

5. Numerische Quadratur

5.1 Allgemeines

Aufgabe ist die numerische Berechnung eines bestimmten Integrals

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \quad \underline{(5.1)}$$

Üblicherweise werden Näherungen (so gen. Quadraturformeln) folgender Form verwendet:

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n g_{i,n} f(x_{i,n}) \quad \underline{(5.2)}$$

Dabei bezeichnen:

$x_{i,n}, i=0, \dots, n$: Knoten ($x_{i,n} \in [a, b]$)

$g_{i,n}, i=0, \dots, n$: Gewichte

Folgerung:

a) Hierdurch wird die Linearität des Integrals übertragen:

$$I_n(\alpha f + \beta g) = \alpha I_n(f) + \beta I_n(g)$$

b) Fordert man zusätzlich

$$\forall i=0, \dots, n : g_{i,n} \geq 0 \quad (5.3)$$

so überträgt sich auch die Positivität:

$$f \geq 0 \implies I_n(f) \geq 0.$$

Weiter heißt

$$R_n(f) := I_n(f) - I(f) \quad (5.4)$$

der Quadraturfehler oder das Restglied der Quadraturformel $I_n(f)$.

Man sagt: Die Quadraturformel $I_n(f)$ besitzt den Grad m (oder die Ordnung $m+1$), falls sie für Polynome vom Grad $\leq m$ exakt ist:

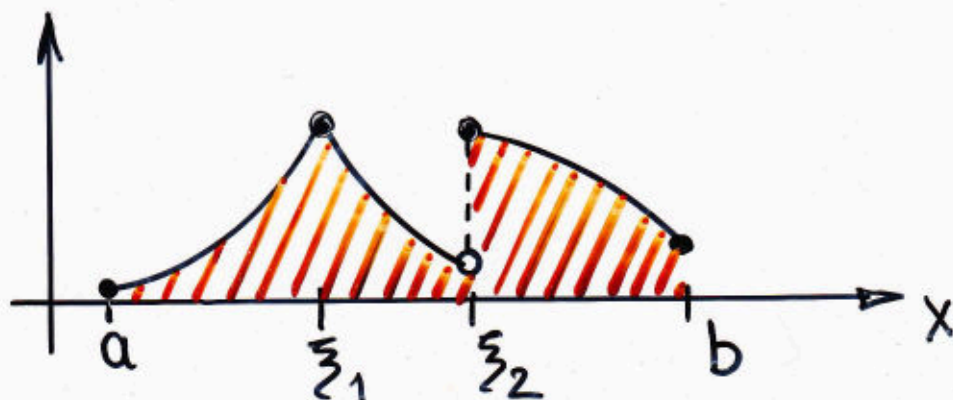
$$\forall p \in \Pi_m : R_n(p) = 0.$$

Die numerischen Verfahren setzen i. Allg. eine hinreichend hohe Differenzierbarkeit (Glattheit) des Integranden f voraus.

Nur dann sind geeignete Fehlerabschätzungen sicher gestellt!

Erfüllt der Integrand diese Voraussetzung nicht, sind geeignete Maßnahmen zu treffen.

Beispiel: Stückweise glatte Integranden



→ Man wende Quadraturformeln auf die Teilintegrale $\int_a^{\xi_1} \dots$, $\int_{\xi_1}^{\xi_2} \dots$, $\int_{\xi_2}^b \dots$ an.

Beispiel: Integrale mit Singularität

(dies schließt auch Singularitäten in den höheren Ableitungen von f ein!)

Mögliche Abhilfen:

- Gauß - Quadratur
- Geeignete Substitutionen
- Reihenentwicklungen
- Subtraktion "einfacher" Singularitäten

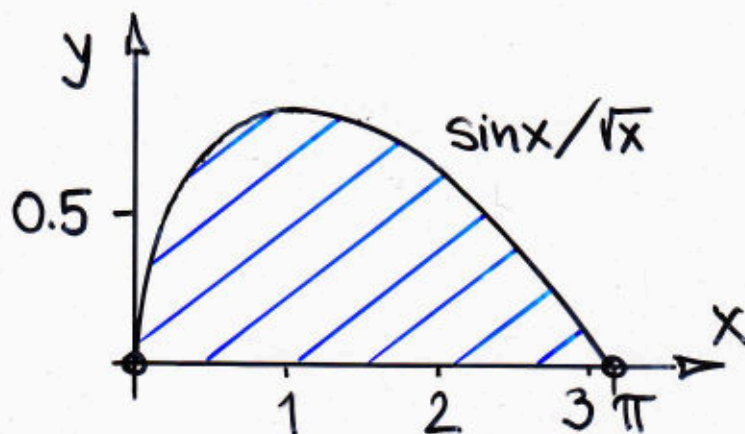
Beispiel (5.5) $\int_0^{\pi} \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx$

Der Integrand $f(x)$ ist stetig (ergänzbar) auf $[0, \pi]$, $f'(x)$ besitzt aber für $x \downarrow 0$ eine Singularität.

Substitution:

$$u := \sqrt{x}$$

$$du = \frac{1}{2u} dx$$



$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_0^{\pi} \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx &= \int_0^{\sqrt{\pi}} \frac{\sin(u^2)}{u} 2u du \\ &= \int_0^{\sqrt{\pi}} 2 \sin(u^2) du \end{aligned}$$

Der Integrand ist hier eine C^{∞} -Funktion, das Integral lässt sich effizient berechnen.

Man erhält: $I \approx 1.789662938968$

Im Folgenden setzen wir – soweit nichts anderes gesagt wird – hinreichende Glattheit von $f(x)$ voraus!

5.2 Newton-Cotes Formeln

Idee: Man ersetze den Integranden $f(x)$ durch ein Interpolationspolynom zu äquidistanten Knoten:

$$x_{i,n} = a + i \cdot h, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad i=0,1,\dots,n \quad \underline{(5.6)}$$

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_{i,n}) \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right)$$

Für das Integral $I(f)$ erhält man die Näherung

$$\begin{aligned} I_n(f) &= \int_a^b P_n(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_{i,n}) \cdot \underbrace{\int_a^b \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) dx}_{=: g_{i,n}} \end{aligned}$$

Um zu Gewichten zu kommen, die vom speziellen Intervall $[a,b]$ unabhängig sind, substituieren wir

$$x = a + u h, \quad 0 \leq u \leq n; \quad dx = h du$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}
 g_{i,n} &= h \int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \left(\frac{u-k}{i-k} \right) du \\
 &= (b-a) \cdot \underbrace{\left\{ \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \left(\frac{u-k}{i-k} \right) du \right\}}_{=: \alpha_{i,n}}
 \end{aligned}$$

Ergebnis:

$$\begin{aligned}
 I_n(f) &= (b-a) \sum_{i=0}^n \alpha_{i,n} f(x_{i,n}) \\
 \alpha_{i,n} &= \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \left(\frac{u-k}{i-k} \right) du
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Beachte: Die Gewichte $\alpha_{i,n}$ hängen nicht mehr vom speziellen Intervall $[a,b]$ ab.

