Obersumme, so erhält man die Trapezformel.
Bei dieser Methode wird jedes Funktionsteilstück (durch Streckenabschnitte) linear approximiert !

$$T_n = (U_n + O_n)/2 = \frac{h}{2} \cdot [\sum_{i=0}^{n-1} f(a+i\cdot h) + \sum_{i=1}^{n} f(a+i\cdot h)] =$$

$$\frac{h}{2} \cdot [2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(a+i\cdot h) + f(a) + f(b)]$$, also

$$\boxed{T_n = h \cdot [\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(a+i\cdot h)]}$$



Algorithmus:

```
Eingabe (a, b, n, f)
h = (b-a)/n
summe = (f(a)+f(b))/2
x = a+h
für i von 1 bis n-1 wiederhole
   summe = summe + f(x)
   x = x + h
Ende
trapezsumme = summe ·h
```

Beispiel: $f(x) = x^3$; $[0 ; 2]$

$T_{10} = 0{,}2 \cdot ((0^3+2^3)/2 + 0{,}2^3 + 0{,}4^3 + \ldots + 1{,}8^3) = 4{,}04$

$T_{100} = 0{,}02 \cdot ((0^3+2^3)/2 + 0{,}02^3 + 0{,}04^3 + \ldots + 1{,}98^3) = 4{,}0004$

Die Annäherung an den exakten Integralwert 4,0 ist ersichtlich .

Die Simpson-Integration

Die Idee der Simpson-Integration ist, das Intervall [a;b] in m Teilintervalle zu zerlegen, in denen das jeweilige Funktionsstück durch Parabelsegmente approximiert wird.

Zunächst sei die (einfache) Simpson-Formel für ein einziges Parabelsegment über [a;b] betrachtet :

$p(x) = ux^2+vx+w$ (Parabel) sei eine Näherung für f(x) .
p soll mit f übereinstimmen an den Stellen a, b, (a+b)/2 .

Für das Integral gilt $\int_a^b p(x)dx = [\frac{u}{3}x^3 + \frac{v}{2}x^2 + wx]_a^b = \frac{u}{3}(b^3 - a^3) + \frac{v}{2}(b^2 - a^2) + w(b-a)$

Es lässt sich nun zeigen, dass gilt: $\frac{b-a}{6} \cdot [p(a) + 4 \cdot p(\frac{a+b}{2}) + p(b)] = \frac{u}{3}(b^3 - a^3) + \frac{v}{2}(b^2 - a^2) + w(b-a)$

Da p(x) eine Approximation für f(x) ist, folgt dann auch

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \cdot [f(a) + 4 \cdot f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]}$$ einfache Simpson-Formel bzw. **Keplersche Fassregel**

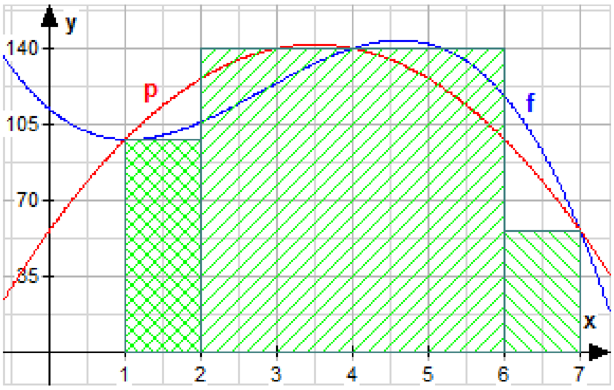
Beispiel: $f(x) = -2x^3 + 17x^2 - 29x + 112$ im Intervall [1;7] .

Mittels der obigen Näherungsformel errechnet man :
f(1)=98 f(7)=56 f(4)=140 Integralnäherung = 714 .

Dies ist sogar der exakte Wert für das Integral !!

Rechts ist die grafische Veranschaulichung zu sehen.
Die Summe der schraffierten Rechtecksflächeninhalte ist gleich dem gesuchten Integralwert .

p(x) stimmt an den 3 Stützstellen 1;4;7 mit f(x) überein .
Es gilt: $p(x) = -7x^2+49x+56$



Zerlegt man das Intervall [a;b] in m gleich große Teilintervalle und approximiert f durch m Parabeln, so lässt sich die einfache Simpson-Formel auf alle diese Intervalle anwenden. Die Intervallbreite (zwischen 2 Stützstellen) ist dann (b-a) / (2m) . Somit hat man eine gerade Anzahl von Intervallen, da ja jedes Parabelsegment in 2 Intervalle aufgeteilt wird (mit je 3 Stützstellen).

