Formeln

Integration und Differentiation

■ Einfache Quadraturverfahren

■ Mittelpunktsregel

Unterteilung in $2\,n$ Streifen der Breite h: $h = (b-a)/(2\,n)$
Stützwerte $f(x_k)$ an den Stützstellen x_k: $x_k = a + k\,h,\ k = 1, 3, \ldots, 2\,n-1$

Fläche:

$$A = 2\,h[f(x_1) + f(x_3) + \ldots + f(x_{2\,n-1})] + \frac{(b-a)\,h^2}{6}\ f''(\mu)\ ,\quad \mu \in (a, b)$$

■ Trapezregel

Unterteilung in n Streifen der Breite h: $h = (b-a)/n$
Stützwerte $f(x_k)$ an den Stützstellen x_k: $x_k = a + k\,h,\ k = 1, 2, \ldots, n-1$

Fläche:

$$A = h\left[\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_{n-1})\right] - \frac{(b-a)\,h^2}{12}\ f''(\mu)\ ,\quad \mu \in (a, b)$$

■ Simpsonsche Regel

Unterteilung in $2\,n$ Streifen der Breite h: $h = (b-a)/(2\,n)$
Stützwerte $f(x_k)$ an den Stützstellen x_k: $x_k = a + k\,h,\ k = 1, 3, \ldots, 2\,n-1$

Fläche:

$$A = \frac{h}{3}[f(a) + f(b)\ + 4\,\{f(x_1) + f(x_3) + \ldots + f(x_{2\,n-1})\} + 2\,\{f(x_2) + f(x_4) + \ldots + f(x_{2\,n-2})\}] -$$
$$- \frac{(b-a)\,h^4}{180}\ f^{(4)}(\mu)\ ,\quad \mu \in (a, b)$$

■ Gauss'sche Quadratur

n	Ordnung der Näherung durch Legendre-Polynome
$r_{n,i}$	i-te Nullstelle des Legendre-Polynoms der Ordnung n
$c_{n,i}$	i-ter Koeffizient für Näherung an i-ter Nullstelle mit Legendre-Polynom der Ordnung n

Werte für $r_{n,i}$ und $c_{n,i}$ mit $n = 2. .5$ sind tabelliert in Faires/Burden.

Gauss'sche Quadratur: $A = \int_a^b f(x)\,\mathrm{dx} = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} c_{n,i}\, f\left(\frac{(b-a)\, r_{n,i}+a+b}{2}\right)$

■ Romberg-Integration

Die Romberg-Integration benutzt das zusammengesetzte Trapezverfahren, um einleitende Approximationen zu erhalten. Danach wird die Konvergenz mit der sog. Richardson-Extrapolation beschleunigt; sie ist ein Mittelwert.

Um $\int_a^b f(x)\,\mathrm{dx}$ zu approximieren werden Näherungswerte $R_{k,j}$ gemäss folgenden Regeln berechnet:

Schrittweite	$h_k = (b-a)/2^{k-1}$, $k = 0, 1, \ldots, n$
Trapeznäherung	$R_{1,1} = (f(a) + f(b))\,(b-a)/2$
	$R_{k,1} = \frac{1}{2}\left\{R_{k-1,1} + h_{k-1} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f(a + (2\,i-1)\,h_k)\right\}$, $k = 2, 3, \ldots, n$
Beschleunigung	$R_{k,j} = R_{k,j-1} + (R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1})/(4^{j-1}-1)$, $k = 2, 3, \ldots, n$, $j = 2, 3, \ldots, n$

■ Uneigentliche Integrale

Uneigentliche Integrale sind gegeben
- durch Singularitäten des Integranden an einer (oder mehreren) endlichen Stellen
- durch unendliche Integrationsgrenzen

■ Singularität an endlichen Punkten

Betrachte zuerst das Integral $\int_a^b \frac{\mathrm{dx}}{(x-a)^p}$ mit einer *Singularität am linken Endpunkt*. Es konvergiert genau dann, wenn gilt $p < 1$.