Beispiel: $n=1$

$$\alpha_{0,1} = \int_0^1 \prod_{k=1}^1 \left(\frac{u-k}{0-k} \right) du = \int_0^1 (1-u) du = \frac{1}{2}$$

$$\alpha_{1,1} = \int_0^1 \prod_{k=0}^0 \left(\frac{u-k}{1-k} \right) du = \int_0^1 u du = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow I_1(f) = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) \tag{5.8}$$

(Trapezregel)

Beispiel : $n=2$

$$\alpha_{0,2} = \frac{1}{2} \int_0^2 \prod_{k=1}^2 \left(\frac{u-k}{0-k} \right) du = \frac{1}{4} \int_0^2 (1-u)(2-u) du = \frac{1}{6}$$

$$\alpha_{1,2} = \frac{1}{2} \int_0^2 \prod_{k=0,2}^2 \left(\frac{u-k}{1-k} \right) du = \frac{1}{2} \int_0^2 u(2-u) du = \frac{2}{3}$$

$$\alpha_{2,2} = \frac{1}{2} \int_0^2 \prod_{k=0}^2 \left(\frac{u-k}{2-k} \right) du = \frac{1}{4} \int_0^2 u(1-u) du = \frac{1}{6}$$

⇒

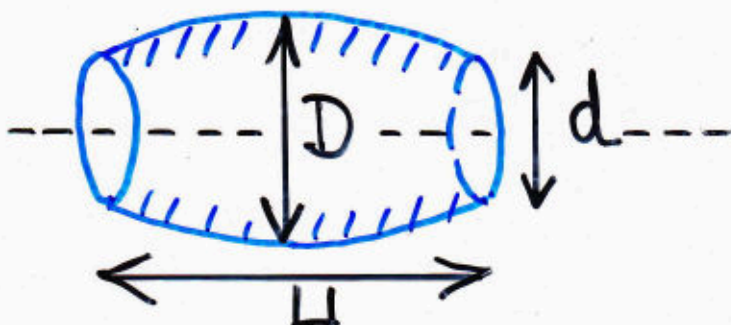
$$I_2(f) = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \quad \underline{\underline{(5.9)}}$$

(Simpson-Regel, Keplersche Fassregel)

$$V = \pi \int_0^H f(x)^2 dx$$

$$\approx \frac{\pi \cdot H}{6} \left[\left(\frac{d}{2}\right)^2 + 4\left(\frac{D}{2}\right)^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2 \right]$$

$$= \underline{\underline{\frac{\pi \cdot H}{12} [d^2 + 2D^2]}}$$



Satz (5.10)

Die Formeln $I_n(f)$ nach Newton-Cotes integrieren Polynome vom Grad $\leq n$ exakt. Für gerade n gilt sogar $I(p) = I_n(p)$ für alle $p \in \Pi_{n+1}$.

Beweis:

Aussage 1: folgt aus der Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms.

Aussage 2: Folgt aus Symmetriegründen.

Dazu kann o.E.d.A. $[a,b] = [-1,1]$ angenommen werden. Dann:

$$p \in \Pi_{n+1} \implies p(x) = q(x) + a x^{2m+1}$$

mit $q \in \Pi_n$, $n = 2m$

$$\begin{aligned} \implies \int_{-1}^1 p(x) dx &= \int_{-1}^1 q(x) dx \\ &= I_n(q) + \underbrace{I_n(a \cdot x^{2m+1})}_0 \\ &= I_n(p) \quad \blacktriangle \end{aligned}$$

Quadraturfehler (5.11)

$$R_n(f) = I_n(f) - \int_a^b f(x) dx ; h = \frac{b-a}{n}$$

$$R_1(f) = \frac{1}{12} \cdot h^3 \cdot f^{(2)}(\xi_1)$$

$$R_2(f) = \frac{1}{90} \cdot h^5 \cdot f^{(4)}(\xi_2)$$

$$R_3(f) = \frac{3}{80} \cdot h^5 \cdot f^{(4)}(\xi_3)$$

$$R_4(f) = \frac{8}{945} \cdot h^7 \cdot f^{(6)}(\xi_4)$$

$$R_5(f) = \frac{275}{12096} \cdot h^7 \cdot f^{(6)}(\xi_5)$$

$$R_6(f) = \frac{9}{1400} \cdot h^9 \cdot f^{(8)}(\xi_6)$$

$$R_7(f) = \frac{8183}{518400} \cdot h^9 \cdot f^{(8)}(\xi_7)$$

Dabei: $a < \xi_k < b$, $k=1, \dots, 7$

Intervallweise Anwendung

Zur Erreichung höherer Genauigkeiten werden die Newton-Cotes Formeln auf Teilintervalle von $[a, b]$ angewendet.

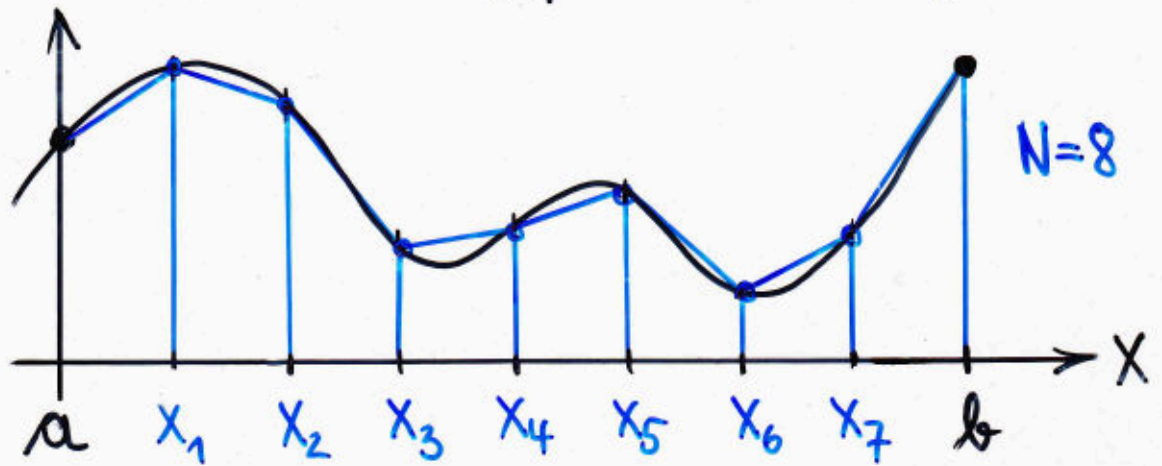
Äquidistante Unterteilung: $(N \in \mathbb{N})$

$$x_i = a + i h, i=0, 1, \dots, N ; h = \frac{b-a}{N}$$

Trapezsumme ($n=1$)

$$T_f(h) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k+1}))$$

$$\Rightarrow T_f(h) = h \left\{ \frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2} \right\} \quad (5.12)$$



Fehlerabschätzung (aus (5.11))

$$\left| T_f(h) - \int_a^b f(x) dx \right| \leq \frac{b-a}{12} \|f^{(2)}\|_{\infty} \cdot h^2 \quad (5.13)$$

wobei $\|\varphi\|_{\infty} := \max_{a \leq x \leq b} |\varphi(x)|$.

- ! Die Trapezsumme konvergiert also wie h^2
- gegen das gesuchte Integral ($N \rightarrow \infty$).

Simpson-Summe ($n=2$)

Es sei $N=2M$ gerade. Wir wenden die S-Regel auf die Teilintervalle $[x_{2k}, x_{2k+2}]$, $k=0, 1, \dots, M-1$ an.

$$\begin{aligned}
 S_f(h) &= \frac{h}{3} \sum_{k=0}^{M-1} (f(x_{2k}) + 4f(x_{2k+1}) + f(x_{2k+2})) \\
 &= \frac{h}{3} [f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + \dots \\
 &\quad + 4f(b-h) + f(b)] \quad (5.14)
 \end{aligned}$$

Fehlerabschätzung (aus (5.11))

$$|S_f(h) - \int_a^b f(x) dx| \leq \frac{b-a}{180} \|f^{(4)}\|_{\infty} h^4 \quad (5.15)$$

Algorithmische Durchführung

(für die Trapezsumme)

Die Fehlerabschätzung (5.13) ist wenig hilfreich, da man i. Allg. über $\|f^{(2)}\|_{\infty}$ nichts weiß.

