

Kapitel 4

Numerische Integration

4.1 Interpolatorische Quadraturformeln

4.2 Gaußsche Quadraturformeln

4.3 Intervallteilung, Romberg-Verfahren

4.4 Praktische Aspekte der Integration

Wir behandeln in diesem Kapitel die Berechnung von Näherungswerten für das bestimmte Integral

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

einer stetigen Funktion $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$. Numerische Methoden sind erforderlich, wenn z.B. keine Stammfunktion in geschlossener Form angegeben werden kann.

Beispiele:

- Die Funktion $F(x) = \frac{1}{2} + \int_0^x e^{-\pi t^2} dt$ wird sehr oft in der Wahrscheinlichkeitstheorie verwendet. Sie gibt den Wert der Verteilungsfunktion zur *Normalverteilung* an.
- Der *Integralsinus* $\int_0^x \frac{\sin \pi t}{\pi t} dt$ spielt eine Rolle in der digitalen Signalverarbeitung.
- Die Integral-Exponentialfunktion $\int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt$ und der Integral-Logarithmus $li(x) := \int_0^x \frac{dt}{\ln t}$ treten in der Zahlentheorie und der Quantenfeldtheorie in der Physik auf.

Eine Möglichkeit zur **numerischen** Berechnung von Näherungswerten wäre die Darstellung des Integranden als Potenzreihe, gliedweise Integration und anschließende Näherungsformel für den Grenzwert der Potenzreihe, z.B. durch geeignete Partialsummen. Wir werden in diesem Kapitel allerdings ganz anders vorgehen.

4.1 Interpolatorische Quadraturformeln

Für die näherungsweise Berechnung des Integrals

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

denken wir an die Begründung des bestimmten Integrals als signierter Flächeninhalt: der Integralwert wird durch gewichtetes Aufsummieren von Funktionswerten von f bestimmt.

4.1.1 Definition: Quadraturformel

Eine Näherung des bestimmten Integrals $\int_a^b f(x) dx$ durch

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^n \omega_j f(x_j)$$

heißt *Quadraturformel*. Hierbei sind

- x_0, x_1, \dots, x_n (meistens in $[a, b]$ gewählte) paarweise verschiedene *Knoten* und
- $\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n \in \mathbb{R}$ die *Gewichte*

der Quadraturformel.

Meist werden die Knoten der Quadraturformel fest vorgegeben, wie etwa bei der Lagrange-Interpolation. Die Bestimmung der Gewichte erfolgt NICHT wie bei der Definition des Riemann-Integrals, sondern durch die folgende Festlegung.

4.1.2 Definition und Satz: Interpolatorische Quadraturformel

Die Quadraturformel $I_n(f)$ mit $n+1$ paarweise verschiedenen Knoten x_0, \dots, x_n heißt *interpolatorisch*, wenn sie exakt ist mindestens für alle Polynome in \mathcal{P}_n , d.h.

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{k=0}^n \omega_k p(x_k) \quad \text{für alle } p \in \mathcal{P}_n.$$

Die Gewichte einer interpolatorischen Q.F. sind durch diese Forderung eindeutig bestimmt, es gilt

$$\omega_k = \int_a^b L_{n,k}(x) dx, \quad k = 0, \dots, n \quad (4.1)$$

wobei $L_{n,k}$, $k = 0, \dots, n$, die *Lagrange-Grundpolynome* der Interpolation zu den Stützstellen x_0, \dots, x_n bezeichnet.

Beachte: Durch Angabe der Knoten x_0, \dots, x_n ist eine interpolatorische Q.F. bereits eindeutig festgelegt, die Gewichte können dann auf zwei Arten bestimmt werden:

- Wie in (4.1), also durch Integration der Lagrange-Grundpolynome. Dies ist in der Regel zu aufwändig.
- Als Lösung eines **linearen** Gleichungssystems: Mit der Basis $p_k(x) = (x - a)^k$, $0 \leq k \leq n$, von \mathcal{P}_n lautet die Exaktheitsbedingung

$$\sum_{j=0}^n \omega_j (x_j - a)^k = \int_a^b (x - a)^k dx = \frac{(b - a)^{k+1}}{k + 1}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Die Matrix dieses linearen Gleichungssystems ist regulär, sie ist die Transponierte einer Vandermonde-Matrix zu den Stützstellen $x_j - a$, $0 \leq j \leq n$.

4.1.3 Definition und Bemerkung

Eine Quadraturformel I_n mit $n + 1$ Knoten hat den genauen *Exaktheitsgrad* m , falls sie für alle Polynome $p \in \mathcal{P}_m$ den exakten Wert $\int_a^b p(x) dx$ liefert, es aber mindestens ein Polynom $q \in \mathcal{P}_{m+1}$ gibt mit $\int_a^b q(x) dx \neq I_n(q)$.

- Jede interpolatorische Quadraturformel I_n mit $n + 1$ Knoten hat mindestens den Exaktheitsgrad n : dies ist ja die Forderung, interpolatorisch zu sein.
- Jede Quadraturformel I_n mit $n + 1$ Knoten hat höchstens den Exaktheitsgrad $2n + 1$: das Quadrat des Knotenpolynoms $q(x) = w_{n+1}(x)^2$ hat den Grad $2n + 2$, wegen $q \geq 0$ und $q(x_j) = 0$ ist aber

$$\int_a^b q(x) dx > 0, \quad I_n(q) = 0.$$

Wir behandeln in diesem Abschnitt zwei Klassen von interpolatorischen Quadraturformeln. Vorweg seien drei prominente Beispiele angeführt, die jeweils eine geometrische Bedeutung (Integral entspricht dem Flächeninhalt) haben. Die Angaben zum Exaktheitsgrad lassen sich leicht überprüfen.

4.1.4 Beispiel: Einfache interpolatorische Q.formeln für das Integral $\int_a^b f(x) dx$ sind

- $n = 0$: *Mittelpunktsregel*

$$I_0(f) = (b - a)f\left(\frac{a + b}{2}\right), \quad \text{Exaktheitsgrad } m = n + 1 = 1.$$

- $n = 1$: *Trapezregel*

$$I_1(f) = \frac{b - a}{2} (f(a) + f(b)), \quad \text{Exaktheitsgrad } m = n = 1.$$

c) $n = 2$: *Simpsonregel* auch als Keplersche Fass-Regel bezeichnet:

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right), \quad \text{Exaktheitsgrad } m = n + 1 = 3.$$

Zur Berechnung von $\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0.693147\dots$ liefert die Mittelpunktsregel $I_0(f) = 0.\bar{6}$, die Trapezregel $I_1(f) = 0.75$ und Simpsonregel $I_2(f) = 0.69\bar{4}$.

Die Trapez- und Simpsonregel sind zwei Beispiele der folgenden Klasse von interpolatorischen Quadraturformeln für das Integral $\int_a^b f(x) dx$.

4.1.5 Definition: abgeschlossene Newton-Cotes Formeln

Für gegebenes $n \in \mathbb{N}$ wählen wir

- die *Knoten* $x_k = a + k \cdot \frac{b-a}{n}$, $k = 0, 1, \dots, n$,
hier sind also die Randpunkte a, b auch Knoten,
- die *Gewichte* $\omega_k = \int_a^b L_{n,k}(x) dx$ wie üblich für eine interpolatorische Quadraturformel.

Bemerkung: Der Exaktheitsgrad der abgeschlossenen Newton-Cotes Formeln mit $n+1$ Knoten ist n für ungerades n , $n+1$ für gerades n .

Als weitere Formel geben wir die “3/8-Regel” an, die sich für $n = 3$ ergibt:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{8} \left(f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b) \right)$$

Ihr genauer Exaktheitsgrad ist $m = n = 3$.

Die Mittelpunktsregel ist ein Beispiel der folgenden Klasse von interpolatorischen Quadraturformeln.

4.1.6 Definition: offene Newton-Cotes Formeln

Als Variante verwendet man bei den *offenen* Newton-Cotes Formeln mit $n \in \mathbb{N}_0$ die Knoten

$$x_k = a + (k+1) \cdot \frac{b-a}{n+2}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Man beachte, dass die Randpunkte a, b keine Knoten sind, daher der Begriff “offen”. Die Gewichte werden wie üblich durch die Exaktheitsordnung $m \geq n$ bestimmt.