Sei $f(x) = \frac{g(x)}{(x-a)^p}$, wobei $0 < p < 1$ und $g(x)$ stetig. Dann konvergiert das uneigentliche Integral $\int_a^b f(x)\,\mathrm{dx}$. Es kann folgendermassen berechnet werden:

Schritt 1 Erzeuge das vierte Taylorsche Polynom $P_4(x)$ von $g(x)$ an der Stelle a :

$$P_4(x) = g(a) + g'(a)\,(x-a) + \frac{g''(a)}{2!}\,(x-a)^2 + \frac{g^{(3)}(a)}{3!}\,(x-a)^3 + \frac{g^{(4)}(a)}{4!}\,(x-a)^4$$

Nun gilt: $$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} = \int_a^b \frac{g(x)-P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} + \int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx}.$$

$\int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx}$ kann exakt berechnet werden: $\int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} = \sum_{k=0}^{4} \frac{g^{(k)}(a)}{k!\,(k+1-p)}\,(b-a)^{k+1-p}$

Schritt 2 Der erste Term kann näherungsweise (z.B. Simpson) berechnet werden:

$$\int_a^b \frac{g(x)-P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} = \int_a^b G(x)\,\mathrm{dx} \;\text{ mit }\; G(x) = \begin{cases} \frac{g(x)-P_4(x)}{(x-a)^p} & \text{für } a < x <= b \\ 0 & \text{für } x = a \end{cases}$$

Somit: $$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} = \int_a^b \frac{g(x)-P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx} + \int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p}\,\mathrm{dx}$$

Liegt die *Singularität am rechten Endpunkt*, so gilt mit der Substitution

$$z = -x,\ \mathrm{dx} = -\mathrm{dz}\ \Rightarrow\ \int_a^b f(x)\,\mathrm{dx} = \int_{-b}^{-a} f(-z)\,\mathrm{dz}$$

Damit kann das Integral in ein Integral mit Singularität am linken Endpunkt überführt werden.

Liegen *Singularitäten im Innern des Integrationsintervall* vor, z.B. am Ort c, wobei $a < c < b$, so gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{dx} = \int_a^c f(x)\,\mathrm{dx} + \int_c^b f(x)\,\mathrm{dx}$$

■ Unendliche Integrationsgrenzen

Betrachte $\displaystyle\int_a^\infty \frac{1}{x^p}\,\mathrm{dx}$, $p > 1$ als Grundintegral mit unendlicher oberer Grenze, das konvergiert.
Mit der Substitution $t = x^{-1}$, $\mathrm{dt} = -x^{-2}\,\mathrm{dx}$, $\mathrm{dx} = -x^2\,\mathrm{dt} = -t^{-2}\,\mathrm{dt}$ folgt:

$$\int_a^\infty \frac{1}{x^p}\,\mathrm{dx} = -\int_{t(a)}^{t(\infty)} t^{p-2}\,\mathrm{dt} = \int_{1/\infty=0}^{1/a} \frac{1}{t^{2-p}}\,\mathrm{dt}.$$

Damit ist das Integral mit unendlicher oberer Integrationsgrenze in ein Integral mit Singularität am linken Endpunkt überführt worden. Es gilt allgemein:

$$\int_a^\infty f(x)\,\mathrm{dx} = \int_0^{1/a} \frac{1}{t^2}\, f\left(\frac{1}{t}\right)\mathrm{dt}$$

Anfangswertprobleme

■ Taylor'sche Methoden

■ Eulersches Verfahren

Betrachte das AWP $y'(t) = f(t, y)$, $a \le t \le b$, $y(a) = \alpha$. Die Approximation soll über ein Gitter mit n Punkten und einer Schrittweite $h = (b-a)/n$ bestimmt werden: $t_i = a + i\,h$, $i = 0, 1, \ldots, n$.

