ANGENÄHERTE QUADRATUR IM FALLE UNGLEICHER TEILINTERVALLE

Von

Zs. Csoma

Physikalisches Institut der Technischen Universität, Budapest

(Eingegangen am 14. Oktober 1959)

In der Praxis sieht man sich oft vor die Aufgabe gestellt, ein bestimmtes Integral $I = \int\limits_{p_0}^{p_n} f(p)dp$ mit einer Annäherungsmethode zu berechnen, falls die Funktionswerte $f(p)$ mit nicht äquidistanten Abszissen p_i bekannt sind. So kann zum Beispiel $f = r^3 p$ sein, worin p eine analytische Funktion von r bedeutet, deren Inverse aber mit elementaren Hilfsmitteln nicht darstellbar ist. In solchen Fällen gilt die Trapezsumme

$$T = \frac{1}{2}\left[(f_0+f_1)(p_1-p_0)+(f_1+f_2)(p_2-p_1)+\ldots+(f_{n-1}+f_n)(p_n-p_{n-1})\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[f_0(p_1-p_0)+f_n(p_n-p_{n-1})+f_1(p_2-p_0)+\cdots+f_{n-1}(p_n-p_{n-2})\right]$$

nur als rohe Annäherung. Angenommen, $n = 2k$ sei eine gerade Zahl, dann benötigt man, um die Simpsonsche Regel anwenden zu können, eine zu einer neuen Variablen x führende Transformation, bei der die entsprechenden Teilintervalle gleich sind. Wenn die Funktion $f(p)$ z. B. tabellarisch gegeben ist, dann wird die Durchführung der prinzipiellen Transformation, die zum Integral $I = \int\limits_{x_0}^{x_n} f[p(x)]\frac{dp}{dx}\cdot dx$ führt, im allgemeinen Schwierigkeiten bereiten. Statt die Ableitung zu bilden, wollen wir zur Bestimmung des Integrals eine Annäherungsformel angeben.

Wir nehmen auf der x Achse äquidistante x_i mit der Schrittbreite $h = x_{i+1} - x_i$ an. Es sei im Falle $0 < i < n$ $\dfrac{p_{i+1} - p_{i-1}}{2} = \Delta p_i$; $p_1 - p_0 = \Delta p_0$ bzw. $p_n - p_{n-1} = \Delta p_n$.

Nun wählen wir eine Funktion $p(x)$ derart, daß $\left(\dfrac{dp}{dx}\right)_{x_i} = \dfrac{\Delta p_i}{h}$ sei. Geometrisch bedeutet diese Aufgabe, daß die Kurve der zu ermittelnden Funktion durch die gegebenen $n+1$ Punkte geht, wobei ihre Tangenten in den Anfangs-

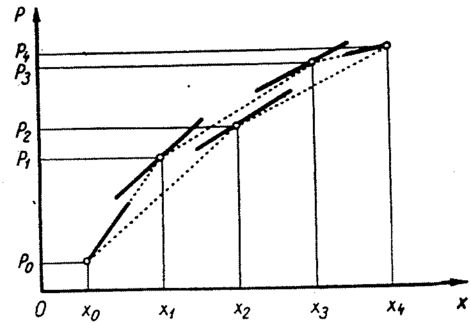

Abb. 1

und Endpunkten mit den entsprechenden Sehnen zusammenfallen, und in den Zwischenpunkten mit den die Nachbarpunkte verbindenden Sehnen parallel sind. Eine ganze rationale Funktion, die diese Forderungen erfüllt, ist leicht anzugeben. Die $2k + 1$ Punkte und die zugehörigen Tangenten bestimmen ein Polynom $4k + 1$-ten Grades. Für $k = 1$ wird

$$p(x) = p_1 + A(x - x_1) + B(x - x_1)^2 + C(x - x_1)^3 + \\ + D(x - x_1)^4 + E(x - x_1)^5,$$

$$\frac{dp}{dx} = A + 2B(x - x_1) + 3C(x - x_1)^2 + 4D(x - x_1)^3 + 5E(x - x_1)^4,$$

$$p_0 = p_1 - Ah + Bh^2 - Ch^3 + Dh^4 - Eh^5;$$

$$\frac{\Delta p_0}{h} = A - 2Bh + 4Ch^2 - 4Dh^3 + 5Eh^4,$$

$$p_2 = p_1 + Ah + Bh^2 + Ch^3 + Dh^4 + Eh^5;$$

$$\frac{\Delta p_2}{h} = A + 2Bh + 3Ch^2 + 4Dh^3 + 5Eh^4,$$

$$\frac{\Delta p_1}{h} = A.$$

Aus diesen Gleichungen erhalten wir

$$B = \frac{3}{4}\,\frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{h^2}, \qquad C = 0,$$

$$D = -\frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{4h^4}, \qquad E = 0,$$

es ist also

$$p(x) = p_1 + \frac{\Delta p_1}{h}(x - x_1) + \frac{3}{4}\frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{h^2}(x - x_1)^2 - \frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{4h^4}(x - x_1)^4.$$

Ist $k > 1$, dann erfüllt die obigen Anforderungen eine Funktion, die je Teilintervallenpaar streckenweise aus je einem solchen Polynom vierten Grades besteht.