Bemerkung: Der Exaktheitsgrad der offenen Newton-Cotes Formeln mit $n+1$ Knoten ist wieder

$$n \text{ für ungerades } n, \quad n+1 \text{ für gerades } n.$$

Als Beispiel für $n = 0$ ergibt sich die Mittelpunktsregel, weitere Beispiele sind

$$\text{a) } n = 1: \quad I_1(f) = \frac{b-a}{2} \left(f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + f\left(\frac{a+2b}{3}\right) \right) \quad \text{Exaktheitsgrad } m = n = 1.$$

$$\text{b) } n = 2: \quad I_2(f) = \frac{b-a}{3} \left(2f\left(\frac{3a+b}{4}\right) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 2f\left(\frac{a+3b}{4}\right) \right) \quad \text{Exaktheitsgrad } m = n + 1 = 3.$$

Die Exaktheit für alle Polynome vom Grad $\leq n$ führt zur einfachen Interpretation der interpolatorischen Quadraturformel als (exaktes) Integral über das Interpolationspolynom von f , also

$$I_n(f) = \int_a^b p_f(x) dx.$$

Dies führt mit Hilfe des Interpolationsfehlers in Satz 3.1.11 direkt zur Darstellung des *Quadraturfehlers*

$$R_n(f) := \int_a^b f(x) dx - I_n(f) = \int_a^b f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx \quad (4.2)$$

mit Hilfe des Newton-Restglieds der Interpolation.

Für hinreichend oft differenzierbare Funktionen lässt sich eine weitere Fehlerdarstellung herleiten. Wir verwenden die Taylor-Entwicklung von f zum Entwicklungspunkt a . Das Restglied wird in seiner Integraldarstellung verwendet und mit Hilfe der *abgebrochenen Potenzfunktion*

$$(x-t)_+^m = \begin{cases} (x-t)^m, & \text{für } x \geq t, \\ 0, & \text{für } x < t, \end{cases} \quad (4.3)$$

geschrieben, also

$$f(x) = \underbrace{\sum_{j=0}^m \frac{f^{(j)}(a)}{j!} (x-a)^j}_{=p_m(f)} + \int_a^b \frac{(x-t)_+^m}{m!} f^{(m+1)}(t) dt.$$

Hierbei ist $p_m(f)$ das Taylorpolynom vom Grad m .

4.1.7 Satz: Quadraturfehler und Peanokern

Die Quadraturformel

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$

mit den paarweise verschiedenen Knoten $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ sei exakt für Polynome vom Grad m . Dann gilt für alle $f \in C^{m+1}[a, b]$

$$R_n(f) = \int_a^b f(x) dx - I_n(f) = \int_a^b f^{(m+1)}(t) K_m(t) dt$$

mit dem *Peanokern* der Quadraturformel I_n

$$K_m(t) = \frac{(b-t)^{m+1}}{(m+1)!} - \sum_{k=0}^n \omega_k \frac{(x_k - t)_+^m}{m!}.$$

Weiterhin gilt: Falls K_m keinen Vorzeichenwechsel im Intervall $[a, b]$ hat, so existiert $\xi \in [a, b]$ mit

$$R_n(f) = f^{(m+1)}(\xi) \int_a^b K_m(t) dt = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} R_n(e_{m+1}). \quad (4.4)$$

Hierbei ist $e_{m+1}(x) = (x-a)^{m+1}$.

Beweis: Das Taylor-Polynom $p_m(f)$ vom Grad m wird nach Vor. exakt integriert. Als Quadraturfehler bleibt

$$R_n(f) = \int_a^b \left(\int_a^b \frac{(x-t)_+^m}{m!} f^{(m+1)}(t) dt \right) dx - \sum_{k=0}^n \omega_k \left(\int_a^b \frac{(x_k - t)_+^m}{m!} f^{(m+1)}(t) dt \right).$$

Vertauschen der Integrationsreihenfolge im ersten Integral (Satz von Fubini) und Herausziehen des Integrals aus der Summe ergibt

$$R_n(f) = \int_a^b f^{(m+1)}(t) \left(\int_a^b \frac{(x-t)_+^m}{m!} dx - \sum_{k=0}^n \omega_k \frac{(x_k - t)_+^m}{m!} \right) dt.$$

Dies liefert die behauptete Gestalt des Peano-Kerns $K_m(t)$.

Falls K_m keinen Vorzeichenwechsel hat, folgt die erste Darstellung in (4.4) aus dem entsprechenden Mittelwertsatz der Integralrechnung. Speziell für $f = e_{m+1}$ ist $f^{(m+1)}(x) = (m+1)!$ konstant, also folgt

$$R_n(e_{m+1}) = (m+1)! \int_a^b K_m(t) dt.$$

Hieraus folgt die zweite Identität in (4.4).

In den folgenden Spezialfällen besitzt der Peano-Kern K_m zum **genauen** Exaktheitsgrad m von I_n jeweils die Eigenschaft, dass er sein Vorzeichen nicht wechselt. Die Zahlenwerte ergeben sich aus (4.4) durch Ausrechnen von $R_n(e_{m+1})$.

4.1.8 Korollar: Quadraturfehler einfacher Newton-Cotes Formeln

Im jeweiligen Fall sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ hinreichend oft differenzierbar. Mit einem geeigneten $\xi \in [a, b]$ gilt bei der

a) *Mittelpunktsregel:*

$$\int_a^b f(x) dx - (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)$$

b) *Trapezregel*

$$\int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$$

c) *Simpsonregel*

$$\int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

Angaben zu weiteren Formeln findet man in der Literatur und im Internet.

Z.B. rechnet man für die Simpson-Regel (Exaktheitsgrad $m = 3$) mit $x_1 = \frac{a+b}{2}$

$$\begin{aligned} K_3(t) &= \frac{(b-t)^4}{24} - \frac{b-a}{6} \left(\frac{(a-t)_+^3}{6} + \frac{4(x_1-t)_+^3}{6} + \frac{(b-t)_+^3}{6} \right) \\ &= \begin{cases} -\frac{(t-a)^3}{72} (a+2b-3t), & \text{für } a \leq t \leq x_1, \\ -\frac{(b-t)^3}{72} (3t-2a-b), & \text{für } x_1 \leq t \leq b. \end{cases} \end{aligned}$$

Die beiden Klammerausdrücke sind im angegebenen t -Bereich positiv, also ist $K_3(t) \leq 0$ in $[a, b]$ und es gilt die Zusatzaussage in Satz 4.1.7. Die Konstante berechnet man aus dem Quadraturfehler für $f(x) = (x-a)^4$, also

$$R_n(e_4) = \int_a^b (x-a)^4 dx - \frac{2(b-a)}{3} (x_1-a)^4 - \frac{b-a}{6} (b-a)^4 = -\frac{(b-a)^5}{120}.$$

Division durch $4! = 24$ ergibt den Nenner 2880.

Die Quadraturformel I_n können wir wieder als einen linearen Operator auf $C[a, b]$ auffassen, sein Bildbereich ist die Menge der reellen Zahlen. Die Stabilität wird anhand der Operatornorm erklärt.

4.1.9 Satz: Operatornorm der Quadraturformel

Die Quadraturformel

$$I_n : C[a, b] \rightarrow \mathbb{R}, \quad I_n(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k),$$

beschreibt einen linearen Operator, seine Operatornorm ist

$$\|I_n\|_{\text{op}} = \max\{|I_n(f)| : f \in C[a, b], \|f\|_{\infty} = 1\} = \sum_{k=0}^n |\omega_k|.$$

4.1.10 Bemerkung: Die Exaktheit für konstante Polynome ergibt

$$b-a = \int_a^b 1 dx = \sum_{k=0}^n \omega_k.$$

Also gilt

$$\|I_n\|_{\text{op}} \geq b - a.$$

Gleichheit tritt genau dann ein, wenn alle Gewichte größer oder gleich Null sind.

Die offene Newton-Cotes Formel I_2 mit 3 Knoten hatte bereits ein negatives Gewicht, es gilt

$$\|I_2\|_{\text{op}} = \frac{5}{3} (b - a).$$

Ebenso hat die abgeschlossene Newton-Cotes Formel I_8 mit 9 Knoten negative Gewichte. Dies führt dazu, dass die Operatornorm jeweils größer ist als $b - a$. Man kann sogar beweisen, dass die Operatornorm $\|I_n\|_{\text{op}}$ sowohl für die offenen als auch die abgeschlossenen Newton-Cotes Formeln mit $n + 1$ Knoten mit wachsendem $n \rightarrow \infty$ gegen unendlich divergiert.