Angenommen, die Lösung $y(t)$ besitze zwei stetige Ableitungen auf $[a, b]$. Dann kann $y(t)$ nach dem Taylor'schen Satz in jedem Gitterpunkt t_i entwickelt werden (Taylor-Polynom der Ordnung 2):

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + (t_{i+1} - t_i)\, y'(t_i) + \frac{(t_{i+1}-t_i)^2}{2}\, y''(\xi_i),\ \xi_i \in (t_i, t_{i+1})$$

Mit $h = t_{i+1} - t_i$ und $y'(t) = f(t, y)$ folgt:

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\, y'(t_i) + \frac{h^2}{2}\, y''(\xi_i) = y(t_i) + h\, f(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2}\, y''(\xi_i)$$

Das *Eulersche Verfahren* konstruiert eine Approximation w_i von $y(t_i)$ unter Vernachlässigung des Fehlerterms in obiger Taylor-Entwicklung. Die DGL wird durch eine sog. *Differenzengleichung* approximiert:

AWP	$y'(t) = f(t, y)$, $a \le t \le b$, $y(a) = \alpha$
Gitter	Anzahl Gitterpunkte $= n$, Schrittweite $h = (b-a)/n$, $t_i = a + i\,h$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$
Approx.	w_i: Approximation von $y(t)$ am Ort t_i, also $w_i \approx y(t_i)$
Iteration	$w_0 = \alpha$, $w_{i+1} = w_i + h \cdot f(t_i, w_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$

■ Verfahren höherer Ordnung

Ordnung $k = 1$: Euler-Verfahren

Ordnung $k > 1$: $w_0 = \alpha\,,\ w_{i+1} = w_i + h\,T^{(k)}\,(t_i, w_i)\,,$ wobei

$$T^{(k)}\,(t_i, w_i) = f(t_i, w_i) + \frac{h}{2}\ f'(t_i, w_i) + \ldots + \frac{h^{k-1}}{k!}\ f^{(k-1)}(t_i, w_i)$$

■ Runge-Kutta-Verfahren

■ Verfahren 2. Ordnung

Für alle Verfahren gilt:

AWP $y'(t) = f(t, y)\,,\ a \le t \le b\,,\ y(a) = \alpha$

Gitter Anzahl Gitterpunkte $= n$, Schrittweite $h = (b - a)/n$, $t_i = a + i\,h \quad (i = 0, 1, \ldots, n)$

Lok. Fehler $O(h^3)$ in allen drei Verfahren

Mittelpunktsmethode

$$w_0 = \alpha\ ,\ i = 0, 1, \ldots, n-1$$
$$w_{i+1} = w_i + h\,f[t_i + \tfrac{h}{2}, w_i + \tfrac{h}{2}\,f(t_i, w_i)]$$

Mod. Euler-Verfahren

$$w_0 = \alpha\ ,\ i = 0, 1, \ldots, n-1$$
$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{2}\,\{f(t_i, w_i) + f[t_{i+1}, w_i + h\,f(t_i, w_i)]\}$$

Heunsches Verfahren

$$w_0 = \alpha\ ,\ i = 0, 1, \ldots, n-1$$
$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{4}\,\{f(t_i, w_i) + 3\,f[t_{i+1} + \tfrac{2}{3}\,h, w_i + \tfrac{2}{3}\,h\,f(t_i, w_i)]\}$$

■ Verfahren 4. Ordnung

Dies ist das in der Praxis wichtigste Runge-Kutte-Verfahren. Es hat einen lokalen Fehler von $O(h^5)$ und ist das bisher genauste bzw. effizienteste Verfahren.

Runge-Kutta 4. Ordnung

$$w_0 = \alpha\ ,\ i = 0, 1, \ldots, n-1$$
$$k_1 = h\,f(t_i\,w_i)$$
$$k_2 = h\,f(t_i + \tfrac{h}{2}, w_i + \tfrac{1}{2}\,k_1)$$
$$k_3 = h\,f(t_i + \tfrac{h}{2}, w_i + \tfrac{1}{2}\,k_2)$$
$$k_4 = h\,f(t_{i+1}, w_i + k_3)$$
$$w_{i+1} = w_i + \frac{1}{6}\,(k_1 + 2\,k_2 + 2\,k_3 + k_4)$$

