# 1 Numerische Integration

Berechnung von Integralen, z.B. zur Flächen- oder Volumenberechnung, aber auch notwendig in komplexeren Formeln/Algorithmen, z.B. Fourier-Integrale, Numerik partieller-Differentialgleichungen. Oft nicht (leicht) von Hand zu berechnen, $\Rightarrow$ Algorithmen zur näherungsweisen Berechnung von Integralen.
Viele typiche "Quadraturformeln" haben für $f \in C[a,b]$ die Form

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^n x_i f(x_i),$$

d.h. Kombination von Punktauswertungen mit Stützstellen $a \leq x_0 < x_1 \dots x_n \leq b$

**Erinnerung/Beispiel** (Rieman-Integral).
z.B. Rieman-Summe

$$I_h(f) := \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1})$$

$f$ Rieman-Integrierbar $\rightsquigarrow I_h(f) \to I(f)$ für $h \to 0,\ h := \max(x_i - x_{i-1})$

## 1.1 Interpolatorische Quadraturformel

Kennt man eine Polynom-Interpolation von $f$, (oder Hermite-), kann man statt $f$ einfach die Interpolierende integrieren. Integration über Polynome ist einfach.
Zu $a \leq x_0 < x_1 \cdots < x_n \leq b$ sei $P_n \in \mathbb{P}_n$ das interpolierende Polynom zu $f$ mit $P_n(x_i) = f(x_i), i = 0, \dots, n$
setze dann

$$I^{(n)}(f) := \int_a^b P_n(x)\,dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)\,dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx$$

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$

Wie groß ist der Fehler $I(f) - I^{(n)}$?
Mit der Formel fürden Interpolationen Fehler folgt:

**Satz 1.1.** Für die Lagrange-Quadraturformel $I^{(n)}$ gilt, falls $f \in C^{n+1}[a,b]$:

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_a^b f(x) - p_n(x) dx = \int_a^b \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1}(\xi_x) \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx$$

also

$$\left| I(f) - I^{(n)}(f) \right| \leq \frac{1}{(n+1)!} \cdot \max_{[a,b]} \left| f^{(n+1)} \right| \cdot \left| \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx \right|$$

**Bemerkung 1.2.** man kann auch zeigen:

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_a^b f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x - x - j) dx$$

Interpolatorische Integrationsformeln, $I^{(n)}(f) := \int_a^b p_n(x)\,\mathrm{d}x$, $p_n \in \mathbb{P}$ des Interpolationspolynoms zu $f$ in $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ Nach Konstruktion: die interpolierende Quadraturformel ist "exakt" für beliebige Polynome $p \in \mathbb{P}_n$, wegen des Eindeutigkeit der Interpolationspolynoms.

**Definition 1.3.** Eine Quadraturformel $I^{(n)}$ wird (mindestens) "von der Ordnung m" genannt, falls durch sie alle Polynomevom Grad $\leq m - n$ exakt integriert werden.

Damit sind die interpolatorischen Quadraturformeln $I^{(n)}$ mindestens von der Ordnung $n + 1$.

**Beispiel 1.4** (Lagrange-Quadraturen mit n+1 Stützstellen mit gleichen Abständen)**.**

(a) "(abgeschlossene) Newton-Cotes-Formeln":
$a, b$ sind Stützstellen, $x_i = a + ih, \;\; i = 0, \ldots, n$ mit $h = \frac{b-a}{n}$

(b) "offene Newton-Cotes-Formeln:
$a, b$ sind keine Stützstellen, $x_i = a + (i + 1)h, \;\; i = 0, \ldots, n, \;\; h = \frac{b-a}{n+2}$

Die ersten Newton-Cotes-Formeln sind:

**abgeschlossen:**

$$\begin{aligned}
I^{(1)} &= \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) && \text{"Trapezregel"} \\
I^{(2)} &= \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{ab}{2}\right) + f(b)\right) && \text{"Keplersche Fassregel"} \\
I^{(3)} &= \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f(a+h) + 3f(b-h) + f(b)\right) && \text{"}\frac{3}{8}\text{-Regel"}
\end{aligned}$$