Statt dessen:

Fortgesetzte Schrittweiten-Halbierung:

$$h_k := h_{k-1}/2, \quad k=1,2,\dots$$

und Abbruch, falls

$$|T(h_k) - T(h_{k-1})| \leq \text{TOL} \cdot |T(h_k)|$$

TOL: relative Genauigkeit

Bei der Berechnung von $T(h_k)$ lässt sich die "alte" Trapezsumme $T(h_{k-1})$ verwenden. Hierdurch werden keine "doppelten" $f(x)$ -Auswertungen benötigt:

$$T(h_k) = \frac{1}{2} T(h_{k-1}) + h_k [f(a+h_k) + f(a+3h_k) + \dots + f(b-h_k)]$$

Algorithmus (5.16)

$$N := 1, \quad h := b - a,$$

$$T_0 := \frac{h}{2} [f(a) + f(b)]$$

für $k = 1, 2, \dots$

$$h := h/2$$

$$S := \sum_{j=1}^N f(a + (2j-1)h)$$

$$N := 2 \cdot N$$

$$T_k := \frac{1}{2} T_{k-1} + h \cdot S$$

Abbruch, falls $|T_k - T_{k-1}| \leq |T_k| \cdot \text{TOL}$

end k.

Bemerkung: In professionellen Programmen wird i. Allg. eine andere Schrittweitenfolge gewählt, bei der die Anzahl der Funktionsauswertungen nicht so schnell anwächst:

Bulirsch-Folge:

$$h_0, \frac{h_0}{2}, \frac{h_0}{3}, \frac{h_0}{4}, \frac{h_0}{6}, \frac{h_0}{8}, \frac{h_0}{12}, \dots$$

Beispiel (5.17)

Berechnung des Integralsinus:

$$\text{Si}(1) := \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

a) mittels Trapezsummen

b) mittels Simpson-Summen.

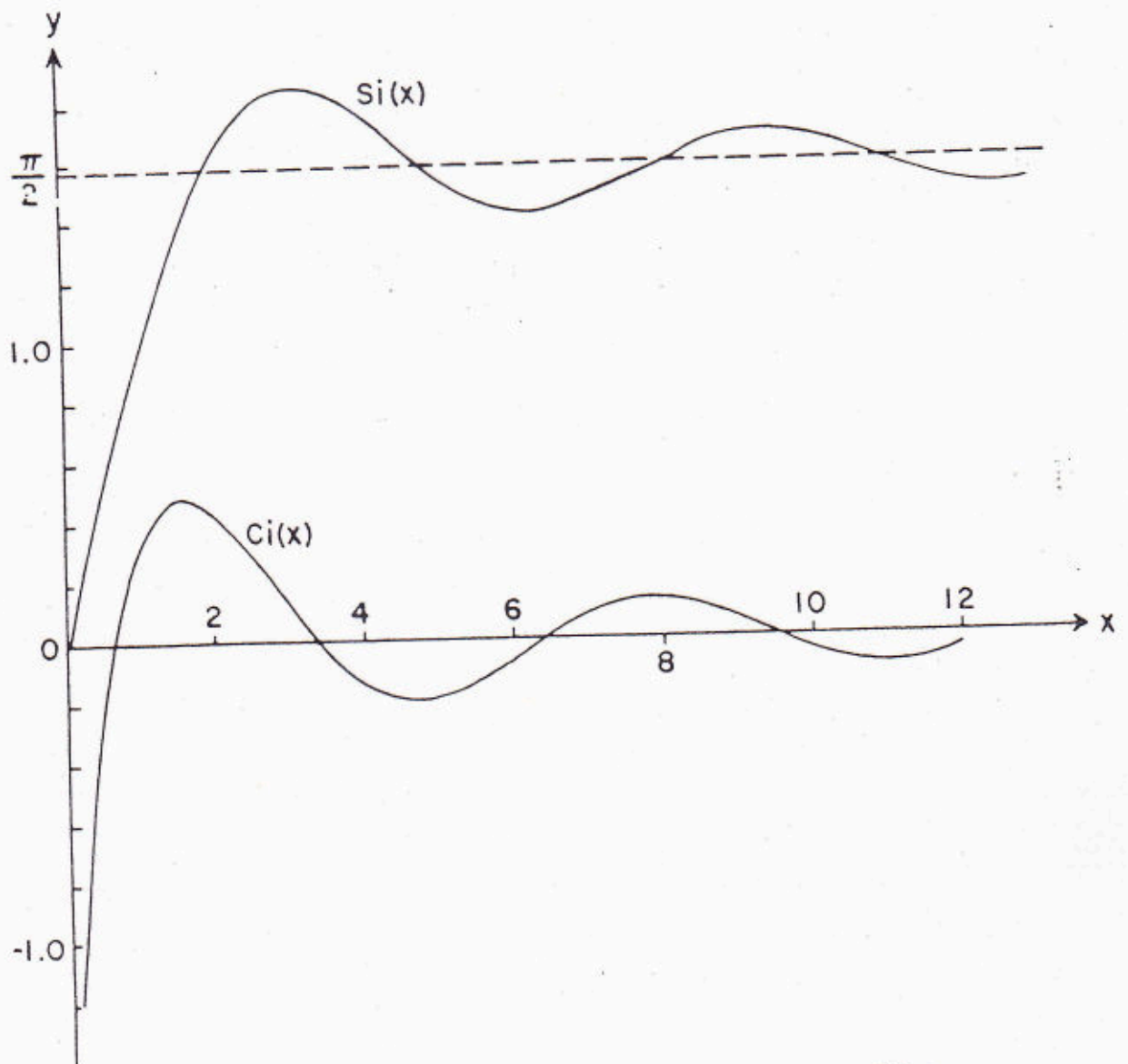


FIGURE 5.6. $y=Si(x)$ and $y=Ci(x)$

Series Expansions

$$Si(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt$$

$$Ci(x) = - \int_x^{\infty} \frac{\cos t}{t} dt = \gamma + \ln x + \int_0^x \frac{\cos t - 1}{t} dt$$

5.3 Extrapolation nach Romberg

Extrapolation ist ein Konvergenzbeschleunigendes Verfahren. Es wird auf Näherungen $T(h)$ (hier die Trapezsumme) angewendet, die

- für $h \downarrow 0$ konvergieren $T(h) \rightarrow I$
- bzgl. h eine asymptotische Entwicklung besitzen:

$$T(h) \sim I + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \tau_3 h^6 + \dots$$

Satz (5.18) Euler, MacLaurinsche Summenformel

Ist $f \in C^{2m+2}[a, b]$, so existieren τ_1, \dots, τ_m (unabhängig von h) mit

$$T(h) = I(f) + \tau_1 h^2 + \dots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2},$$

$|\alpha_{m+1}(h)|$ beschränkt für $h \rightarrow 0$

$$\tau_k = \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a))$$

B_{2k} : Bernoulli-Zahlen

Bem. (5.19) Die Bernoullischen Zahlen

sind definiert durch

$$B_0 := 1, \quad B_{k+1} := -\frac{1}{k+1} \sum_{i=0}^k \binom{k+2}{i} B_i$$

⇒

$$B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_{2k+1} = 0 \quad (k \geq 1),$$

$$B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \quad B_8 = -\frac{1}{30}, \quad B_{10} = \frac{5}{66}$$

- $\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{B_{2k+2}}{B_{2k}} \right| = \infty$
- $\frac{2}{(2\pi)^{2k}} < \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} < \frac{4}{(2\pi)^{2k}}$
- $\frac{x}{e^x - 1} = B_0 + B_1 x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} x^{2k} \quad (|x| < 2\pi)$

Beweis zu (5.18) : → Stoer : Numerik I

Idee:

Lässt man in der Summenformel das Restglied weg, so folgt

$$T(h) \approx I(f) + T_1 h^2 + \dots + T_m h^{2m}$$

D.h. $T(h)$ ist näherungsweise ein **Polynom** in h^2 , dessen Absolutterm wir bestimmen wollen.