4.2 Gaußsche Quadraturformeln

Wir konstruieren nun interpolatorische Quadraturformeln mit $n + 1$ Knoten, die den maximal möglichen Exaktheitsgrad $m = 2n + 1$ in Satz 4.1.3 erzielen. Die Theorie wird sogar etwas allgemeiner aufgebaut als in Abschnitt 4.1, indem gewichtete Integrale

$$I^{(w)}(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx$$

mit einer Gewichtsfunktion $w(x) > 0$ in (a, b) betrachtet werden.

Der wesentliche neue Aspekt beruht darin, dass die Knoten x_0, \dots, x_n geschickter gewählt werden als bei den (offenen oder abgeschlossenen) Newton-Cotes Formeln. Insbesondere werden die Knoten nicht mehr mit gleichem Abstand gewählt, sondern die "Knotendichte" nimmt zum Rand des Intervalls $[a, b]$ zu. Als günstigen Nebeneffekt erhalten wir Formeln

$$I_n^{(w)}(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$

mit lauter positiven Gewichten, so dass

$$\|I_n^{(w)}\|_{\text{op}} = \sum_{k=0}^n \omega_k = \int_a^b w(x) dx \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}_0$$

gilt. Damit ist die Stabilität der Q.formeln auch für große Knotenzahl gesichert.

4.2.1 Heuristische Vorüberlegung: Die Exaktheitsbedingungen für alle Polynome bis zum Grad $2n + 1$ ergeben $2n + 2$ *nichtlineare* Gleichungen mit den $2n + 2$ Unbekannten x_0, \dots, x_n und $\omega_0, \dots, \omega_n$.

Als konkretes Beispiel schreiben wir die Bedingungen für die zwei-punktige Gauß-Formel auf dem Intervall $[-1, 1]$ mit dem Standardgewicht $w(x) \equiv 1$ auf: finde x_0, x_1 und

ω_0, ω_1 mit

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 dx &= 2 = \omega_0 + \omega_1 \\ \int_{-1}^1 x dx &= 0 = \omega_0 x_0 + \omega_1 x_1 \\ \int_{-1}^1 x^2 dx &= \frac{2}{3} = \omega_0 x_0^2 + \omega_1 x_1^2 \\ \int_{-1}^1 x^3 dx &= 0 = \omega_0 x_0^3 + \omega_1 x_1^3\end{aligned}$$

Die *eindeutige* Lösung lautet

$$x_0 = -\sqrt{3}/3, \quad x_1 = \sqrt{3}/3, \quad \omega_0 = \omega_1 = 1,$$

die zugehörige Q.formel heißt Gauß-Quadraturformel

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx I_1^{(w)}(f) = f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3).$$

Zusatz für einfachere Rechnung: Weil die Gewichtsfunktion $w(x) = 1$ gerade ist, erhalten wir (automatisch) die Symmetrie der Knoten ($x_0 = -x_1$) und der Gewichte ($\omega_0 = \omega_1$). Setzt man dies bereits in die Exaktheitsbedingungen ein, sind die Gleichungen für ungeraden Grad 1 und 3 automatisch erfüllt ("0=0"). Es bleiben die 2 Gleichungen für Grad 0 und 2 mit den 2 Unbekannten x_0 und ω_0 zu lösen,

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 dx &= 2 = 2\omega_0 \\ \int_{-1}^1 x^2 dx &= \frac{2}{3} = 2\omega_0 x_0^2.\end{aligned}$$

Vorsicht: diese Vereinfachung darf nur vorgenommen werden, wenn die Symmetrie der Knoten und Gewichte von vornherein klar ist. Dies ist bei Gauß-, Gauß-Tschebyscheff sowie Lobatto-Formeln auf dem Intervall $[-1, 1]$ der Fall, bei Gauß-Radau Formeln aber NICHT!

Wir lernen nun einen direkten Weg zur Bestimmung der Q.formeln I_n mit maximalem Exaktheitsgrad $m = 2n + 1$ kennen. Die Bestimmung der Knoten erfolgt durch die Verwendung der Orthogonal-Polynome, die wir im Kapitel 3 im Zusammenhang mit dem Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_w = \int_{-1}^1 f(x)g(x)w(x)dx, \quad f, g \in C[-1, 1],$$

kennengelernt haben, vgl. Satz 3.3.14. Speziell:

- Für $w \equiv 1$ sind dies die Legendre-Polynome L_k in Beispiel 3.3.13,
- für $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ sind dies die Tschebyscheff-Polynome 1. Art T_k in 3.3.5,
- für $w(x) = \sqrt{1-x^2}$ sind dies die Tschebyscheff-Polynome 2. Art U_k in den Übungen.

Dass das Orthogonalpolynom \tilde{p}_n vom Grad n in Satz 3.3.14 genau n paarweise verschiedene Nullstellen im Intervall $[-1, 1]$ besitzt, ist ein wichtiges Zwischenresultat.

4.2.2 Satz: Nullstellen der Orthogonalpolynome

Auf $C[-1, 1]$ sei das gewichtete Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_w$ mit $w(x) > 0$ für $x \in (-1, 1)$ und mit der Symmetrie-Eigenschaft

$$\langle p, xq \rangle_w = \langle xp, q \rangle_w \quad \text{für alle Polynome } p, q$$

in Satz 3.3.14 gegeben. Weiter seien \tilde{p}_n , $n \in \mathbb{N}_0$, die zugehörigen Orthogonalpolynome mit Höchstkoeffizient 1:

- \tilde{p}_n hat n einfache Nullstellen im offenen Intervall $(-1, 1)$,

$$-1 < \xi_1^{(n)} < \dots < \xi_n^{(n)} < 1.$$

- Die Nullstellen von \tilde{p}_{n-1} trennen die Nullstellen von \tilde{p}_n , d.h.

$$-1 < \xi_1^{(n)} < \xi_1^{(n-1)} < \xi_2^{(n)} < \xi_2^{(n-1)} < \dots < \xi_{n-1}^{(n)} < \xi_{n-1}^{(n-1)} < \xi_n^{(n)} < 1.$$

Beweis:

a) Wir definieren die Menge $Z_n := \{\xi \in (-1, 1) : \xi \text{ ist Nullstelle von } \tilde{p}_n \text{ mit ungerader Vielfachheit}\}$. Zu zeigen ist $\#Z_n = n$.

Würde $\#Z_n < n$ gelten, so hätte das Polynom $q(x) = \prod_{\xi \in Z_n} (x - \xi)$ höchstens den Grad $n - 1$. Damit hätte das Produkt $q\tilde{p}_n$ keine Vorzeichenwechsel in $[-1, 1]$ (aha, daher also nur Nullstellen ungerader Ordnung in Z_n), also wäre

$$\int_{-1}^1 q(x)\tilde{p}_n(x)w(x) dx \neq 0,$$

im Widerspruch zur Orthogonalität von \tilde{p}_n zu \mathcal{P}_{n-1} .

b) per Induktion nach $n \in \mathbb{N}_0$:

Die Trennungseigenschaft für $n = 0$ ist trivial: die einzige Nullstelle β_0 von \tilde{p}_1 liegt nach Teil a) in $(-1, 1)$.

Es gelte nun die Trennungseigenschaft für die Nullstellen von \tilde{p}_{n-1} und \tilde{p}_n . Insbesondere ist deshalb $\tilde{p}_{n-1}(\xi_j^{(n)}) \neq 0$ für $j = 0, \dots, n$, da ja die Nullstellen nicht übereinstimmen. Die Drei-Term-Rekursion ergibt für \tilde{p}_{n+1} ausgewertet an den Nullstellen von \tilde{p}_n :

$$\text{sign}(\tilde{p}_{n+1}(\xi_j^{(n)})) = \text{sign}\left(\underbrace{-\gamma_n}_{<0} \tilde{p}_{n-1}(\xi_j^{(n)})\right) = -\text{sign}(\tilde{p}_{n-1}(\xi_j^{(n)})).$$

Wegen Höchstkoeffizient 1, Betrachtung der Grenzwerte für $x \rightarrow \pm\infty$ und Lage aller Nullstellen in $(-1, 1)$ ist außerdem

$$\text{sign}(\tilde{p}_{n+1}(1)) = \text{sign}(\tilde{p}_{n-1}(1)) = 1, \quad \text{sign}(\tilde{p}_{n+1}(-1)) = \text{sign}(\tilde{p}_{n-1}(-1)) = (-1)^{n-1}.$$

Die Trennungseigenschaft der (einfachen) Nullstellen von \tilde{p}_{n-1} ergibt

$$\text{sign}(\tilde{p}_{n-1}(\xi_j^{(n)})) = (-1)^{n-j}, \quad j = 1, \dots, n,$$

also folgt für \tilde{p}_{n+1}

$$\text{sign}(\tilde{p}_{n+1}(\xi_j^{(n)})) = (-1)^{n+1-j}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Insgesamt erhalten wir mit dem Zwischenwertsatz je eine Nullstelle von \tilde{p}_{n+1} in den offenen Intervallen

$$(-1, \xi_1^{(n)}), (\xi_1^{(n)}, \xi_2^{(n)}), \dots, (\xi_{n-1}^{(n)}, \xi_n^{(n)}), (\xi_n^{(n)}, 1).$$

Dies ist die Trennungseigenschaft der Nullstellen von \tilde{p}_n und \tilde{p}_{n+1} .