Für das Integral ergibt sich folgendes:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \cdot [f(a) + f(b) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{m-1} f(a + 2i \cdot h) + 4 \cdot \sum_{i=1}^{m} f(a + (2i-1) \cdot h)] \quad ; \quad h = \frac{b-a}{2m}}$$

(Simpson-Formel für 2m Stützstellen)

Anmerkung: Für Polynome bis zum Grad n = 3 liefert die Simpsonformel exakte Integralwerte !

Algorithmus für die Simpson-Formel mit 2m Stützstellen :

```
Eingabe (a, b, m, f)
h0 = (b-a)/m
h = h0/2
summe1 = 0
summe2 = 0
x = a + h
für i von 1 bis m-1 wiederhole
   summe1 = summe1 + f(x+h)
   summe2 = summe2 + f(x)
   x = x + h0
Ende
summe2 = summe2 + f(x)
simpsonsumme = (f(a)+f(b)+2·summe1+4·summe2)·h/3
```

Beispiel: $f(x) = x^4$; [0 ; 1] ; exakter Wert: 0,2

m=5: Dann ist 2m=10 und h = 0,1

$S_{10} = 0{,}1/3 \cdot [\, 0^4+1^4 + 2\cdot(0{,}2^4 + 0{,}4^4 +0{,}6^4 +0{,}8^4) + 4\cdot (0{,}1^4 + 0{,}3^4 +0{,}5^4 +0{,}7^4 +0{,}9^4)\,] =$
$1/30 \cdot (\, 1 + 2\cdot 0{,}5664 + 4\cdot 0{,}9669\,) = 6{,}0004 / 30 = 0{,}20001...$

Also bereits eine recht gute Approximation !

Newton-Cotes-Formeln

Die Trapezformel sowie die Simpson-Formel gehören zur Klasse der so genannten **Newton-Cotes-Formeln .**

Die allgemeine Form hierfür ist :

$$\boxed{I = \frac{b-a}{n} \cdot \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} f(a + i \cdot \frac{b-a}{n})]}$$

Für die Gewichte $\alpha_i^{(n)}$ gilt folgende Tabelle :

n	Name	$\alpha_i^{(n)} \quad (i = 0, 1, \ldots, n)$						
1	Trapez - Regel	1/2	1/2					
2	Simpson - Regel	1/3	4/3	1/3				
3	3/8 - Regel	3/8	9/8	9/8	3/8			
4	Milne - Regel	14/45	64/45	24/45	64/45	14/45		
5		95/288	375/288	250/288	250/288	375/288	95/288	
6	Weddle - Regel	41/140	216/140	27/140	272/140	27/140	216/140	41/140

Für größere n sind die Newton-Cotes-Formeln wegen des Auftretens negativer Gewichte unbrauchbar .

Bei geraden n-Werten werden Polynome bis zum Grad (n+1) exakt integriert, bei ungeradem n ist die Integration exakt für Polynome bis zum Grad n.

n=3 bedeutet, dass mit einem Polynom vom Grad n=3 approximiert wird. Ausgeschrieben erhält man für **n=3** die Integralnäherungsformel:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{3} \cdot [\frac{3}{8} f(a) + \frac{9}{8} f(a + \frac{b-a}{3}) + \frac{9}{8} f(a + 2 \cdot \frac{b-a}{3}) + \frac{3}{8} f(a + 3 \cdot \frac{b-a}{3})]$$ bzw. vereinfacht

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{3} \cdot [\frac{3}{8} f(a) + \frac{9}{8} f(\frac{2a+b}{3}) + \frac{9}{8} f(\frac{a+2b}{3}) + \frac{3}{8} f(b)]$$ und weiter vereinfacht

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{8} \cdot [f(a) + 3 \cdot f(\frac{2a+b}{3}) + 3 \cdot f(\frac{a+2b}{3}) + f(b)]}$$ (**Newton-Cotes 3/8-Formel**)

Die Romberg-Integration (Romberg-Schema)

Das Romberg-Verfahren ist eine Methode der Konvergenzbeschleunigung.

Ausgehend von einer Trapeznäherung für das zu berechnende Integral wird eine gegen den Integralwert konvergierende Folge von Näherungen R[0,k] konstruiert. Durch Linearkombination der Folgenglieder erhält man bessere Näherungen R[i,k] .