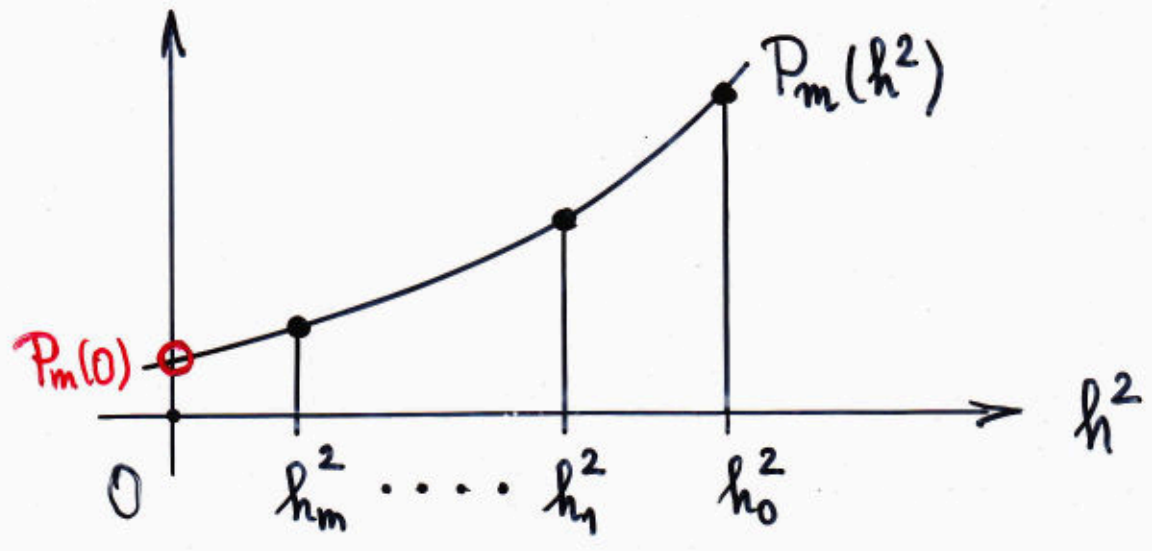
Dies legt das folgende Verfahren nahe:

1.) Man bestimme zu einer Schrittweitenfolge

$$h_0 > h_1 > \dots > h_m$$

jeweils die Trapezsumme $T_f(h_k)$.

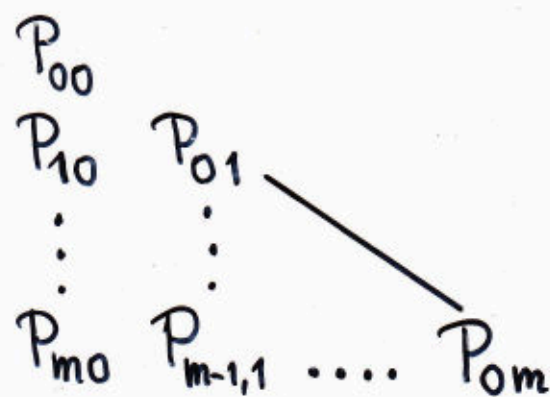
2.) Man bestimme das Interpolationspolynom $P_m(h^2) \in \Pi_m$ in h^2 zu den Stützstellen $(h_k^2, T_f(h_k))$, $k=0,1,\dots,m$ und bestimme $P_m := P_m(0)$ als (bessere) Näherung von $I(f)$.



Zur Berechnung von $P_m(0)$ eignet sich besonders der Algorithmus von Aitken, Neville, vgl. (3.4), (3.5).

Stützstellen: $(h_k^2, T_f(h_k))$, $k=0,1,\dots,m$

Tableau:



Rekursion: (nach (3.4))

$$P_{i0} = T_f(h_i)$$

$$\begin{aligned}
 P_{ik} &= P_{i+1,k-1} + \frac{0 - h_{ik}^2}{h_i^2 - h_{ik}^2} (P_{i,k-1} - P_{i+1,k-1}) \\
 &= P_{i+1,k-1} + \frac{P_{i+1,k-1} - P_{i,k-1}}{\left(\frac{h_i}{h_{ik}}\right)^2 - 1}
 \end{aligned}$$

Wählt man speziell die Halbierungsfolge

$$h_0 = b-a, \quad h_k = h_{k-1}/2 \quad (k \geq 1),$$

so folgt:

$$P_{i0} := T_f(h_i), \quad i=0,1,\dots,m \quad \underline{(5.20)}$$

$$P_{ik} := P_{i+1,k-1} + \frac{P_{i+1,k-1} - P_{i,k-1}}{4^k - 1}$$

$$1 \leq i+k \leq m$$

Bei Speicherung auf einem eindimensionalen Feld:

$$\begin{array}{cccc} & & P_0 & \\ & & P_1 & P_0 \\ & & P_2 & P_1 & P_0 \\ & & \dots & \dots & \dots \end{array}$$

ergibt sich der folgende

Algorithmus (5.21)

$$h := b - a; \quad P_0 := T_f(h)$$

für $i = 1, 2, \dots, m$

$$h := h/2; \quad q := 1;$$

$$P_i := T_f(h)$$

für $k = i-1, i-2, \dots, 0$

$$q := q * 4$$

$$P_k := P_{k+1} + \frac{P_{k+1} - P_k}{q - 1}$$

Bemerkungen:

- a) Bei der Berechnung der Trapezsummen werden die alten Trapezsummen gemäß Alg. (5.16) verwendet.
- b) Häufig wird statt der Halbierungsfolge die **Bulirsch-Folge** verwendet.

c) Unter der Voraussetzung $f \in C^{2m+2}[a,b]$ gilt folgende **asymptotische Fehlerabschätzung**

$$P_{0m} = I(f) + \sigma_{m+1}(h_0) h_0^2 h_1^2 \dots h_m^2$$

mit $|\sigma_{m+1}(h)|$ beschränkt für $h \downarrow 0$.

d) Extrapolation ist ein allgemeines Werkzeug, das vielfach zur Konvergenzbeschleunigung eingesetzt wird; etwa:

- bei der Lösung von AWA bei gewöhnlichen Differentialgleichungen mit der Mittelpunktsregel (Bulirsch-Gragg-Stoer Verfahren)
- bei Charakteristikenverfahren zur Lösung hyperbolischer part. Diffgl.

generelle Vorauss. ist die Existenz einer asymptotischen Entwicklung!