Eine weitere Überlegung ergibt nun die Existenz und Eindeutigkeit der Gauß-Quadraturformeln, die den maximalen Exaktheitsgrad $m = 2n + 1$ aufweisen.

4.2.3 Satz: Gauß-Formeln auf $[-1, 1]$

Auf $C[-1, 1]$ sei das gewichtete Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_w$ mit der Symmetrie-Eigenschaft in Satz 3.3.14 gegeben. Für das gewichtete Integral $\int_{-1}^1 f(x)w(x) dx$ und für jedes $n \in \mathbb{N}_0$ existieren eindeutig bestimmte Knoten

$$-1 < x_0 < x_1 < \cdots < x_n < 1$$

und Gewichte $\omega_k > 0$, so dass die Quadraturformel

$$I_n^{(w)}(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$

den Exaktheitsgrad $m = 2n + 1$ hat, d.h.

$$\int_{-1}^1 p(x)w(x) dx = \sum_{k=0}^n \omega_k p(x_k) \quad \text{für alle } p \in \mathcal{P}_{2n+1}.$$

- Die Knoten sind die Nullstellen des Orthogonal-Polynoms \tilde{p}_{n+1} in Satz 3.3.14.
- Die Gewichte erfüllen

$$\omega_k = \int_{-1}^1 L_{n,k}(x)w(x) dx = \int_{-1}^1 (L_{n,k}(x))^2 w(x) dx, \quad k = 0, \dots, n,$$

sind also insbesondere positiv.

- Falls $w(-x) = w(x)$ für $x \in (-1, 1)$ gilt, so gelten auch die Symmetrie-Eigenschaften

$$x_k = -x_{n-k}, \quad \omega_k = \omega_{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Beweis: Wir wählen x_0, \dots, x_n als die Nullstellen von \tilde{p}_{n+1} und die Gewichte für die interpolatorische Q.f. $I_n^{(w)}$ als

$$\omega_k = \int_{-1}^1 L_{n,k}(x)w(x) dx,$$

wobei $L_{n,k}$ die zugehörigen Lagrange-Grundpolynome sind. (Hier wird das Gewicht $w(x)$ im Integral berücksichtigt, hingegen wurde (4.1) nur für das Standardgewicht $w(x) = 1$ angegeben.) Wir zeigen nun:

1. Diese interpolatorische Q.f. hat den Exaktheitsgrad $2n + 1$:

Für beliebiges $q \in \mathcal{P}_{2n+1}$ ergibt die Polynomdivision durch \tilde{p}_{n+1}

$$q(x) = t(x)\tilde{p}_{n+1}(x) + r(x) \quad \text{mit } t, r \in \mathcal{P}_n.$$

Weil \tilde{p}_{n+1} orthogonal zu \mathcal{P}_n ist (bzgl. des gewichteten Skalarprodukts), gilt einerseits

$$\int_{-1}^1 q(x)w(x) dx = \underbrace{\int_{-1}^1 t(x)\tilde{p}_{n+1}(x)w(x) dx}_{=0 \text{ wg. Orth.}} + \int_{-1}^1 r(x)w(x) dx.$$

Andererseits liefert die Q.f. $I_n^{(w)}$ auf Grund der Knotenwahl mit $\tilde{p}_{n+1}(x_k) = 0$

$$I_n^{(w)}(q) = \sum_{k=0}^n \omega_k \underbrace{\left(t(x_k) \tilde{p}_{n+1}(x_k) + r(x_k) \right)}_{=0 \text{ wg. Nullst.}} = I_n^{(w)}(r).$$

Die Exaktheit von $I_n^{(w)}$ für \mathcal{P}_n folgt aus der Wahl der Gewichte, also insgesamt

$$\int_{-1}^1 q(x)w(x) dx = \int_{-1}^1 r(x)w(x) dx = I_n^{(w)}(r) = I_n^{(w)}(q).$$

2. Darstellungen der Gewichte und Symmetrie:

Das Quadrat $L_{n,k}^2$ des Lagrange-Grundpolynoms hat den Grad $2n$, wird also durch die Q.f. exakt integriert. Dies ergibt

$$\int_{-1}^1 (L_{n,k}(x))^2 w(x) dx = \sum_{j=0}^n \omega_j \underbrace{(L_{n,k}(x_j))^2}_{=\delta_{j,k}} = \omega_k.$$

Offensichtlich folgt hieraus $\omega_k > 0$ für $k = 0, \dots, n$.

Symmetrie: Für gerades $w(x)$ ist \tilde{p}_{n+1} gerade bzw. ungerade, also sind die Nullstellen symmetrisch um 0. Die zu diesen Stellen gebildeten Lagrange-Grundpolynome erfüllen $L_{n,k}(x) = L_{n,n-k}(-x)$, Integration ergibt daher $\omega_k = \omega_{n-k}$.

3. Eindeutigkeit:

Sei J_n eine weitere Q.f. mit paarweise verschiedenen Knoten x_0, \dots, x_n , Gewichten $\omega_0, \dots, \omega_n$ und Exaktheitsgrad $2n+1$. Das zugehörige Knotenpolynom nennen wir $h(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$, es liegt in \mathcal{P}_{n+1} . Für jedes Polynom $q \in \mathcal{P}_n$ folgt auf Grund der Exaktheitsbedingung die Orthogonalität

$$\int_{-1}^1 \underbrace{h(x)q(x)}_{\in \mathcal{P}_{2n+1}} w(x) dx = \sum_{k=0}^n \omega_k \underbrace{h(x_k)q(x_k)}_{=0} = 0.$$

Also ist das Knotenpolynom h ein skalares Vielfaches des Orthogonalpolynoms \tilde{p}_{n+1} vom Grad $n+1$ in Satz 3.3.14. (Weil sein Höchstkoeffizient 1 ist, gilt sogar $h = \tilde{p}_{n+1}$.) Somit sind die Knoten der Q.f. J_n die Nullstellen von \tilde{p}_{n+1} , damit ist $J_n = I_n^{(w)}$.

4.2.4 Beispiel: gewöhnliche Gauss-Quadraturformeln

Die gewöhnlichen Gauß-Formeln werden zum Standardgewicht $w(x) = 1$ auf dem Intervall $[-1, 1]$ definiert. Die zugehörigen Orthogonalpolynome sind die Legendre-Polynome in Beispiel 3.3.13.

- $n = 0$: $L_1(x) = x$ hat die einzige Nullstelle $x_0 = 0$. Die Ein-punktige Gauß-Formel auf $[-1, 1]$ ist die **Mittelpunktsregel** mit dem Gewicht $\omega_0 = 2$, Exaktheitsgrad 1.
- $n = 1$: $L_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$ hat die Nullstellen $x_0 = -\sqrt{3}/3$, $x_1 = \sqrt{3}/3$. Dies sind die Knoten der 2-punktigen Gauß-Formel in Bsp. 4.2.1, die Gewichte sind $\omega_0 = \omega_1 = 1$, Exaktheitsgrad 3.
- $n = 2$: $L_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$ hat die Nullstellen $x_0 = -\sqrt{3/5}$, $x_1 = 0$ und $x_2 = \sqrt{3/5}$. Die Gewichte der 3-punktigen Gauß-Formel werden unter Berücksichtigung

der Symmetrie durch 2 **lineare** Gleichungen aus den Exaktheitsbedingungen zum geraden Grad 0 und 2 ermittelt, der genaue Exaktheitsgrad ist 5:

$$\omega_0 = \omega_2 = \frac{5}{9}, \quad \omega_1 = \frac{8}{9}.$$

4.2.5 Beispiel: Gauß-Tschebyscheff Quadraturformeln

Wir betrachten das Integral

$$\int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

mit der Gewichtsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Die *Gauß-Tschebyscheff-Quadraturformeln* haben als Knoten die Nullstellen von $T_{n+1}(x) = \cos((n+1) \arccos x)$, also

