Numerik 1 (ohne Beweise)

Prof. Schaedle

April 23, 2019

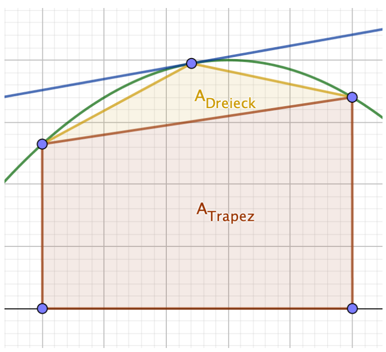
I Numerische Integration

1 Einführung

Problem 1.1.
Gegeben $f : [a,b] \to \mathbb{N}$ *mit* $a, b \in \mathbb{R}$. *Berechne* $\int_a^b f(x)dx$

Beispiel 1.2.

1. *Archimedes (282-212 v.Chr.): Fläche unter einer Parabel*

   $A_{Parabel} = A_{Trapez} + \frac{4}{3} A_{Dreieck}$

2. *Leibniz + Newton (1670):*

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a),$$

   wobei $\frac{d}{dx}F(x) = f(x)$

3. *Riemann (1850):*

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{|\Delta| \to \infty} \sum_{j=1}^{n} f(\xi_j)(x_j - x_{j-1}),$$

   wobei $\Delta = (x_0, ..., x_n)$ *Gitter Zerlegung von* $[a,b]$, $a = x_0 < ... < x_n = b$, $\xi_j \in [x_{j-1}, x_j]$ *und* $|\Delta| := \max_{j=1,...n} |x_j - x_{j-1}|$. *Das Riemannintegral existiert, falls:*

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0 : |\Delta| < \delta \Rightarrow |\int_a^b f(X)dx - \sum_{j=1}^{n} f(\xi_j)(x_j - x_{j-1})| < \varepsilon$$

Bemerkung 1.3 (Approximation von Integralen).

1. *(linke) Rechtecksregel:*

$$\int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+h} f(x)dx \approx hf(x_{j-1})$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^n \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^n f(x_{j-1})(x_j - x_{j-1})$$

2. *Mittelpunktsregel:*

$$\int_{x_j}^{x_j+h} f(x)dx \approx f\left(\frac{x_j + x_j + h}{2}\right) h$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=1}^n f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right)(x_j - x_{j-1})$$

Da mit Hilfe der Transformationsformel sich jedes Integral $\int_{x_{j-1}}^{x_j}$ *auf ein Integral* $\int_a^b$ *transformieren lässt, betrachten wir ohne Einschränkungen Integrale von 0 bis 1. Nutze dazu die Abb.* $[a,b] \to [x_{j-1}, x_j], t \mapsto x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1})$.

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx = \int_0^1 \underbrace{f\left(x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1})\right)}_{:=g_{j-1}(t)}(x_j - x_{j-1})dt = \int_0^1 g_{j-1}(t)(x_j - x_{j-1})dt$$

Definition 1.4 (Quadraturformel).
Eine s-stufige Quadraturformel zur Approximation von $\int_0^1 g(t)dt$ *mit Knoten* c_i *und Gewichten* b_i *für* $i = 1, ...s$ *ist gegeben durch*

$$\sum_{i=1}^s b_i g(c_i) \left(\approx \int_0^1 g(t)dt\right)$$

Beispiel 1.5.

1. *Rechtecksregel:* $s = 1, b_1 = 1, c_1 = 0$

$$\int_0^1 g(t) \approx b_1 g(c_1) = g(0)$$

2. *Mittelpunktsregel:* $s = 1, b_1 = 1, c_1 = \frac{1}{2}$

$$\int_0^1 g(t) \approx g(\frac{1}{2})$$

3. *Trapezregel:* $s = 2, b_1 = b_2 = \frac{1}{2}, c_1 = 0, c_2 = 1$

$$\int_0^1 g(t) \approx \frac{1}{2}g(0) + \frac{1}{2}g(1)$$

4. *Simpsonregel:* $s = 3, b_1 = \frac{1}{6}, b_2 = \frac{2}{3}, b_3 = \frac{1}{6}, c_1 = 0, c_2 = \frac{1}{2}, c_3 = 1$

$$\int_0^1 g(t) \approx \frac{1}{6}\left(g(0) + 4g\left(\frac{1}{2}\right) + g(1)\right)$$