(\rightarrow Stetter: Analysis of Discretization Methods for ordinary Differential Equations, Springer, 1970)

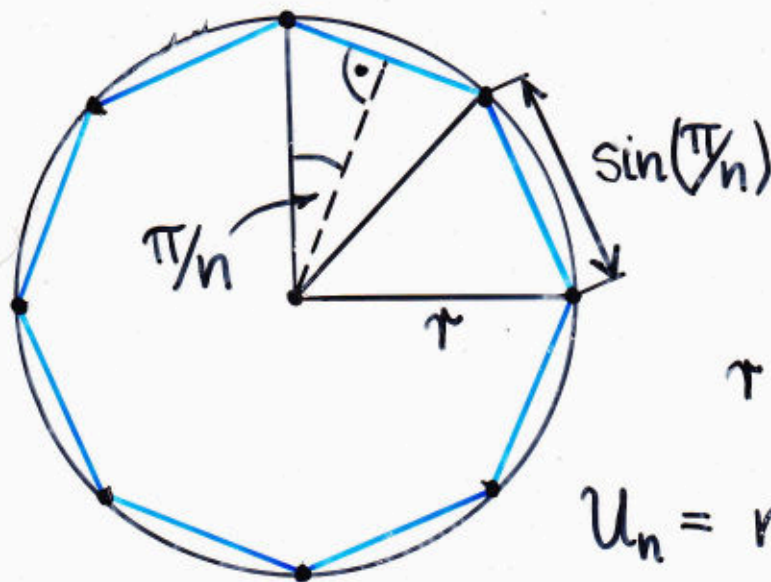
Beispiel (5.22) (Integralsinus)

$$\text{Si}(1) = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

Mit 9 Funktionsauswertungen wird 10-stellige Genauigkeit erreicht!

Vergleiche (5.17)!

Beispiel (5.23) π



$$r = \frac{1}{2}$$

$$U_n = n \cdot \sin\left(\frac{\pi}{n}\right)$$

Die Berechnung der U_n erfolgt rekursiv:

$$U_4 = 2\sqrt{2}, \quad C_4 := 1/\sqrt{2}$$

$$C_{2n} = \sqrt{\frac{1}{2}(1+C_n)}$$

$$U_{2n} = U_n / C_{2n}$$

Die Taylor-Entwicklung von $\sin x$ zeigt:

$$U_n = \pi - \frac{\pi^3}{3!} \left(\frac{1}{n}\right)^2 + \frac{\pi^5}{5!} \left(\frac{1}{n}\right)^4 - + \dots$$

$\Rightarrow U_n$ besitzt eine asymptot. Entwicklung in h^2 , mit $h = 1/n$.

Man kann daher das Extrapolationsverfahren auf die U_n anwenden:

n	U_n	E_n
4	2.8284 27125	2.8284 27125
8	3.0614 67459	3.1392 47570
16	3.1214 45152	3.1415 90393
32	3.1365 48491	3.1415 92653
64	3.1403 31157	3.1415 92654

TRAPEZSUMMEN - INTEGRALSINUS :

I	T(I)	NFC
0	.92073 54924 D+00	2
1	.93979 32848 D+00	3
2	.94451 35217 D+00	5
3	.94569 08636 D+00	9
4	.94598 50299 D+00	17
5	.94605 85610 D+00	33
6	.94607 96431 D+00	65
7	.94608 15385 D+00	129
8	.94608 26874 D+00	257
9	.94608 29746 D+00	513
10	.94608 30464 D+00	1025
11	.94608 30644 D+00	2049
12	.94608 30689 D+00	4097
13	.94608 30700 D+00	8193
14	.94608 30703 D+00	16385
15	.94608 30703 D+00	32769

SIMPSON-SUMMEN - INTEGRALSINUS :

I	T(I)	NFC
0	.94614 58823 D+00	3
1	.94608 69340 D+00	5
2	.94608 33109 D+00	9
3	.94608 30854 D+00	17
4	.94608 30713 D+00	33
5	.94608 30704 D+00	65
6	.94608 30704 D+00	129

~~ECN~~ bezeichne dabei jeweils die Anzahl der Auswertungen des Integranden.

NFC

Beispiel (15.2.5)

Für das in (15.1.4) und (15.1.13) bereits behandelte Beispiel der Berechnung von $Si(1)$ liefert das Extrapolationsverfahren die folgende Tabelle $(T(I) : \text{Trapezsumme}, E(I) : \text{extrapolierender Wert})$:

TRAPEZSUMMEN-EXTRAPOLATION - INTEGRALSINUS :

I	T(I)	E(I)	NFC
0	.92073 54924 D+00	.92073 54924 D+00	2
1	.93979 32848 D+00	.94614 58823 D+00	3
2	.94451 35217 D+00	.94608 30041 D+00	5
3	.94569 08636 D+00	.94608 30704 D+00	9
4	.94598 50299 D+00	.94608 30704 D+00	17

5.4 Adaptives Simpson-Verfahren

Adaptive Quadraturverfahren arbeiten mit einem variablen, an das Verhalten des Integranden angepasstem Gitter.

Prinzip:

- ① Schätzen des lokalen Diskretisierungsfehlers $\tau(h)$.
- ② Anpassung der Schrittweite h über die Verfahrensordnung: $\tau(h) \approx Ch^p$

Wir beschreiben das Prinzip am Beispiel des **adaptiven Simpson-Verfahrens**:

Es gelte: $x_i = x_0 + i \frac{h}{4}$, $i = 0, 1, \dots, 4$
 also: $h = x_4 - x_0$

Einfache Simpson-Regel:

$$S_1(h) := \frac{h}{6} [f(x_0) + 4f(x_2) + f(x_4)]$$

Simpson-Summe:

$$S_2(h) := \frac{h}{12} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)]$$

Bei festem x_0 gibt nun in Abhängigkeit von h die folgende Fehlerdarstellung

$$S_1(h) = \int_{x_0}^{x_4} f(x) dx + C h^5 + O(h^6)$$

$$S_2(h) = \int_{x_0}^{x_4} f(x) dx + 2C \left(\frac{h}{2}\right)^5 + O(h^6)$$

Aus diesen Gleichungen wird C eliminiert:

$$16S_2(h) - S_1(h) = 15 \int_{x_0}^{x_4} f(x) dx + O(h^6)$$

⇒ Der extrapolierte Wert:

$$S_3(h) := \frac{16S_2 - S_1}{15} = S_2 + \frac{S_2 - S_1}{15}$$

besitzt eine Genauigkeit von $O(h^6)$!

$$\Rightarrow \boxed{\tau(h) := \frac{S_2(h) - S_1(h)}{15}} \quad (5.24)$$

beschreibt (in erster Näherung) den lokalen (absoluten) Fehler von $S_2(h)$.

Es bezeichne nun

TOL: Vorgegebene Schranke für den Fehler pro Schrittweite

Zur Schrittweitensteuerung verwendet man den Test:

$$|\tau(h)| \leq h \cdot \text{TOL} \quad (5.25)$$

- Ist (5.25) erfüllt, so wird $S_3(h)$ als Näherung für $\int_{x_0}^{x_4} f(x) dx$ akzeptiert
- Andernfalls wird h halbiert.