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{2k+1}{n+1}\right), \quad k = 0, \dots, n,$$

(absteigend sortiert), siehe Beispiel 3.3.5. Wir beweisen, dass die Gewichte

$$\omega_k = \int_{-1}^1 L_{n,k}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{n+1}$$

sind, das liefert die schöne Quadraturformel mit konstantem Gewicht

$$I_n^{(w)}(f) = \frac{\pi}{n+1} \sum_{k=0}^n f(x_k).$$

Beweis: Es genügt zu zeigen, dass die angegebene Q.formel interpolatorisch ist, also exakt für \mathcal{P}_n . Dazu bestimmen wir den Quadraturfehler für die Tschebyscheff-Polynome T_m , $m = 0, \dots, n$ (dies soll Null ergeben!). Es ist

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 T_m(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} &= \begin{cases} \pi, & m = 0, \\ 0, & m \geq 1, \end{cases} \\ I_n^{(w)}(T_m) &= \frac{\pi}{n+1} \sum_{k=0}^n \cos\left(\frac{m\pi}{2} \frac{2k+1}{n+1}\right) = \begin{cases} \pi, & m = 0, \\ 0, & 1 \leq m \leq n. \end{cases} \end{aligned}$$

Die Summe 0 für $1 \leq m \leq n$ ergibt sich mit Mitteln der Analysis, z.B. ergibt Rechnung im Komplexen mit Hilfe der Eulerschen Formel

$$\begin{aligned} e^{i \frac{m\pi}{2} \frac{2n+1}{n+1}} \sum_{k=0}^n \cos\left(\frac{m\pi}{2} \frac{2k+1}{n+1}\right) &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n \left(e^{i \frac{m\pi}{2} \frac{2n+2k+2}{n+1}} + e^{i \frac{m\pi}{2} \frac{2n-2k}{n+1}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n+1} e^{im\pi \frac{k}{n+1}} = \frac{1 - e^{i2m\pi}}{2(1 - e^{i \frac{m\pi}{n+1}})} = 0. \end{aligned}$$

Der Quadraturfehler lässt sich für hinreichend differenzierbares f mit Hilfe des Interpolationsfehlers darstellen.

4.2.6 Satz: Fehlerformel

Die Gauß-Formel $I_n^{(w)}$, deren Knoten die Nullstellen des Orthogonal-Polynoms \tilde{p}_{n+1} in Satz 3.3.14 sind, erfüllt die Fehlerformel

$$\int_{-1}^1 f(x)w(x) dx - I_n^{(w)}(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \|\tilde{p}_{n+1}\|_w^2$$

für alle $f \in C^{2n+2}[-1, 1]$.

a) Für das Standardgewicht $w(x) = 1$ erhalten wir

$$\int_{-1}^1 f(x) dx - I_n^{(w)}(f) = \frac{2^{2n+3}((n+1)!)^4}{[(2n+2)!]^3(2n+3)} f^{(2n+2)}(\xi), \quad \text{mit } \xi \in [-1, 1].$$

b) Für das Tschebyscheff-Gewicht $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ erhalten wir

$$\int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} - I_n^{(w)}(f) = \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi), \quad \text{mit } \xi \in [-1, 1].$$

Beweis: Die Knoten x_0, \dots, x_n sind die Nullstellen des Orthogonalpolynoms \tilde{p}_{n+1} .

1. Zuerst bestimmen wir eine weitere Darstellung der Gauß-Quadraturformel

$$I_n^{(w)}(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k).$$

Wir betrachten die *Hermite-Quadraturformel*

$$J_n(f) = \sum_{k=0}^n (\alpha_k f(x_k) + \beta_k f'(x_k)),$$

bei der sowohl Funktionswerte als auch Ableitungswerte von f verwendet werden. Die Gewichte α_k, β_k der Q.f. J_n bestimmt man so, dass sie exakt ist für alle Polynome in \mathcal{P}_{2n+1} . Dazu verwendet man die *Hermite-Grundpolynome* zu den *doppelten* Knoten x_0, \dots, x_n : dies sind Polynome $H_{n,k}, \tilde{H}_{n,k} \in \mathcal{P}_{2n+1}$ mit

$$\begin{aligned} H_{n,k}(x_j) &= \delta_{k,j}, & \tilde{H}_{n,k}(x_j) &= 0, \\ H'_{n,k}(x_j) &= 0, & \tilde{H}'_{n,k}(x_j) &= \delta_{k,j} \end{aligned}$$

für $0 \leq j, k \leq n$. (Vgl. Übungsblatt 7 zum Fall $n = 1$.) Das Hermite-Interpolationspolynom zu $f \in C^1[-1, 1]$ ist

$$p_f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) H_{n,k}(x) + \sum_{k=0}^n f'(x_k) \tilde{H}_{n,k}(x).$$

Die Gewichte

$$\alpha_k = \int_{-1}^1 H_{n,k}(x)w(x) dx, \quad \beta_k = \int_{-1}^1 \tilde{H}_{n,k}(x)w(x) dx$$

ergeben den Exaktheitsgrad $2n+1$, analog zu (4.1). Die hier definierten Gewichte sind nicht neu: weil die Gauß-Q.f. $I_n^{(w)}$ ebenfalls exakt für alle Polynome vom Grad $2n+1$ ist, gilt nämlich

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \int_{-1}^1 H_{n,k}(x)w(x) dx = I_n^{(w)}(H_{n,k}) = \omega_k, \\ \beta_k &= \int_{-1}^1 \tilde{H}_{n,k}(x)w(x) dx = I_n^{(w)}(\tilde{H}_{n,k}) = 0. \end{aligned}$$

Also sind $I_n^{(w)}$ und J_n die gleichen Quadraturformeln, die Konstruktion von $I_n^{(w)}$ mit Hilfe der Hermite-Grundpolynome beschreibt nur eine weitere Perspektive!

2. Nun wird der Quadraturfehler mit Hilfe des Newton-Restglieds der Interpolation bestimmt (vgl. Satz 3.1.11). Mit dem erweiterten Knotenvektor $(x_0, x_0, x_1, x_1, \dots, x_n, x_n)$ der Hermite-Interpolation ist

$$\int_{-1}^1 f(x)w(x) dx - I_n^{(w)}(f) = \int_{-1}^1 (f(x) - p_f(x))w(x) dx = \int_{-1}^1 f[x_0, x_0, \dots, x_n, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 w(x) dx.$$

Man beachte hierbei, dass das Knotenpolynom zu den *doppelten* Knoten gebildet wird, es ergibt sich das Polynom $\tilde{p}_{n+1}^2(x) \geq 0$ ohne Vorzeichenwechsel in $[a, b]$. Der 2. Mittelwertsatz der Integralrechnung liefert

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x)w(x) dx - I_n^{(w)}(f) &= f[x_0, x_0, \dots, x_n, x_n, \eta] \int_{-1}^1 \tilde{p}_{n+1}^2(x)w(x) dx \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \|\tilde{p}_{n+1}\|_w^2 \end{aligned}$$

mit Punkten $\eta, \xi \in [-1, 1]$. Dabei wurde die Darstellung der dividierten Differenz der Ordnung $2n+2$ mit Hilfe der $2n+2$ -ten Ableitung in 3.1.14(c) verwendet.

