J. Bopp, A. Bot, R. Dorau, M. Fallahpour, A. Heinimann, F. Kruse

Beilage zur Serie 10

Quadraturformel

Es soll das Integral I einer Funktion f über das Intervall $[a, b]$ numerisch berechnet werden,

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Auf dem Intervall $[0, 1]$ benutzen wir dazu eine Quadraturformel

$$Q[f] = \sum_{k=1}^{n} \omega_k f(x_k), \quad x_k \in [0,1],\ k = 1, 2, \ldots, n.$$

Die x_k nennt man Stützstellen (oder Knoten) und die ω_k Gewichte. Um das Integral über ein beliebiges Intervall $[a, b]$ zu bestimmen, transformieren wir einfach das Einheitsintervall $[0, 1]$ mittels $x \mapsto (b-a)x + a$ auf das gewünschte Intervall. In dieser Serie betrachten wir die Trapezregel $Q_T[f]$ und die Simpson-Regel $Q_S[f]$. Die Stützstellen und die Gewichte dieser Formeln kann sind in der folgenden Tabelle aufgeschrieben:

	Stützstellen			Gewichte		
Trapezregel	0	1		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
Simpson-Regel	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$

Summierte Quadraturformeln

Das Intervall $[a, b]$ kann nun in N Teilintervalle der Länge $h = (b-a)/N$ aufgeteilt werden. Auf jedem Teilintervall $[a + kh, a + (k + 1)h]$, $k = 0, 1, \ldots, N - 1$, berechnet man eine Approximation des Integrals gemäss der obigen Formel und summiert dann die Werte über die Teilintervalle. Dadurch erhält man beispielsweise die summierte Simpson-Regel:

$$Q_S(h) = \frac{h}{6}\left(f(a) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(a + kh) + 4\sum_{k=0}^{N-1} f(a + (k + 1/2)h) + f(b) \right).$$

Die Simpson-Regel hat Exaktheitsgrad 3 und der Fehler konvergiert mit Ordnung 4, d.h. der Fehler verhält sich wie N^{-4} für $N \to \infty$, falls der Integrand genug glatt ist.

Adaptive Quadratur

Um eine numerische Approximation $I_Q(a,b)$ des Integrals

$$I(a,b) = \int\limits_a^b f(x)\,dx$$

mit einer Quadraturformel Q auch für stark variierende oder singuläre Funktionen f effizient berechnen zu können, wählt man die Zerlegung des Integrationsbereiches nicht äquidistant, sondern passt sie dem Verhalten des Integranden an. Um diese Zerlegung zu erreichen, benutzen wir eine "divide and conquer"-Strategie:
Für eine vorgegebene Toleranz tol prüfen wir, ob $|I(a,b) - I_Q(a,b)| \leq tol$ ist. Falls nicht, unterteilen wir das Intervall $[a,b]$ in zwei Teilintervalle $[a,m]$ und $[m,b]$ mit $m = {}^{(a+b)}\!/_2$.
Dann wenden wir dasselbe Verfahren mit $tol = {}^{tol}\!/_2$ auf die Teilintervalle an.
Um zu prüfen, ob die Toleranz erreicht ist, brauchen wir noch einen Fehlerschätzer für $|I(x_i,x_{i+1}) - I_Q(x_i,x_{i+1})|$ auf dem Intervall $[x_i,x_{i+1}]$ der Länge $h_i = x_{i+1} - x_i$: Wir verwenden hierzu eine zweite Quadraturformel $\tilde{Q}$ mit grösserem Exaktheitsgrad als Q und nehmen an, dass

$$|I(x_i,x_{i+1}) - I_Q(x_i,x_{i+1})| \approx |I_{\tilde{Q}}(x_i,x_{i+1}) - I_Q(x_i,x_{i+1})|.$$

Wir wählen für Q die Trapezregel und für $\tilde{Q}$ die Simpson-Regel.

$$\begin{aligned}
\text{Trapezregel:} \qquad & I_T(x_i,x_{i+1}) = \frac{h_i}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) \\
\text{Simpson-Regel:} \qquad & I_S(x_i,x_{i+1}) = \frac{h_i}{6}\left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1})\right) \\
& \phantom{I_S(x_i,x_{i+1})} = \frac{1}{3} I_T(x_i,x_{i+1}) + \frac{2h_i}{3} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)
\end{aligned}$$

Der Pseudocode für die Funktion `quadadapt` sieht folgendermassen aus:

Input: `f,a,b,fa,fb,tol`
Output: I_{adapt}
  Setze $m = {}^{(a+b)}\!/_2$
  Berechne $f(m)$
  if $|I_S(a,b) - I_T(a,b)| \geq tol$ **then**
    $I_{adapt} =$ `quadadapt(f,a,m,fa,fm,tol/2)` $+$ `quadadapt(f,m,b,fm,fb,tol/2)`
  else
    $I_{adapt} = I_T(a,b)$
  end if

Allgemeine Informationen zum Praktikum befinden sich auf der Webseite
`http://cm.dmi.unibas.ch/teaching/praktikumII/praktikumII.html`