Algorithmus (5.26)

Start: $x_0 := a, x_2 := (a+b)/2, x_4 := b$

$f_i := f(x_i), i=0,2,4$

$m = I = \text{Err} := 0$

Test: $x_1 := (x_0 + x_2)/2, x_3 := (x_2 + x_4)/2,$

$f_i := f(x_i), i=1,3, h := x_4 - x_0$

$S_1 := h \cdot (f_0 + 4f_2 + f_4)/6$

$S_2 := h \cdot (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4)/12$

Falls $|S_1 - S_2| > 15 \cdot h \cdot \text{TOL}$

$m := m+1, k_1(m) := x_3, k_2(m) := x_4,$

$k_3(m) := f_3, k_4(m) := f_4$

$x_4 := x_2, x_2 := x_1, f_4 := f_2, f_2 := f_1$

Gehe zu Test.

Sonst $I := I + S_2 + \frac{1}{15}(S_2 - S_1)$

$$\text{Err} := \text{Err} + \frac{1}{15}|S_2 - S_1|$$

Falls ($m=0$) : Stop!

$$X_0 := X_4, \quad X_2 := k_1(m), \quad X_4 := k_2(m)$$

$$f_0 := f_4, \quad f_2 := k_3(m), \quad f_4 := k_4(m)$$

$$m := m - 1,$$

Gehe zu Test.

Beispiel (5.27) "Nadelimpuls"

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{10^{-4} + x^2} dx$$

Bei vorgegebener Genauigkeitsanforderung von $\text{TOL} = 10^{-2}$ erhält man

$$I \approx 312.1610458$$

$$\text{Err} \approx 0.433 \cdot 10^{-2}$$

121 Teilpunkte

$$\Rightarrow \epsilon_{\text{rel}} = 5.5 \cdot 10^{-6}$$

Zum Vergleich:

$$\text{TOL} = 10^{-7} : I \approx 312.1593320, \quad \text{Err} \approx 0.69 \cdot 10^{-7}$$

2041 Teilpunkte

"Nadelimpuls"

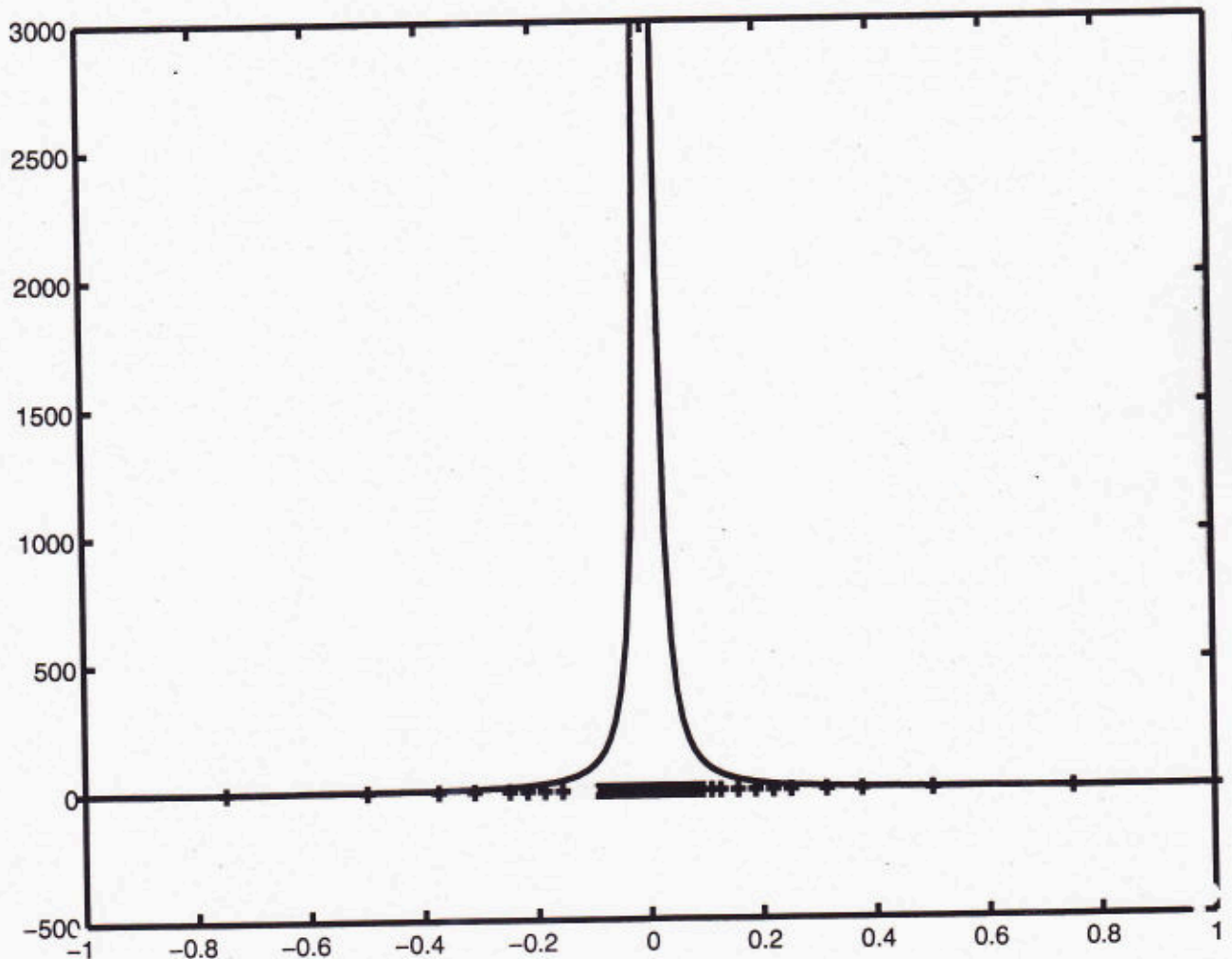
$$\int_{-1}^1 \frac{1}{10^{-4} + x^2} dx$$

Lösung mittels adaptivem Simpson-Verfahren.

Ergebnis: 312.15 93495

rel. Genauigkeit: $\varepsilon \approx 5.6 \cdot 10^{-8}$

NFC: 361



5.5 Gauß-Quadratur

Idee: Man versucht, Knoten $x_{i,n}$ und Gewichte $g_{i,n}$ einer Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n g_{i,n} f(x_{i,n}) \quad (5.28)$$

so zu optimieren, dass I_n Polynome von möglichst hohem Grad N exakt integriert, genauer:

$$\forall P \in \Pi_N : I_n(P) = I(P)$$

Wir erwarten (Zahl der Unbekannten = Zahl der Gleichungen): $N = 2n + 1$.

Es stellt sich heraus, dass man mit dieser Methode auch gewichtete Integrale

$$I(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx \quad (5.29)$$

berechnen kann.

$w:]a, b[\rightarrow \mathbb{R}$ Gewichtsfunktion

mit den Eigenschaften:

- w stetig und positiv auf $]a, b[$
- $\int_a^b w(x) p(x) dx$ existiert für alle Polynome.

Bemerkung:

Im Prinzip muss man nur die Knoten $x_{i,n}$ bestimmen, die Gewichte $g_{i,n}$ kann man dann mit Hilfe der Lagrange-Polynome $L_j(x) \in \Pi_n$ zu diesen Knoten berechnen:

$$g_{j,n} = \sum_{i=0}^n g_{i,n} L_j(x_{i,n}) = \int_a^b w(x) L_j(x) dx \quad \underline{(5.30)}$$

In der Praxis werden die $g_{i,n}$ zumeist jedoch gemeinsam mit den $x_{i,n}$ über ein Eigenwert-Problem berechnet.