3. Für die Spezialfälle $w(x) = 1$ und $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ erhält man die Norm des Orthogonalpolynoms \tilde{p}_{n+1} dadurch, dass das entsprechende Legendre- bzw. Tschebyscheff-Polynom auf den Höchstkoeffizienten 1 normalisiert wird, also

$$\begin{aligned} \|\tilde{p}_{n+1}\|_w^2 = \|L_{n+1}\|_w^2 &= \frac{((n+1)!)^4}{((2n+2)!)^2} \frac{2^{2n+3}}{2n+3} \quad \text{für } w(x) = 1, \\ \|\tilde{p}_{n+1}\|_w^2 = \|2^{-n}T_{n+1}\|_w^2 &= \frac{\pi}{2^{2n+1}} \quad \text{für } w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}. \end{aligned}$$

4.2.7 Bemerkung zur Koordinatentransformation:

Die Gauß-Formel für $\int_a^b f(x) dx$ (mit dem Standardgewicht $w(x) = 1$) erhält man durch die Koordinatentransformation in Bemerkung 3.3.16

$$y = \frac{2x - a - b}{b - a} \in [-1, 1], \quad x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot y \in [a, b].$$

Dies ergibt die Knoten

$$x_k = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot y_k \quad (y_k = \text{Nullstelle des Legendre-Polynoms } L_{n+1} \text{ in } [-1, 1])$$

und die Gewichte

$$\eta_k = \frac{b-a}{2} \omega_k.$$

4.2.8 Beispiel: Für $\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0.693147\dots$ ergeben die auf das Intervall $[1, 2]$ transformierten Gauß-Formeln mit 2 bzw. 3 Knoten (Standardgewicht $w(x) = 1$, Integrand $f(x) = \frac{1}{x}$)

$$\begin{aligned} I_1^{(w)}(f) &= \frac{1}{2} \left(f\left(\frac{3}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) + f\left(\frac{3}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) \right) = 0.692308 \\ I_2^{(w)}(f) &= \frac{1}{18} \left(5f\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + 8f\left(\frac{3}{2}\right) + 5f\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}\right) \right) = 0.693122. \end{aligned}$$

Die Positivität der Gewichte der Gauß-Formeln bewirkt, dass die Operator-Norm von $I_n^{(w)}$ auf $C[-1, 1]$

$$\|I_n\|_{\text{op}} = \sup\{|I_n f| : f \in C[-1, 1], \|f\|_{\infty} = 1\}$$

unabhängig von $n \in \mathbb{N}_0$ den Wert

$$\|I_n\|_{\text{op}} = \sum_{k=0}^n \omega_k = \int_{-1}^1 w(x) dx$$

hat. Daraus resultiert eine wichtige Folgerung.

4.2.9 Satz: Konvergenz der Gauß-Formeln

Für die Gauß-Formel I_n mit $n + 1$ Knoten zum gewichteten Integral $\int_{-1}^1 f(x) w(x) dx$ und jede Funktion $f \in C[-1, 1]$ gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(f) = \int_{-1}^1 f(x) w(x) dx.$$

4.3 Intervallteilung, Romber-Verfahren

Durch Aufteilen des Intervalls $[a, b]$ in N gleiche Teile $[y_{k-1}, y_k]$ mit

$$y_k = a + k \cdot \frac{b-a}{N}, \quad k = 0, 1, \dots, N,$$

entstehen die *zusammengesetzten* oder *summierten* Quadraturformeln:

a') *summierte Mittelpunktsregel* $I_{0,N}(f) = \frac{b-a}{N} \sum_{k=1}^N f(z_k),$

dabei sind $z_k = \frac{y_{k-1} + y_k}{2}$, $1 \leq k \leq N$, die Mittelpunkte der Teilintervalle.

b') *summierte Trapezregel* $I_{1,N}(f) = \frac{b-a}{2N} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(y_k) \right)$

c') *summierte Simpsonregel* $I_{2,N}(f) = \frac{b-a}{6N} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(y_k) + 4 \sum_{k=1}^N f(z_k) \right)$

Für die summierte Trapezregel steht in Matlab der Befehl `trapz` zur Verfügung; mit `quad` wird eine summierte Simpsonregel in allgemeinerer Form verwendet, die das Intervall $[a, b]$ ungleichmäßig aufteilt.

Analoges Vorgehen liefert die summierten Gauß-Quadraturformeln $I_{n,N}^{(w)}$. Hierbei sind die Knoten und Gewichte auf das jeweilige Teilintervall umzurechnen.

Es ist eine einfache Übung, die Quadraturfehler der summierten Formeln anzugeben. Bei Aufteilung in N Teilintervalle gleicher Länge $h = \frac{b-a}{N}$ hat der Quadraturfehler der summierten Q.f. für geeignetes $m \in \mathbb{N}$ die Form

$$R_n(f) = c_m h^{m+2} \sum_{j=1}^N f^{(m+1)}(\xi_j).$$

Hierbei ist die Konstante c_m für passendes m in Korollar 4.1.8 angegeben und die Stelle ξ_j liegt im Intervall $[y_{j-1}, y_j]$. Der Zwischenwertsatz für die stetige Funktion $f^{(m+1)}$ sichert die Existenz von $\eta \in [a, b]$ mit

$$f^{(m+1)}(\eta) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f^{(m+1)}(\xi_j),$$

weil rechts das arithmetische Mittel von N Funktionswerten steht, also ein Wert zwischen dem Maximum und dem Minimum von $f^{(m+1)}$. Daraus erhalten wir das folgende Korollar.

4.3.1 Korollar

Für die summierten Quadraturformeln (Aufteilung von $[a, b]$ in N Teilintervalle der Länge $h = (b-a)/N$) gelten die folgenden Aussagen (mit geeignetem $\xi \in [a, b]$):

a') *summierte Mittelpunktsregel:*

$$\int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{N} \sum_{k=1}^N f(z_k) = \frac{(b-a)h^2}{24} f''(\xi)$$

b') *summierte Trapezregel:*

$$\int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{2N} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(y_k) \right) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi)$$

c') *summierte Simpsonregel:*

$$\int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{6N} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(y_k) + 4 \sum_{k=1}^N f(z_k) \right) = -\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

4.3.2 Beispiel: Zur Berechnung von $\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0.693147\dots$ verwenden wir die Mittelpunkts-, Trapez-, Simpsonregel und die 2- und 3-punktigen Gaußformeln zum Standardgewicht $w(x) = 1$ sowie die summierten Regeln mit $N = 2$ und $N = 4$ Teilintervallen der Länge $h = 1/N$:

N	1	2	4
Trapezregel	0.75	0.708333	0.697024
Mittelpunktsregel	0.66	0.685714	0.691220
Simpsonregel	0.6944	0.693254	0.693154
2-punkt. Gauß-Formel	0.692308	0.693077	
3-punkt. Gauß-Formel	0.693122	0.693146	

Die Simpsonregel mit $N = 4$ Teilintervallen liefert 4 Nachkommastellen und erfordert die Auswertung des Integranden an 9 Stellen, die 3-punkt. Gauß-Formel mit $N = 2$ Teilintervallen liefert bereits 5 Nachkommastellen und benötigt nur 6 Auswertungen.

In Anwendungen wird oft eine *Fehlertoleranz* $\epsilon > 0$ vorgegeben. Dann muss die Anzahl N der Teilintervalle so bestimmt werden, dass die summierte Quadraturformel die Fehlertoleranz nicht überschreitet.

4.3.3 Beispiel: Wie groß muss N für die Aufteilung in Teilintervalle der Länge $h = (b-a)/N$ gewählt sein, damit die Berechnung von $\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0.693147\dots$ mit der Fehlertoleranz $\epsilon = 10^{-6}$ erfolgt:

$$f(x) = \frac{1}{x}, \quad f'(x) = -\frac{1}{x^2}, \quad f''(x) = \frac{2}{x^3}, \quad f'''(x) = -\frac{6}{x^4}, \quad f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}.$$

In den Fehlerdarstellungen verwenden wir

$$\max_{\xi \in [1,2]} |f''(\xi)| = 2, \quad \max_{\xi \in [1,2]} |f^{(4)}(\xi)| = 24.$$

- summierte Trapezregel: $\frac{(b-a)h^2}{12} |f''(\xi)| \leq \frac{1}{6N^2} < 10^{-6}$ gilt für $N > \sqrt{10^6/6}$, also $N \geq 409$. Dafür sind $N+1 = 410$ Auswertungen von f erforderlich.
- summierte Mittelpunktsregel: $\frac{(b-a)h^2}{24} |f''(\xi)| \leq \frac{1}{12N^2} < 10^{-6}$ gilt für $N > \sqrt{10^6/12}$, also $N \geq 289$. Dafür sind $N = 289$ Auswertungen von f erforderlich.
- summierte Simpsonregel: $\frac{(b-a)h^4}{2880} |f^{(4)}(\xi)| \leq \frac{1}{120N^4} < 10^{-6}$ gilt für $N > \sqrt[4]{10^6/120}$, also $N \geq 10$. Dafür sind $2N+1 = 21$ Auswertungen von f erforderlich.

Die Verwendung der summierten Trapezregel zu *verschiedenen* Schrittweiten wird als Ausgangspunkt zur *Schrittweiten-Extrapolation nach Romberg* verwendet. Dazu werden wir zuerst beweisen, dass der Quadratur-Wert

$$a(h) = I_{1,N}(f) \quad \text{mit} \quad h = (b-a)/N$$

in vielen Fällen die Voraussetzungen von Satz 3.2.2 mit

$$a_0 = \int_a^b f(x) dx \quad \text{und dem Parameter } q = 2$$

erfüllt. Dies ist die Aussage des folgenden Satzes.