1.Schritt: Berechne $R[0,0]$ = h/2 · [f(a)+f(b)] mit h = b-a

2.Schritt: Für k von 1 bis n berechne $R[0,k] = \frac{R[0,k-1]}{2} + h \cdot \sum_{j=1}^{2^{k-1}} f[a + (2j-1) \cdot h]$; $h = \frac{b-a}{2^k}$

3.Schritt: Für i von 1 bis n
Für k von 0 bis n-i

$$\boxed{R[i,k] = \frac{4^i \cdot R[i-1,k+1] - R[i-1,k]}{4^i - 1}}$$ (Linearkombinationen)

Schema:

R_{00}	R_{01}	R_{02}	...	$R_{0,n-2}$	$R_{0,n-1}$	R_{0n}
$R_{10}=(4R_{01}-R_{00})/3$	R_{11}	R_{12}	...	$R_{1,n-2}$	$R_{1,n-1}$	
$R_{20}=(16R_{11}-R_{10})/15$	R_{21}	R_{22}	...	$R_{2,n-2}$		
...	...	...				
$R_{n-1,0}$	$R_{n-1,1}$					
R_{n0}						

Algorithmus Romberg-Schema :

```
Eingabe (a, b, n, f)
h = b-a
r[0,0] = h/2·(f(a)+f(b))
für k von 1 bis n wiederhole
   h = h/2
   summe = 0
   für j von 1 bis 2^(k-1) wiederhole
      summe = summe + f(a+(2j-1)·h)
   ende
   r[0,k] = r[0,k-1]/2 + h·summe
ende
für i von 1 bis n wiederhole
   für k von 0 bis n-i wiederhole
      r[i,k] = (4^i·r[i-1,k+1]-r[i-1,k])/(4^i-1)
   ende
ende
rombergwert = r[n,0]
```

Beispiel 1: $f(x) = x^2$; [1;3] ; wähle n = 3

	k=0	k=1	k=2	k=3
i=0	10	9	8,75	8,6875
i=1	$8,\overline{6}$	$8,\overline{6}$	$8,\overline{6}$	
i=2	$8,\overline{6}$	$8,\overline{6}$		
i=3	**$8,\overline{6}$**			

Zeile 0 wird berechnet gemäß der Schritte 1 und 2 !

Zeilen 1 bis 3 werden berechnet gemäß Schritt 3 .
Z.B. $R_{10} = (4\cdot 9-10)/3 = 8,\overline{6}$.

Beispiel 2: $f(x) = e^x$; [0;1] ; wähle n = 4

```
1,8591409142295225  1,7539310924648253  1,7272219045575166  1,7205185921643018  1,7188411285799945
1,7188611518765928  1,7183188419217472  1,7182841546998968  1,7182819740518920
1,7182826879247577  1,7182818422184403  1,7182818286753583
1,7182818287945305  1,7182818284603887
1,7182818284590782  ( 13 Nachkommastellen sind richtig )

1.7182818284590452 ( zum Vergleich; exakt auf 16 Nachkommastellen )
```

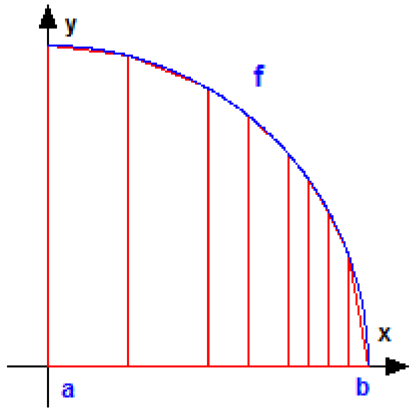
Beispiel 3: $f(x) = \sin(x)$; [0;p] ; wähle n = 4

```
0,0000000000000002  1,5707963267948966  1,8961188979370398  1,9742316019455510  1,9935703437723395
2,0943951023931953  2,0045597549844207  2,0002691699483880  2,0000165910479360
1,9985707318238357  1,9999831309459860  1,9999997524545725
2,0000055499796710  2,0000000162880420
1,9999999945872906
```

Anmerkung: Der exakte Wert ist 2,0 .

Adaptive Integration

Alle bisher betrachteten Verfahren berücksichtigten nicht die Tatsache, dass bei vielen Funktionen die Steigungen in Teilintervallen sehr unterschiedlich verlaufen. Daher sollte man in Intervallen mit starker Steigung mehr Stützstellen verwenden und in Intervallen mit schwacher Steigung deren weniger (siehe Grafik).



Man spricht in diesen Fällen von adaptiver (angepasster) Integration.