→ Golub, Welsch: Math. Comp. 1969

Satz (5.31) über Orthogonalpolynome

a) Unter obigen Voraussetzungen ist durch

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx$$

ein Skalarprodukt auf $\Pi := \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Pi_n$ gegeben.

b) Es gibt eine eindeutig bestimmte Folge von Polynomen $P_k \in \Pi_k$ ($k \in \mathbb{N}_0$) mit den Eigenschaften

- $\langle P_j, P_k \rangle = 0$ für $j \neq k$
- $P_k(x) = x^k + \alpha_{k-1,k} x^{k-1} + \dots + \alpha_{0,k}$

Die (P_k) heißen die (normierten) Orthogonalpolynome zum Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

c) Die $P_k(x)$ genügen einer Dreitermrekursion

$$P_k(x) = (x - a_k) P_{k-1}(x) - b_{k-1} P_{k-2}(x) \quad (k = 1, 2, \dots)$$

mit

$$a_k = \frac{\langle x P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}, \quad b_{k-1} = \frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle}$$

Startwerte: $P_{-1}(x) := 0$, $P_0(x) := 1$,
 $b_0 := 1$.

Beweis: \rightarrow Deuflhard, Hohmann:
 Numerische Mathematik I

Beweis zu (5.31)

a) Nachprüfen der Axiome für ein Skalarprodukt

$$\langle u, u \rangle > 0 \quad \text{für } u \neq 0$$

$$\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$$

$$\langle \alpha u_1 + \beta u_2, v \rangle = \alpha \langle u_1, v \rangle + \beta \langle u_2, v \rangle$$

b) Gram-Schmidt Orthogonalisierung angewendet auf die Monome $1, x, x^2, \dots$

c) Induktionsbeweis: Seien P_0, P_1, \dots, P_{k-1} bereits konstruiert. Die Normierung liefert:

$$P_k(x) - x P_{k-1}(x) \in \Pi_{k-1}$$

Darstellung bzgl. Orthogonalbasis:

$$P_k - x P_{k-1} = \sum_{j=0}^{k-1} c_j P_j, \quad c_j = \frac{\langle P_k - x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

Wegen $P_k \perp P_j$ ($j=0, \dots, k-1$) folgt:

$$c_j = - \frac{\langle x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle} = - \frac{\langle P_{k-1}, x P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

Da $P_{k-1} \perp \Pi_{k-2} \Rightarrow c_0 = c_1 = \dots = c_{k-3} = 0$,

$$\text{Sowie } c_{k-2} = - \frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle} = - b_{k-1}$$

$$c_{k-1} = - \frac{\langle x P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle} = - a_k$$

$$\Rightarrow P_k = (x - a_k) P_{k-1} - b_{k-1} P_{k-2} \quad \blacktriangle$$

Beispiele (5.32)

a) Die Tschebyscheff-Polynome $T_k(x)$

$$T_k(x) := \cos [n \arccos x], \quad -1 \leq x \leq 1$$

genügen der Dreiterm-Rekursion

$$T_{k+1}(x) = 2x T_k(x) - T_{k-1}(x), \quad k \geq 1$$

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

Sie sind Orthogonalpolynome über $[-1, 1]$
zur Gewichtsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$,

genauer:

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_j(x) \cdot T_k(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{für } j \neq k \\ \pi & \text{für } j = k = 0 \\ \pi/2 & \text{für } j = k \neq 0 \end{cases}$$

b) Die Legendre-Polynome

$$P_k(x) := \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k} [(x^2-1)^k]$$

genügen der Dreiterm-Rekursion

$$P_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1} x P_k(x) - \frac{k}{k+1} P_{k-1}(x)$$

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x.$$

Sie sind Orthogonalpolynome über $[-1, 1]$
zur Gewichtsfunktion $w(x) = 1$, genauer:

$$\int_{-1}^1 P_j(x) P_k(x) dx = \begin{cases} 0, & \text{für } j \neq k \\ \frac{2}{2k+1}, & \text{für } j = k \end{cases}$$

Satz (5.33) (Nullstellen von Orthogonalp.)

Das Orthogonalpolynom $P_{n+1} \in \mathbb{T}_{n+1}$ hat genau $n+1$ einfache Nullstellen

$$x_{0,n} < x_{1,n} < \dots < x_{n,n}$$

im offenen Intervall $]a, b[$.

Beweis: x_1, \dots, x_m seien die Stellen in $]a, b[$ in denen P_{n+1} sein Vorzeichen wechselt ($m=0$ zugelassen!)

Setze $Q(x) := \pm (x-x_1) \cdot \dots \cdot (x-x_m) \in \mathbb{T}_m$.

Damit folgt (bei geeignetem $\forall Z. \pm$):

$$\langle Q, P_{n+1} \rangle = \int_a^b w(x) Q(x) P_{n+1}(x) dx > 0$$

$$P_{n+1} \perp \mathbb{T}_n \Rightarrow Q \notin \mathbb{T}_n$$

$$\Rightarrow m \geq n+1$$

$$\Rightarrow m = n+1 \quad \blacktriangle$$

Satz (5.34) (Gauß-Quadratur)

Es seien $a < x_{0,n} < x_{1,n} < \dots < x_{n,n} < b$ die Nullstellen von P_{n+1} . Die Gewichte $g_{j,n}$ seien durch (5.30) definiert.

Dann gilt für die zugehörige Gauß-

$$\text{Formel: } \forall P \in \Pi_{2n+1} : I_n(P) = I(P).$$

Beweis: Zu $P \in \Pi_{2n+1}$ seien $Q, R \in \Pi_n$ mit

$$P(x) = Q(x) \cdot P_{n+1}(x) + R(x).$$

Wegen $R(x_{j,n}) = P(x_{j,n})$, $j=0, \dots, n$ ist $R(x)$ das Interpolationspolynom zu $(x_{j,n}, P(x_{j,n}))$

$$\Rightarrow R(x) = \sum_{i=0}^n P(x_{i,n}) L_i(x). \quad (*)$$

Damit folgt:

$$I(P) = \int_a^b w(x) P(x) dx =$$

$$= \int_a^b w(x) [Q(x) P_{n+1}(x) + R(x)] dx$$

$$= \langle Q, P_{n+1} \rangle + \int_a^b w(x) R(x) dx$$

$$\stackrel{(*)}{=} \sum_{j=0}^n P(x_{j,n}) \int_a^b w(x) L_j(x) dx$$

$$\stackrel{(5.30)}{=} \sum_{j=0}^n g_{j,n} P(x_{j,n}) \quad \blacktriangle$$

Bem.: (5.35)

a) Es lässt sich allgemein zeigen, dass die Gewichte $g_{i,n}$ der Gauß-Formeln stets positiv sind.

b) Fehlerdarstellung:

$$I(f) - I_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x) \prod_{i=0}^n (x-x_{i,n})^2 dx$$

mit Zwischenstelle $\xi \in [a, b]$.

c) Tabelle einiger Beispiele:

$[a, b]$	$\omega(x)$	Orthog. polynome	Name
$[-1, 1]$	1	$P_n = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2-1)^n]$	Legendre
$[-1, 1]$	$1/\sqrt{1-x^2}$	$T_n = \cos[n \arccos x]$	Tschebyscheff
$[-1, 1]$	$\sqrt{1-x^2}$	$U_n = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sin[(n+1) \arccos x]$	Tschebyscheff
$[0, \infty[$	e^{-t}	$L_n = e^x \frac{d^n}{dx^n} [x^n e^{-x}]$	Laguerre
$]-\infty, \infty[$	e^{-t^2}	$H_n = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x^2}]$	Hermite

d) Ausführliche Angaben zu Knoten und gewichteten diverser Gauß-Formeln in Abramowitz, Stegun.