4.3.4 Hauptsatz: Entwicklung des Quadraturfehlers nach h -Potenzen

Für $f \in C^{2m+2}[a, b]$ und $N \in \mathbb{N}$, $h = (b-a)/N$, sei

$$a(h) = I_{1,N}(f) = \frac{h}{2}f(a) + h \sum_{j=1}^{N-1} f(a+jh) + \frac{h}{2}f(b).$$

Es gilt die *Euler-Maclaurinsche Summenformel*

$$\begin{aligned} a(h) &= \int_a^b f(x) dx + \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k} h^{2k}}{(2k)!} (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)) + \\ &\quad (b-a) \frac{B_{2m+2} h^{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi) \end{aligned}$$

mit einem $\xi \in [a, b]$ und den *Bernoulli-Zahlen* B_{2k} .

Vor der Durchführung des Beweises benötigen wir einige Aussagen zu den Bernoulli-Polynomen.

4.3.5 Definition: Bernoulli-Polynome und Bernoulli-Zahlen

Die Polynome $b_k \in \mathcal{P}_k$, $k \in \mathbb{N}_0$, mit

$$b_0(x) = 1, \quad b'_k(x) = k b_{k-1}(x) \quad \text{und} \quad \int_0^1 b_k(x) dx = 0 \quad \text{für } k \geq 1,$$

heißen *Bernoulli-Polynome*, ihr Funktionswert $B_k := b_k(0)$ heißt *Bernoulli-Zahl*.

Bemerkung zu den Bernoulli-Zahlen:

a) Bernoulli-Zahlen sind

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_5 = 0, \quad B_6 = \frac{1}{42}$$

b) Für $k \in \mathbb{N}$ ist $B_{2k+1} = 0$.

c) Rekursionsformel:

$$B_0 = 1, \quad B_k = - \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k}{j} \frac{B_j}{k-j+1} \quad \text{für } k = 1, 2, \dots$$

d) Die Bernoulli-Zahlen treten vielfach auf, z.B. bei den Reihenwerten

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2k}} = \frac{(-1)^{k-1} \pi^{2k} 2^{2k-1}}{(2k)!} B_{2k}$$

4.3.6 Eigenschaften der Bernoulli-Polynome:

(i) Für $k \geq 2$ ist $b_k(1) = b_k(0) = B_k$, weil $\int_0^1 b'_k(x) dx = k \int_0^1 b_{k-1}(x) dx = 0$ gilt.

(ii) Für $k \in \mathbb{N}_0$ gilt $|B_{2k}| = \max_{x \in [0,1]} |b_{2k}(x)|$.
(ohne Beweis)

(iii) Für $k \geq 0$ ist $b_k(x) = (-1)^k b_k(1-x)$:

Beweis: klar für $k = 0$, per Induktion mit

$$\frac{d}{dx} [b_k - (-1)^k b_k(1-x)]'(x) = k (b_{k-1}(x) - (-1)^{k-1} b_{k-1}(1-x)) = 0,$$

also $b_k - (-1)^k b_k(1-x) = c_k$ mit einer Konstanten $c_k \in \mathbb{R}$ für $k \geq 1$. Man berechnet

$$c_k = \begin{cases} b_k(0) - b_k(1) = 0 & \text{für gerades } k \geq 2 \text{ wegen (i),} \\ \int_0^1 (b_k(x) + b_k(1-x)) dx = 0 & \text{für ungerades } k \geq 1 \text{ wegen } \int_0^1 b_k(x) dx = 0. \end{cases}$$

(iv) Die Bernoulli-Polynome können mit Hilfe ihrer *erzeugenden Funktion* definiert werden:

$$\frac{te^{xt}}{e^t - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{b_k(x)}{k!} t^k, \quad x \in \mathbb{R}, \quad 0 < |t| < 2\pi.$$

Mit dieser Darstellung lassen sich die meisten Eigenschaften der b_k beweisen, indem man einen Koeffizientenvergleich für Potenzreihen verwendet. Ebenso folgt hiermit die Rekursionsformel der B_k .

(Übungsaufgabe)

(v) Einsetzen von $x = 0$ ergibt die erzeugende Funktion der Bernoulli-Zahlen

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} t^k, \quad 0 < |t| < 2\pi.$$

Beweis von Satz 4.3.4: Für $f \in C^{2m+2}([0, N])$ folgt durch partielle Integration

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x+\ell) dx &= \int_0^1 b_0(x) f(x+\ell) dx \\ &= \frac{1}{2} (f(\ell) + f(\ell+1)) - \int_0^1 b_1(x) f'(x+\ell) dx \\ &= \frac{1}{2} (f(\ell) + f(\ell+1)) - \frac{B_2}{2} (f'(\ell+1) - f'(\ell)) + \int_0^1 \frac{b_2(x)}{2} f''(x+\ell) dx \\ &\vdots \\ &= \frac{1}{2} (f(\ell) + f(\ell+1)) - \sum_{k=1}^{m+1} \frac{B_{2k}}{(2k)!} (f^{(2k-1)}(\ell+1) - f^{(2k-1)}(\ell)) + \\ &\quad \int_0^1 \frac{b_{2m+2}(x)}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(x+\ell) dx. \end{aligned}$$

Hierbei wurde $b_k(1) = b_k(0) = B_k$ und $B_{2k+1} = 0$ für $k \geq 1$ benutzt.

Der letzte Summand zusammen mit dem letzten Integral ergibt

$$\int_0^1 \underbrace{\frac{b_{2m+2}(x) - B_{2m+2}}{(2m+2)!}}_{\text{festes Vorzeichen wg. 4.3.6(ii)}} f^{(2m+2)}(x + \ell) dx.$$

Beim Zusammensetzen der Integrale von 0 bis N fallen einige Summanden wie bei einer Teleskopsumme weg. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \int_0^N f(x) dx &= \frac{1}{2} (f(N) + f(0)) + \sum_{j=1}^{N-1} f(j) - \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left(f^{(2k-1)}(N) - f^{(2k-1)}(0) \right) + \\ &\quad \int_0^N \frac{\tilde{b}_{2m+2}(x) - B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(x) dx. \end{aligned}$$

Dabei ist \tilde{b}_{2m+2} die periodische Fortsetzung von b_{2m+2} vom Intervall $[0, 1]$ auf $[0, N]$, die Differenz $\tilde{b}_{2m+2}(x) - B_{2m+2}$ hat also festes Vorzeichen auf $[0, N]$. Mit dem erweiterten Mittelwertsatz folgt

$$\begin{aligned} \int_0^N \frac{\tilde{b}_{2m+2}(x) - B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(x) dx &= f^{(2m+2)}(\xi) \int_0^N \frac{\tilde{b}_{2m+2}(x) - B_{2m+2}}{(2m+2)!} dx \\ &= -\frac{NB_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi) \end{aligned}$$

mit $\xi \in [0, N]$.

Die Aussage von Satz 4.3.4 folgt durch Koordinatentransformation von $[0, N]$ auf $[a, b]$.

Direkte Anwendung des Extrapolationssatzes 3.2.2 mit dem Parameter $q = 2$ (nur gerade h -Potenzen) liefert das Romberg-Verfahren zur Integration.

4.3.7 Satz: Romberg-Verfahren

Gegeben seien $f \in C^{2m+2}[a, b]$ sowie eine monoton wachsende Folge $(N_j)_{j \in \mathbb{N}_0}$ natürlicher Zahlen mit

$$0 < \frac{N_j}{N_{j+1}} \leq \rho < 1, \quad j \in \mathbb{N}_0.$$

Zu den Werten der summierten Trapezregel

$$a_{j,0} = a(h_j) = I_{1,N_j}(f), \quad h_j = \frac{b-a}{N_j},$$

lauten die Einträge der Extrapolationstafel (nach Romberg)

$$a_{j,k} = a_{j,k-1} + \frac{a_{j,k-1} - a_{j-1,k-1}}{\left(\frac{h_{j-k}}{h_j}\right)^2 - 1}, \quad k = 1, \dots, m, \quad j = k, \dots, m.$$

Für $0 \leq k \leq m$ gilt

$$\int_a^b f(x) dx - a_{j,k} = \mathcal{O}(h_{j-k}^{2k+2}) \quad \text{für } k \leq j \rightarrow \infty.$$

Speziell für die Schrittweithalbierung $h_j = 2^{-j}h_0$ gilt also

$$\int_a^b f(x) dx - a_{j,k} = \mathcal{O}(h_0^{2k+2} 2^{-(2k+2)(j-k)}) \quad \text{für } k \leq j \rightarrow \infty.$$

4.3.8 ACHTUNG: keine Verbesserung für periodische Funktionen

Für **periodische** Funktionen $f \in C^{2m+2}(\mathbb{R})$ mit Periodenlänge $b - a$ fällt die summierte Trapezregel zur Schrittweite $h = (b - a)/N$ mit der Rechteckregel zusammen:

$$I_{1,N}(f) = \frac{h}{2}f(a) + h \sum_{j=1}^{N-1} f(a + jh) + \frac{h}{2}f(b) = h \sum_{j=0}^{N-1} f(a + jh).$$

Außerdem fallen die Terme $f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) = 0$ in der Euler-Maclaurinschen Summenformel weg, d.h.

$$a(h) = h \sum_{j=0}^{N-1} f(a + jh) = \int_a^b f(x) dx + \mathcal{O}(h^{2m+2}).$$

Die Extrapolation führt hier zu keiner Verbesserung.