Beispiel: $f(x) = \sqrt{16 - x^2}$; $[0;4]$

Stützstellenwahl z.B. : 0 1 2 2,5 3 3,25 3,5 3,75 3,875 4

Vorgehensweise (adaptive Integration):

0. Schritt: Gib eine Toleranz tol vor, z.B. tol = 1e-12 .
1. Schritt: Berechne eine Näherung s1 in [a;b] , z.B. mit der einfachen Simpson-Formel.
3. Schritt: Bestimme die Mitte m von [a;b]. m = (a+b)/2.
4. Schritt: Berechne eine Näherung s21 in [a;m] sowie s22 in [m;b] .
5. Schritt: Falls | s1 - (s21+s22) | < tol , dann ist das Integral = s21+s22. Ende !
Andernfalls führe die Schritte 1 bis 5 für die Intervalle [a;m] und [m;b] durch .

Anmerkungen:

Wegen der Verwendung der Simpson-Formel werden keine Funktionen mit Lücken oder Polstellen an den Intervallenden akzeptiert.
Verwendet man stattdessen die Mittenrechtecksmethode, dann können auch derartige Funktionen berücksichtigt werden. Die Rechenzeit ist aber deutlich länger !
Noch wesentlich besser ist die Methode nach Gauß-Kronrod ; hier ist jedoch die Theorie kompliziert !

Algorithmus adaptive Simpson-Integration :

```
Eingabe (a, b, f, tol)  // tol = Toleranz (z.B. 1E-16)
integral = 0.0
integriere(a,b)
integralwert = integral

integriere(a,b)
   s1 = simpson(a,b)
   m = (a+b)/2
   s21 = simpson(a,m)
   s22 = simpson(m,b)
   teilInt = s21+s22
   falls |s1-teilInt| < tol
      integral = integral + teilInt
   sonst
      integriere(a,m)    // rekursiver Aufruf
      integriere(m,b)    // rekursiver Aufruf
   ende sonst
ende integriere

simpson(a,b)
   rückgabe (f(a)+4·f((a+b)/2)+f(b))·(b-a)/6;
ende simpson
```

Beispiel 1: f(x) = x/(x²-1) ; [1.001;10]

Zu Beginn müssen viele Stützstellen verwendet werden, am Ende wenige.

Der exakte Integralwert ist übrigens

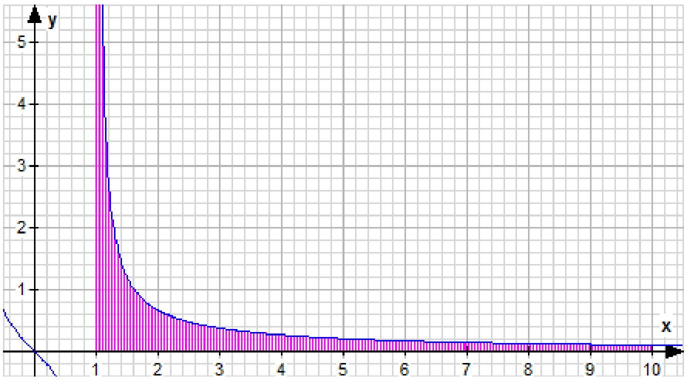
$I = 0{,}5\cdot[\ \ln(x+1)+\ln(x-1)\ ]_{1{,}001}^{10} =$

$[\ \ln(11)+\ln(9)-\ln(2{,}001)-\ln(0{,}001)\ ] / 2 =$

$\ln(99/0{,}002001) / 2 =$

ln(33000000/667) / 2

Dies ist ca. 5,40461403675756531



Mit dem adaptiven Simpson-Algorithmus berechnet Java7 bis auf 12 Nachkommastellen genau:
`5.404614036757633`

Beispiel 2 (siehe Grafik oben): f(x) = √(16-x²) ; [0;4] .
Java7: `12.566370614359125 (Simpson; 13 richtige Nachkommastellen)`

Beispiel 3 : f(x) = sin(x)/x ; [0;3] . Funktion mit Lücke bei x = 0 .
Java7: `1.8486525280002926 (Mittenrechteck; 8 richtige Nachkommastellen)`

Beispiel 4: $f(x) = x^{-2/3} = \frac{1}{\sqrt[3]{x^2}}$; [0 ; 1] ; f besitzt eine Polstelle bei x = 0 .

Es entsteht ein sog. „uneigentliches“ Integral mit dem Wert 3,0 !
Java7: `2.9999999999887033 (Mittenrechteck; erstaunlich präzise !)`