**offen:**

$$\begin{aligned}
I^{(0)}(f) &:= (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) && \text{"Mittelpunktsregel"} \\
I^{(1)}(f) &:= \frac{b-a}{2}(f(a+h) + f(b-h)) \\
I^{(2)}(f) &:= \frac{b-a}{3}\left(2f(a+h) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 2f(b-h)\right)
\end{aligned}$$

Mit den Interpolationsabschätzungen und Integral-Mittelwertsätzen zeigt man:

**Satz 1.5** (Quadraturfehler Newton-Cotes-Formeln).

i) Für die Trapezregel $I^{(1)}$ mit $f \in C^2[a,b]$ gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi) \text{ mit } \xi \in [a,b]$$

ii) Für die Simpson-Regel $I^{(2)}$ mit $f \in C^4[a,b]$ gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \frac{b-a}{2}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi) \text{ mit } \xi \in [a,b]$$

iii) Für die Mittelpunktformel $I^{(0)}$ mit $f \in C^2[a,b]$ gilt:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - (b-a)f(\frac{a+b}{2} = -\frac{(b-a)^3}{24} f^{(2)}(\xi) \text{ mit } \xi \in [a,b]$$

**Beweis** zu i)

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b p_n(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a^b f(x) - p_n(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_a^b f''(\xi(x)) \cdot \frac{1}{2} \cdot (x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x \\ &= f''(\xi)\frac{1}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3\end{aligned}$$

□

**Bemerkung 1.6.** zu iii) Mittelpunktformel ist exakt nicht nur für $p \in \mathbb{P}_0$ sondern sogar für alle $p \in \mathbb{P}_n$

**Bemerkung 1.7.** Sind neben $f$ auch die Ableitungen $f'(x)$ bekannt, dann kann man auch eine Hermite-Interpolation zur Herleitung von Quadraturformeln nehmen, die Hermite- Interpolationsfehlerabschätzung überträgt sich dann auf die Quadraturfehlerabschätzung.

Um ein Integral besser zu approximieren, wird typicherweise nicht der Polynomgrad weiter erhöht, sondern eine Quadraturformel mit relativ geringen Grad auf Teilintervallen immer kleinerer Größe genutzt:
z.B. $a = y_0 < y_1 < \cdots < y_N = b$ mit Teilintervallen $I_i = [y_{i-1}, y_i]$:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^N \int_{I_i} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \underbrace{\sum_{i=1}^N \int_{I_i} \underbrace{I^{(n)}_{[y_{i-1},y_i]} f}_{\text{Interpolierende}}\ \mathrm{d}x}_{I_h^{(n)}(f)}$$

und

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - I_h^{(n)}(f) &= \sum_{i=1}^N \int_{I_i} f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b \left(I_{[y_{i-1},y_i]}^{(n)} f\right)(x)\,\mathrm{d}x \\
&\le \sum_{i=1}^N c_m \cdot (y_{i-1}-y_i)^{m+1} \left|f^{(m)}(\xi_i)\right| \\
&\le \sum_{i=1}^N c_m h^{m+1} \cdot \left|\left|f^{(m)}\right|\right|_{\max[a,b]} \\
&\le c_m(b-a)\frac{h}{h_{\min}} h^m \cdot \left|\left|f^{(m)}\right|\right|_{\max}
\end{aligned}$$

mit

$$N \le \frac{b-a}{h_{\min}}, \quad \frac{h}{h_{\min}} = 1, \text{ falls alle Teilintervalle gleich lang sind}$$

**Beispiel 1.8.** $y_i = a+ih, \quad h = \frac{b-a}{N}, \quad i = 0,\dots,N$ gleichgroße Teilintervalle.
Summierte Trapezregel

$$I_h^{(1)}(f) := \frac{h}{2}\left(f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} 2f(y_i) + f(b)\right),$$

$$\left|I(f) - I_h^{(1)}(f)\right| \le \frac{b-a}{12} h^2 \left|\left|f^{(2)}\right|\right|_{\max[a,b]}$$