■ Systeme von Differentialgleichungen

■ System von Differentialgleichungen

System m-ter Ordnung für unbekannte Funktionen $u_1(x), u_2(x), \ldots, u_m(x)$, jeweils AWP erster Ordnung:

$$u_1' = f_1(t, u_1, u_2, ..., u_m) \qquad a \le t \le b$$
$$u_2' = f_2(t, u_1, u_2, ..., u_m) \qquad u_1(a) = \alpha_1,\ u_2(a) = \alpha_2,\ ...,\ u_m(a) = \alpha_m$$
$$...$$
$$u_m' = f_m(t, u_1, u_2, ..., u_m)$$

Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung für dieses System (andere Verfahren sind möglich):

$$h = (b - a)/n \qquad t_j = a + j \cdot h\ ,\ \ j = 0,\ 1,\ ...,\ n$$

Da nun m Gleichungen und nicht nur eine Gleichung zu lösen sind, sei $w_{i,j}$ die Approximation der i-ten Gleichung (der unbekannten Funktion u_i) zu j-ten Zeitpunkt (also $u_i(t_j)$):

$$w_{1,0} = \alpha_1\ ,\ \ w_{2,0} = \alpha_2\ ,\ \ ...\ ,\ \ w_{m,0} = \alpha_m$$

Nun folgt für die 4 k-Werte des Runge-Kutta-Verfahrens 4. Ordnung:

$$k_{1,i} = h\ f_i(t_j,\ w_{1,j},\ w_{2,j},\ ...,\ w_{m,j})$$
$$k_{2,i} = h\ f_i\left(t_j + \frac{h}{2},\ w_{1,j} + \frac{1}{2}\ k_{1,1},\ w_{2,j} + \frac{1}{2}\ k_{1,2},\ \ ...\ ,\ w_{m,j} + \frac{1}{2}\ k_{1,m}\right)$$
$$k_{3,i} = h\ f_i\left(t_j + \frac{h}{2},\ w_{1,j} + \frac{1}{2}\ k_{2,1},\ w_{2,j} + \frac{1}{2}\ k_{2,2},\ \ ...\ ,\ w_{m,j} + \frac{1}{2}\ k_{2,m}\right)$$
$$k_{4,i} = h\ f_i(t_j + h,\ w_{1,j} + k_{3,1},\ w_{2,j} + k_{3,2},\ \ ...\ ,\ w_{m,j} + k_{3,m})$$

Die nächste Approximation $w_{i,j+1}$ wird schliesslich:

$$w_{i,j+1} = w_{i,j} + \frac{1}{6}\ (k_{1,i} + 2\ k_{2,i} + 2\ k_{3,i} + k_{4,i})$$

■ Differentialgleichungen höherer Ordnung

Ein allgemeines AWP m-ter Ordnung hat die Form

$$y^{(m)}(t) = f(t,\ y,\ y',\ y'',\ ...,\ y^{(m-1)})\ \ ,\ \ a \le t \le b\ \ ,\ \ y(a) = \alpha_1,\ y'(a) = \alpha_2,\ ...,\ y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$$

Mit folgendem Ansatz kann dieses AWP m-ter Ordnung leicht in ein *System* m-ter Ordnung mit AWP's erster Ordnung umgeschrieben werden:

$$u_1(t) = y(t)\ ,\ \ u_2(t) = y'(t),\ \ u_3(t) = y''(t),\ \ ...,\ \ u_m(t) = y^{(m-1)}(t)\ \text{, also}$$
$$u_1'\ (= y') = u_2\ ,\ \ u_2'(\ = y'') = u_3\ ,\ \ ...,\ \ u_{m-1}'(\ = y^{(m-1)}) = u_m\ \text{, und schliesslich}$$
$$u_m'(\ = y^{(m)}) = f(t,\ y,\ y',\ y'',\ ...,\ y^{(m-1)}) = f(t,\ u_1,\ u_2,\ u_3,\ ...,\ u_m)$$

Die Anfangsbedingungen dieses Systems lauten dann:

$$u_1(a) = y(a) = \alpha_1\ ,\ \ u_2(a) = y'(a) = \alpha_2\ ,\ \ ...,\ \ u_m(a) = y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$$