Wendet man zuerst die Trapezformel $T = h\left\{\frac{1}{2}(y_0 + y_n) + y_1 + \ldots + y_{n-1}\right\}$ auf die Funktion $y = f\,\frac{dp}{dx}$ an, dann erhält man die schon in der Einleitung erwähnte Summe,

$$T = \frac{1}{2}\left[f_0 \Delta p_0 + f_n \Delta p_n + 2(f_1 \Delta p_1 + \ldots + f_{n-1}\Delta p_{n-1})\right].$$

Wendet man sodann auf die Funktion $y = f \cdot \frac{dp}{dx}$ die Simpsonsche Regel $S = \frac{h}{3}\sum_i s_i y_i$ an, wo $s_i = 1, 4, 2, \ldots 4, 1$, dann hat man

$$S = \frac{h}{3}\sum_{i=0}^{n} s_i f_i \frac{\Delta p_i}{h} = \frac{1}{3}\sum_{i=0}^{n} s_i f_i \Delta p_i,$$

in der die Variable x nicht mehr erscheint. Diese letzte Summenformel könnten wir die *verallgemeinerte Simpsonsche Regel* nennen. Eigentlich genügt es, sich auf $k = 1$ zu beschränken, wobei $s_i = 1, 4, 1$ ist. Beim Anschließen jedes neueren Teilintervallenpaars ist nämlich

$$f_{2k}(p_{2k} - p_{2k-1}) + f_{2k}(p_{2k+1} - p_{2k}) = 2 f_{2k}\frac{p_{2k+1} - p_{2k-1}}{2}$$

das heißt von zwei anschließenden äußeren Teilintervallen wird ein einziges inneres Teilintervall gebildet.

Ist Δp_i konstant, dann erhält man die bekannte Formel wieder, denn es ist jetzt $p = x$, also $\Delta p_i = h$.

Wendet man nun die neue Regel auf den Fall $f(p) \equiv C$ konstant an, dann wird

$$S = \frac{1}{3} C \left[p_1 - p_0 + 2 (p_2 - p_0) + p_3 - p_1 + \dots + \right.$$
$$\left. + 2 (p_n - p_{n-2}) + p_n - p_{n-1} \right] = C (p_n - p_0),$$

was mit dem Integral $I = \int_{p_0}^{p_n} C dp$ genau übereinstimmt. Dieses Ergebnis läßt sich auch so formulieren, daß die Summe der den Ordinaten f_i zugehörigen Gewichte $\frac{1}{3} s_i \Delta p_i$ dem Grundintervall gleich ist.

Diese letzte Tatsache bestätigt die obige Definition von Δp_i.

Eine strenge *Fehlerabschätzung* genügt für $k = 1$, weil der Fehler für $k > 1$ aus den Fehlern der einzelnen Teilintervallenpaare zusammengesetzt ist.

Bekanntlich gibt die Formel

$$I - S = H = - \frac{h^5}{90} y^{(4)} (\xi)$$

den Fehler der Simpsonschen Regel an; ξ ist hierbei ein geeignet gewählter Wert zwischen x_0 und $x_0 + 2h = x_2$.

In diesem Falle ist $y = f \frac{dp}{dx}$, und wenn f', f'', f''' und $f^{(4)}$ die Ableitungen von f nach p bzw. p', p'', p''' und $p^{(4)}$ die Ableitungen von p nach x bezeichnen, dann ist

$$H = - \frac{h^5}{90} \{ f^{(4)} p'^5 + 10 f''' p'^3 p'' + 10 f'' p'^2 p''' + 15 f'' p' p''^2 +$$
$$+ 10 f' p'' p''' + 5 f' p' p^{(4)} \},$$

denn $\frac{d^5 p}{dx^5} \equiv 0$. Wie man sieht, bleibt bei gleichen Teilintervallen nur das erste Glied übrig, bei $f =$ konstant ist dagegen $H = 0$. Im allgemeinen erhält man eine obere Schranke für $|H|$, wenn man die Maxima der Absolutwerte der sechs eingeklammerten Glieder summiert. Dazu muß man die Ableitungen von f nach p, oder mindestens die oberen Schranken ihrer Absolutwerte kennen. Für die Ableitungen von $p(x)$ läßt sich aus den Formeln

$$p' = \frac{\Delta p_1}{h} + \frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{h^2} (x - x_1) \left[\frac{3}{2} - \frac{(x - x_1)^2}{h^2} \right];$$

$$p'' = 3 \frac{\Delta p^2 - \Delta p_0}{h^2} \left[\frac{1}{2} - \frac{(x - x_1)^2}{h^2} \right],$$

$$p''' = - 6 \frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{h^4} (x - x_1); \quad p^{(4)} = - 6 \frac{\Delta p_2 - \Delta p_0}{h^4}$$

unschwer bestimmen, daß

$$|p'| \leqq \frac{\Delta p_1 + 0{,}5\,|\Delta p_2 - \Delta p_0|\sqrt{2}}{h}\,;\quad |p''| \leqq \frac{3}{2}\,\frac{|\Delta p_2 - \Delta p_0|}{h^2}\,;$$

$$|p'''| \leqq 6\,\frac{|\Delta p_2 - \Delta p_0|}{h^3}\,;\quad |p^{(4)}| = 6\,\frac{|\Delta p_2 - \Delta p_0|}{h^4}\,.$$