Beweis zu (5.35) a)

Für $k \in \{0, \dots, n\}$ sei $P_k(x) := \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x - x_{j,n})^2 \in \Pi_{2n}$

Nach Vorausm. an $\omega(x)$ folgt dann

$$\begin{aligned} 0 < \int_a^b \omega(x) P_k(x) dx &\stackrel{(5.34)}{=} \sum_{i=0}^n g_{i,n} \prod_{j \neq k} (x_{i,n} - x_{j,n})^2 \\ &= g_{k,n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_{k,n} - x_{j,n})^2 \end{aligned}$$

und damit $g_{k,n} > 0$. \blacktriangle

Beweis zu (5.35) b)

Sei $P \in \Pi_{2n+1}$ das Hermite-Interpol. polynom zu den Stützstellen $(x_{i,n}, f(x_{i,n}), f'(x_{i,n}))$, $i=0, 1, \dots, n$.

Dann gilt die Fehlerdarstellung

$$f(x) - P(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \prod_{i=0}^n (x - x_{i,n})^2$$

mit $\xi = \xi(x) \in]a, b[$.

Gauß-Formel liefert:

$$\begin{aligned} I(f) - I_n(f) &= I(f) - I(P) \\ &= \int_a^b \omega(x) \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \prod_{i=0}^n (x - x_{i,n})^2 dx \end{aligned}$$

$$\text{(Mittelwertsatz)} = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_0)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega(x) \prod_{i=0}^n (x - x_{i,n})^2 dx$$

Beispiel (5.36)

Wir berechnen $\int_0^{\pi/2} \sin x \, dx$ mittels Gauß-Legendre Quadratur mit $n=2$ (3 Knoten).

Legendre - Polynome:

$$P_0 = 1, \quad P_1 = x, \quad P_2 = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},$$

$$P_3 = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$$

Knoten	Gewichte
$\pm \sqrt{3/5}$	5/9
0	8/9

$$\Rightarrow \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = \frac{\pi}{4} \int_{-1}^1 \sin\left(\frac{\pi}{4}t + \frac{\pi}{4}\right) dt$$

Damit

$$I_2(f) = \frac{\pi}{4} \left\{ \frac{5}{9} \sin\left(\frac{\pi}{4}(1 - \sqrt{3/5})\right) + \frac{8}{9} \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) + \frac{5}{9} \sin\left(\frac{\pi}{4}(1 + \sqrt{3/5})\right) \right\}$$

$$\doteq 1.0000 \, 08122$$

Man hat hier also bei 3 Knoten bereits eine Genauigkeit von 10^{-5} .

Beispiel aus Kahaner, Moler & Nash:
 Numerical Methods and Software
 1989 - Prentice-Hall

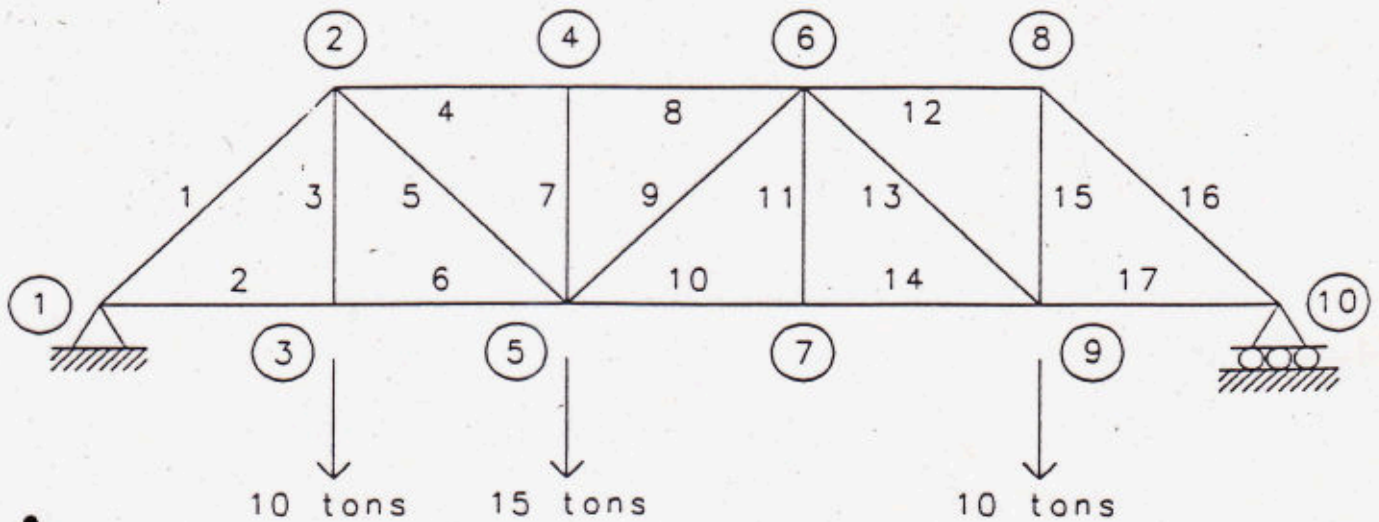


Figure P3.6

$$\begin{aligned}
 \text{joint 2} & \begin{cases} \sum F_x = -\alpha f_1 + f_4 + \alpha f_5 = 0, \\ \sum F_y = -\alpha f_1 - f_3 - \alpha f_5 = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 3} & \begin{cases} \sum F_x = -f_2 + f_6 = 0, \\ \sum F_y = f_3 - 10 = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 4} & \begin{cases} \sum F_x = -f_4 + f_8 = 0, \\ \sum F_y = -f_7 = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 5} & \begin{cases} \sum F_x = -\alpha f_5 - f_6 + \alpha f_9 + f_{10} = 0, \\ \sum F_y = \alpha f_5 + f_7 + \alpha f_9 - 15 = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 6} & \begin{cases} \sum F_x = -f_8 - \alpha f_9 + f_{12} + \alpha f_{13} = 0, \\ \sum F_y = -\alpha f_9 - f_{11} - \alpha f_{13} = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 7} & \begin{cases} \sum F_x = -f_{10} + f_{14} = 0, \\ \sum F_y = f_{11} = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 8} & \begin{cases} \sum F_x = -f_{12} + \alpha f_{16} = 0, \\ \sum F_y = -f_{15} - \alpha f_{16} = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 9} & \begin{cases} \sum F_x = -\alpha f_{13} - f_{14} + f_{17} = 0, \\ \sum F_y = \alpha f_{13} + f_{15} - 10 = 0; \end{cases} \\
 \text{joint 10} & \begin{cases} \sum F_x = -\alpha f_{16} - f_{17} = 0. \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\alpha = \sin \frac{\pi}{4}$$

.0
15.0
.0
.0
.0
.0
.0
.0
.0
10.0
.0

ERGEBNIS DER GAUSS-ELIMINATION / LOESUNGSVEKTOR :

IFAIL = 0

RES = .174821D-14
1: -.2687005769D+02
2: .1900000000D+02
3: .1000000000D+02
4: -.2800000000D+02
5: .1272792206D+02
6: .1900000000D+02
7: .0000000000D+00
8: -.2800000000D+02
9: .8485281374D+01
10: .2200000000D+02
11: .0000000000D+00
12: -.1600000000D+02
13: -.8485281374D+01

14: .2200000000D+02
15: .1600000000D+02
16: -.2262741700D+02
17: .1600000000D+02