Summierte Simpsonregel:

$$I_h^{(2)}(f) := \frac{h}{6}\left(f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} 2f(y_i) + \sum_{i=1}^{N} 4f\left(\frac{y_{i-1}+y_i}{2} + f(b)\right)\right),$$

$$\left|I(f) - I_h^{(2)}(f)\right| \le \frac{b-a}{2880} h^4 \left|\left|f^{(4)}\right|\right|_{\max}$$

Summierte Mittelpunktregel:

$$I_h^{(0)}(f) := h\sum_{i=1}^N f\left(\frac{y_{i-1}+y_i}{2}\right),$$

$$\left|I(f) - I_h^{(0)}(f)\right| \le \frac{b-a}{24} h^2 \left|\left|f^{(2)}\right|\right|_{\max}$$

**Bemerkung 1.9.** Ähnlich geht es für Hermite-Splines, d.h. lokale Hermite-Interpolierende

**Motivation.** Mittelpunktsregel und Simpson-Regel sind von höherer Ordnung als man es durch den Polynomgrad alleine erwarten würde, anscheinend allein durch die geschickte Wahl der Stützstellen.

**Frage.** Wie gut kann man werden bei optimaler Wahl der Stützstellen?

## 1.2 Gauß-Quadraturformeln

Man sieht leicht, dass die Maximale Ordnung einer interpolierenden Quadraturformel nach oben begrenzt ist

**Lemma 1.10.** Eine obere Grenzen für die Ordnung einer interpol. Quadraturformel $I^{(n)}$ mit $n+1$ Sützstellen ist $2n+2$

**Beweis** Wäre Ordnung höher, könnte man alle Polynome vom Grad $2n+2$ exakt integrieren. Für das Polynom

$$p(x) := \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2 \in \mathbb{P}_{2n+2}$$

gilt

$$\forall i = 0, \ldots, n : p(x_i) = 0$$

also

$$I^{(n)}(p) = 0$$

da

$$I^{(n)}(p) = \sum_{j=0}^{n} w_i p(x_i)$$

aber

$$\forall x : p(x) \geq 0, \text{ also } p \not\equiv 0$$

demnach

$$\int_a^b p(x)\, \mathrm{d}x > 0`$$

□

Man kann bei geschickter Wahl der Stützstellen also alle Polynome $p \in \mathbb{P}_{2n+1}$ exakt integrieren. Ein Polynom $p \in \mathbb{P}_{2n+1}$ kann man immer zerlegen in

$$p(x) = r(x) \cdot q(x) + s(x)$$

mit $q \in \mathbb{P}_{n+1}$ fest vorgegeben, $\deg(q) = n+1$, $r, s \in \mathbb{P}_n$. Z.B. für $q(x) = x^{n+1}$:

$$p(x) = \sum_{i=0}^{2n+1} a_i x^i \implies r(x) = \sum_{i=0}^{n} a_{i+n+1} x^i, \quad s(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i^i$$

für eine Wahl $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ wählen wir

$$q(x) := \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \in \mathbb{P}_{n+1}$$

**Frage.** Quadraturformel für $p$?

Es ist

$$\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \underbrace{\int_a^b r(x)q(x)\,\mathrm{d}x}_{I^{(n)}(r\cdot q)+\text{ Rest}} + \underbrace{\int_a^b s(x)\,\mathrm{d}x}_{I^{(n)}(s)}$$

Falls also

$$\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x \overset{!}{=} I^{(n)}(p)$$

sein soll für alle $p \in \mathbb{P}_{2n+1}$, dann muss

$$\int_a^b r(x)q(x)\,\mathrm{d}x = 0 \text{ für alle } r \in \mathbb{P}_n$$

**Frage.** gibt es ein $q \in \mathbb{P}_{n+1}$, bzw

$$x_0 < \dots < x_n \in [a,b], \;\; q(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

so, dass

$$\int_a^b r(x)q(x)\,\mathrm{d}x = 0$$

für alle $r \in \mathbb{P}_n$?