Da h^5 in den Nennern der einzelnen Glieder vorkommt, erscheint h in der oberen Schranke von $|H|$ nicht mehr. Wie man sieht, läßt sich mit der Verminderung der Differenz zweiten Grades $|\Delta p_2 - \Delta p_0|$ im Verhältnis zu Δp_1 auch die Fehlerschranke vermindern.

Wird die Zahl k bei gegebenem Grundintervall $p_n - p_0$ hinreichend groß und das größte Teilintervall hinreichend klein, dann folgt aus der Beschränktheit der Ableitungen von f, daß die Fehlerschranke beliebig klein werden kann.

Sind in der Praxis die Ableitungen von f unbekannt oder verursacht ihre Berechnung zu große Schwierigkeiten, dann bewährt sich bei hinreichend großem k einere andere, weniger strenge Fehlerabschätzung. Der Fehler der ursprünglichen Simpsonschen Regel läßt sich im Absolutwert mit der folgenden Formel annähern, wenn man die Ableitung durch den Differenzenquotienten ersetzt:

$$E = \frac{kh}{90}\cdot \max|\Delta^4 y_i| = \frac{kh}{90}\max|y_{i+4} + y_i - 4\,(y_{i+3} + y_{i+1}) + 6y_{i+2}|,$$

$$i = 0, 1, 2, \ldots 2k-4.$$

Aus dieser Formel wird in unserem allgemeinen Fall

$$E = \frac{kh}{90}\cdot \max|\Delta^4 (f_i\,\Delta f_i)| =$$

$$= \frac{k}{90}\max|f_{i+4}\Delta p_{i+4} + f_i\Delta p_i - 4\,(f_{i+3}\Delta p_{i+3} + f_{i+1}\Delta p_{i+1}) + 6f_{i+2}\Delta p_{i+2}|.$$

Die Anwendung der letztgenannten Formel erhellt aus folgendem einfachem Beispiel, wobei auch I exakt berechnet werden kann. Es sei

$$f = \frac{1}{p},\quad p_0 = 0,2;\quad p_n = 2;\quad I = \int_{0,2}^{2}\frac{dp}{p} = \ln 10 = 2{,}30259\ldots \qquad n = 8$$

$k = 4$

p_i	Δp_i	f_i	$f_i \Delta p$	$s_i f_i \Delta p_i$	$\Delta^4 (f_i \Delta p_i)$
0,2	0,2	5,0	1,000	1,000	
0,4	0,15	2,5	0,375	1,500	
0,5	0,1125	2,0	0,225	0,450	+0,124375
0,625	0,15	1,6	0,240	0,960	+0,2025 max.
0,8	0,1875	1,25	0,234375	0,46875	+0,01125
1,—	0,225	1,0	0,225	0,900	−0,073125
1,25	0,3	0,8	0,240	0,480	+0,036875
1,6	0,375	0,625	0,234375	0,93750	
2,—	0,4	0,5	0,200	0,200	
				6,89625 : 3	

$T = 2{,}37375 \qquad S = 2{,}29875$

Der wirkliche Fehler ist $H = 0{,}00374$ (ca. $1{,}6^0/_{00}$).
Mit der letzteren Fehlerabschätzung wird $E = 0{,}009$.

Es ist zu bemerken, daß E im allgemeinen nicht immer größer ist als $|H|$. Jedenfalls läßt sich behaupten, daß auf Grund der vorausgesetzten Stetigkeit von f bei hinreichend großem k und hinreichend kleinem maximalen Δp_i, $|H|$ mit E beliebig klein werden kann.

Zusammenfassung

Die bekannte Trapezformel gibt bereits eine Annäherungsmethode für ein bestimmtes Integral im Falle ungleicher Teilintervalle. Eine genauere Annäherung ermöglicht die Verallgemeinerung der Simpsonschen Regel für diesen Fall. Es werden zwei Fehlerabschätzungen angegeben, auch wird ein einfaches Beispiel gezeigt.

Literatur

1. Bjesikovitsch, J. S.: Közelítő számítások. Tankönyvkiadó, Bp. 1952. S. 222.
2. Kopal, Z.: Numerical Analysis. Chapman and Hall. London. 1955. S. 345.
3. Scarborough, J. A.: Numerical Mathematical Analysis. Oxford University Press. London. 1955. S. 131.

Zs. Csoma, Budapest XI. Budafoki út 8, Ungarn.