Ist sogar $f \in C^\infty(\mathbb{R})$ periodisch mit Periodenlänge $b - a$, so konvergiert die Rechteckregel zur Schrittweite h schneller gegen $\int_a^b f(x) dx$ als jede Potenz von h . Die Verwendung komplizierterer Quadraturformeln wäre hierfür eher schädlich!

4.4 Praktische Aspekte der Integration

Ziel in diesem Abschnitt ist es, Kriterien für die Wahl der Schrittweite der zusammengesetzten Quadraturformeln zum Erzielen der Genauigkeit ϵ zu erhalten.

- Die *a priori*-Berechnung durch Verwendung der Fehlerformeln verlangt Kenntnisse einer hohen Ableitung von f . Dies ist für praktische Zwecke nicht sinnvoll.
- Typ 1: Verwendung zweier Formeln zur *Einschließung* des Integralwerts.
- Typ 2: Verwendung zweier Schrittweiten zur numerischen *a posteriori*-Schätzung des Fehlers, ähnlich zur Einschließung bei der Extrapolation.

4.4.1 Typ 1: Einschließung des Integralwerts

Die summierte Simpson-Regel zu N Unterteilungen, $h = (b - a)/N$, hat die Fehlerformel

$$\int_a^b f(x) dx - I_{2,N}(f) = -\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{(4)}(\xi) \quad \text{mit } \xi \in [a, b].$$

Die summierte Form der offenen Newton-Cotes Formel (mit 3 Knoten pro Intervall) lautet

$$\tilde{I}_{2,N}(f) = \frac{b-a}{3N} \sum_{k=0}^{N-1} (2f(y_k + h/4) - f(y_k + h/2) + 2f(y_k + 3h/4)), \quad y_k = a + kh,$$

und hat die Fehlerformel

$$\int_a^b f(x) dx - \tilde{I}_{2,N}(f) = \frac{7(b-a)h^4}{23040} f^{(4)}(\xi) \quad \text{mit } \xi \in [a, b].$$

Vergleich der beiden Fehlerterme zeigt, dass bei konstantem Vorzeichen von $f^{(4)}$ im Intervall $[a, b]$ der exakte Wert durch beide Quadraturformeln eingeschlossen wird, also

$$\tilde{I}_{2,N}(f) \leq \int_a^b f(x) dx \leq I_{2,N}(f) \quad \text{oder} \quad I_{2,N}(f) \leq \int_a^b f(x) dx \leq \tilde{I}_{2,N}(f)$$

gilt.

Die Voraussetzung an $f^{(4)}$ ist i.A. nicht für $[a, b]$ erfüllt, jedoch für (fast) alle Teilintervalle. Als numerische Einschließung kann man daher

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} \min\{I_2(f; [y_k, y_{k+1}]), \tilde{I}_2(f; [y_k, y_{k+1}])\} &\leq \int_a^b f(x) dx \\ &\leq \sum_{k=0}^{N-1} \max\{I_2(f; [y_k, y_{k+1}]), \tilde{I}_2(f; [y_k, y_{k+1}])\} \end{aligned}$$

verwenden.

4.4.2 Typ 2: a-posteriori Fehlerschätzung

- Es wird die Fehlerdarstellung der summierten Quadraturformel zur Schrittweite $h = (b-a)/N$ in der Form

$$\int_a^b f(x) dx - I_{n,N}(f) = c_f h^k + r(f, h) h^{k+1}$$

mit einer Konstanten c_f und einer beschränkten Funktion $r(f, \cdot)$ vorausgesetzt.

- Es stehen zwei Werte $I_{n,N_1}(f)$ und $I_{n,N_2}(f)$ zu den Schrittweiten $h_1 > h_2 > 0$, $h_j = (b-a)/N_j$, $j = 1, 2$, zur Verfügung.

Dann kann die Konstante c_f geschätzt werden durch Lösen von

$$c_f(h_1^k - h_2^k) = -(I_{n,N_1}(f) - I_{n,N_2}(f)) + \mathcal{O}(h_1^{k+1}).$$

Für $h_1 \ll 1$ folgt

$$c_f \approx -\frac{I_{n,N_1}(f) - I_{n,N_2}(f)}{h_1^k - h_2^k}.$$

Die "richtige" Schrittweite h für die vorgegebene Toleranz ϵ ist nun

$$h = (\epsilon/c_f)^{1/k}.$$

4.4.3 Praktischer Aspekt: adaptive Unterteilung

- Bei den summierten Quadraturformeln zur Schrittweite $h = (b-a)/N$ treten in den Teilintervallen ganz unterschiedliche Fehlergrößen auf: $f(x) = \sqrt{|x-0.7|}$ ist bei $x = 0.7$ nicht differenzierbar, zu erwarten sind große Fehler in diesem Abschnitt.
- Daher wird die Schrittweite nicht überall halbiert, sondern nur in Intervallen $[y_k, y_{k+1}]$, wo ein Fehlerschätzer signalisiert, dass

$$\left| \int_{y_k}^{y_{k+1}} f(x) dx - I_n(f, [y_k, y_{k+1}]) \right| > \frac{\epsilon(y_{k+1} - y_k)}{(b-a)}$$

gilt. Dadurch entsteht eine *adaptive Unterteilung* von $[a, b]$, wie sie z.B. bei den Matlab-Befehlen `quad` und `integral` vorgenommen wird.

4.4.4 Beispiel: Der Matlab/Octave Befehl `quad` verwendet eine adaptive summierte Simpson-Regel. Die Integration

$$\int_0^1 \sqrt{|x - 0.7|} dx$$

zur Genauigkeit $\epsilon = 10^{-4}$ und Ausgabe der einzelnen Unterteilungsintervalle (mit Hilfe der `trace`-Variablen) lautet

```
f=inline('sqrt(abs(x-0.7))');
trace=1;
q=quad(f,0,1,1e-4,trace)
```

Die alte Matlab-Version R12 verwendet adaptive Halbierung des Intervalls $[0, 1]$ und erhält die Zwischenpunkte

$$(y_0 = 0), y_1 = 0.5, y_2 = 0.625, y_3 = 0.6875, y_4 = 0.75, (y_5 = 1)$$

(→ Baumstruktur der Unterteilung). Die neue Version (Matlab R2012) verwendet eine willkürliche Anfangs-Unterteilung in 3 Teilintervalle

$$[a, a + 0.27158(b - a)], [a + 0.27158(b - a), b - 0.27158(b - a)], [b - 0.27158(b - a), b]$$

und beginnt dann mit adaptiver Halbierung.

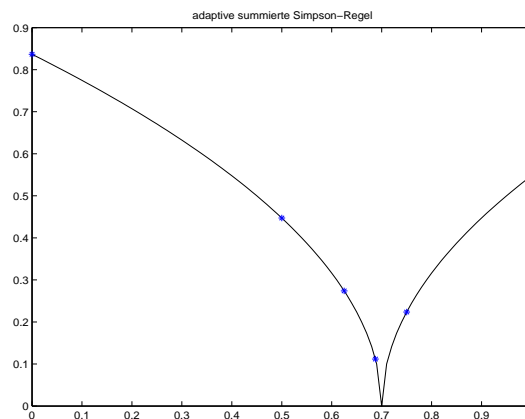


Abbildung 4.1: Adaptive Unterteilung bei summierter Simpson-Regel für $\int_0^1 \sqrt{|x - 0.7|} dx$