Wir betrachten den Raum $\mathbb{P}_{n+1}$ mit Basis $\left\{1, x, x^2, \dots, x^{n+1}\right\}$ mit Skalarprodukt

$$(r,q) := \int_a^b r(x)q(x)\,\mathrm{d}x \;\text{ für alle } r,q \in \mathbb{P}_{n+1}$$

Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren:

$$p_0(x) := 1, \quad p_n(x) := x^k - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(x^k, p_j)}{(p_j, p_j)} p_j, \quad k = 1, \dots, n+1$$

Also steht $p_{n+1}$ senkrecht auf $\operatorname{span}\{p_0, \dots, p_n\} = \mathbb{P}_n$, d.h.

$$(r, \; p_{n+1}) = 0 \quad \forall r \in \mathbb{P}_n$$

dementsprechend ist $p_{n+1}$ Kandidat für unser Polynom $q$, $q = p_{n+1}$, da die führende Potenz $1 \cdot x^{n+1}$ die gleiche ist. Mann kann zeigen, dass alle $p_k$ jeweils $k$ verschiedene, einzelne Nullstellen hat, damit $q = \mathbb{P}_{n+1}$ gerade Nullstellen $x_i$, $a \le x_0 < \dots < x_n \le b$ hat, und damit

$$q(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

**Satz 1.11** ("Gauß-Quadratur").
Es gibt genau eine interpolatorische Quadraturformel zu $n+1$ paarweise verschiedene Stützstellen über dem Intervall $[-1,1]$ mit der optimalen Ordnung $2n+1$. Die zugehörigen Sützstellen sind die Nullstellen des $(n+1)$-ten Legendrepolynoms $L_{n+1} \in \mathbb{P}_{n+1}$, und die Gewichte sind

$$w_i = \int_{-1}^{1} \prod_{j \neq i} (x - x_j)^2 \,\mathrm{d}x > 0$$

Für $f \in C^{2n+1}[-1,1]$ ist der Quadraturfehler

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) = \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \int_{-1}^{1} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2 \,\mathrm{d}x$$

**Beweis**

**gewichte $\mathbf{w_i}$:** Sei $L_i^{(n)}$ das $i$-te Lagrange-Basispolynom

$$\frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)} \in \mathbb{P}_n$$

$$L_i^{(n)}(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Damit ist $\left(L_i^{(n)}\right)^2 \in \mathbb{P}_{2n}$, und Gauß-Quadraturformel exakt

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} \left(L_i^{(n)}\right)^2 \mathrm{d}x &= \sum_{j=0}^{n} w_j \cdot {L_i^{(n)}}^2(x_j) \\ &= \sum_{j=0}^{n} w_j \cdot \delta_{ij} = w_i \end{aligned}$$

Also ist $w_i > 0$

**Eindeutigkeit:** ergibt sich aus Orthogonalität von $q$ zu $\mathbb{P}_n$, orthogonaler Unterraum ist 1−dimensional, alle Vielfachen eines Polynoms $\neq 0$, damit haben alle Polynome des orthog. Unterraums die gleichen Nullstellen

**Fehlerabschätzung:** Wir nutzen eine Hermite-Interpolation als Hilfsmittel. Zu $f \in C^{2n+2}[-1,1]$ sei $h \in \mathbb{P}_{2n+1}$ die Hermite-Interpolierende zu $f(x_i),\ f'(x_i),\ i = 0, \ldots, n$. Dafür hatten wir die Abschätzung

$$f(x) - h(x) = \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi_x) \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2$$

Damit ist

$$
\begin{aligned}
I(f) - I^{(n)}(f) &= (I(f) - I(h)) - \left( I^n(f) - \underbrace{I(h)}_{I^{(n)}(h)} \right) \\
&= \int_{-1}^{1} f(x) - h(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} w_i \underbrace{(f(x_i) - h(x_i))}_{=0} \\
&= \int_{-1}^{1} \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi_x) \cdot \prod (x - x_i)^2 \,\mathrm{d}x \\
&\overset{\text{MWS}}{=} \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \cdot \prod_{j=0}^{n} (x - x_i)^2
\end{aligned}
$$

□

"Legendre-Polynome":
$L_k(x)$, Orthogonalpolynome bzgl.

$$(r,\ s) = \int_{-1}^{1} r(x)s(x)\,\mathrm{d}x$$

Es ist

$$L_0(x) \equiv 1,\ \ L_1(x) = x,\ \ (k+1)L_{k+1}(x) = (2k+1)x \cdot L_k(x) - kL_{k-1}(x)$$

also

$$L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$$

Eine andere Formel ist

$$L_k(x) = \frac{1}{2^k \cdot k!} \frac{d^k}{dx^k} \left( (x^2 - 1)^k \right)$$

**Bemerkung 1.12.** Analoges Vorgehen bei Integration mit einer Gewichtsfunktion

$$w(x):\ \ I_w(f) := \int_a^b f(x) \cdot w(x)\,\mathrm{d}x$$

Orthogonalisierung bzgl des gewichteten Skalarprodukts

$$(r,\ s)_w := \int_a^b r(x) \cdot s(x) \cdot w(x)\,\mathrm{d}x, \quad w > 0 \text{ fast überall, z.B. stetig}$$

**Beispiel 1.13.** Für $w(x) := \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ auf $[-1, 1]$ ergeben sich als Orthogonalpolynome gerade die Tschebyscheff Polynome $T_k(x)$.
Für $w(x) \equiv 1$: Legendre-Polynome, s.o.

Für Integration auf dem Intervall $[a,b]$: Transformation

$$[-1,1] \to [a,b], \qquad \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + t\frac{b-a}{2}\right)\mathrm{d}t$$

Um Integrale genauer zu berechnen, wird auch bei den Gauß-Formeln nicht unbedingt der Polynomgrad weiter erhöht so, dass wieder eine Summe über kleinere Teilintervalle $I_j, j = 1, \dots, N$ genutzt, $I_j = [y_{j-1}, y_j]$, $a = y_0 < y_n \cdots < y_N = b$ Und für jedes Teilintervall die entsprechend transformierte Quadraturformel. Dafür bekommt man dann eine Fehlerabschätzung

$$\begin{aligned} |I(f) - I_h^n(f)| &= \left| \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=1}^{N} \frac{y_j - y_{j-1}}{2} \cdot \left( \sum_{i=0}^{n} w_i \cdot \tilde{f}_j(x_i) \right) \right| \\ &\leq (b-a) \cdot c \cdot h^{2n+2} \cdot \left|\left| f^{(2n+2)} \right|\right|_{\max[a,b]} \end{aligned}$$

mit $h \coloneqq \max_{j=1,\dots,N}(y_j - y_{j-1})$. Dabei ist $c$ unabhängig von $a, b, h, f$. Bei Halbierung der Teilintervalllängen reduziert sich der Quadraturfehler also um Faktor $\left(\frac{1}{2}\right)^{2n+2}$.

## 2 Richardson-Extrapolation

Eine Idee/Methode, die man auch in anderen Situationen gut und gerne anwenden kann:
Angenommen Berechnungsvorschrift mit Diskretisierungsgröße $h > 0$, $h \searrow 0$ so, dass wir für die Approximation einer Größe $E_0$ eine Entwicklung der berechneten Größe $E(h)$ haben der Form

$$E(h) = E_0 + c_1 h^{k_1} + c_2 h^{k_2} \in \mathcal{O}\left(h^{k_2}\right) \text{ mit } 0 < k_1 < k_2$$

Dann können wir Berechnungen mit zwei verschiedenen qDiskretisierungen $h_1 > h_2 > 0$ durchführen, und mit diesen Ergebnissen die Ordnung $h^{k_1}$ eliminieren
8===================D