Herleitung: *Man legt eine Parabel p durch die Punkte $(0, g(0)), (\frac{1}{2}, g(\frac{1}{2})), (1, g(1))$ und integriert p von 0 bis 1.*
$p(t) = g(0)(1-t)2(\frac{1}{2}-t) + g(\frac{1}{2})(1-t)4t + g(1)(\frac{1}{2}-t)2t$

$$\Rightarrow \int_0^1 p(t)dt = \frac{1}{6}g(0) + \frac{2}{3}g(\frac{1}{2}) + \frac{1}{6}g(1)$$

5. *"pulcherrima et utilissima regula" von Newton:*

$$\int_0^1 g(t)dt \approx \frac{1}{8}\left(g(0) + 3g(\frac{1}{3}) + 3g(\frac{2}{3}) + g(1)\right)$$

Bemerkung 1.6 (Monte-Carlo Integration)**.**

1. *Eindimensionale Monte-Carlo Integration:*
Sei $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$. Wählt man N unabhängige gleichverteilte Punkte x_i in $[a, b]$ so gilt die Approximation:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(b-a)f(x_j)$$

Nach dem Gesetz der großen Zahlen konvergiert dieser Ausdruck, falls

$$\int_a^b |f(x)|dx < \infty, \int_a^b f^2(x)dx < \infty$$

2. *Mehrdimensionale Monte-Carlo Integration:*
   Sei $W = \otimes_{i=1}^{d}[a_i, b_i]$ *ein d-dimensionaler Quader. Wählt man in W unabh. gleichvert. Zufallsvektoren* x_i *in W, so ist*

$$\int_W f(x)dx \approx \frac{1}{N} Vol(W) \sum_{i=1}^{N} f(x_i),$$

   wobei $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$*.*
   Achtung: *Dieses gewöhnliche MC-Verfahren konvergiert sehr langsam. Verbesserungen sind z.B.: Importance sampling, Control variates, Antithetic variates und statified sampling.*

2 Ordnung von Quadraturformeln

Definition 2.1.
Eine Quadraturformel (QF) mit Gewichten und Knoten $(b_i, c_i)_{i=1}^{s}$ *hat* ***Ordnung p****, falls sie exakt ist für alle Polynome von Grad* $\leq p - 1$*.*
$\mathcal{P}$*: Menge aller Polynome*

$$\left\{ \sum_{i=0}^{n} a_i * X^i, a_i \in \mathbb{R}(\mathbb{C}) \right\}$$

deg(q): Grad des Polynoms

Satz 2.2.
Ein QF $(b_i, c_i)_{i=1}^{s}$ *für* $[0, 1]$ *hat Ordnung p genau dann, wenn*

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q}$$

für $q = 1, .., p$

Beispiel 2.3.

1. *Rechtecksregel:* $p = 1$
2. *Mittelpunktsregel:* $p = 2$
3. *Trapezregel:* $p = 2$

4. *Simpsonregel:* $p \geq 3$ *nach Konstruktion*
   $q = 4$*:* $1/6 * 0^3 + 4/6 * (1/2)^3 + 1/6 * 1^3 = 1/4 = 1/4$
   $q = 5$*:* $1/6 * 0^4 + 4/6 * (1/2)^4 + 1/6 * 1^4 = 5/24 \neq 1/5$
   Damit ist die Ordnung 4!

5. *"pulcherina et utilissima": Übung*

Bemerkung 2.4.
Zu vergebenen paarweise verschiedenen Knoten $c_1, ..., c_s$ *lässt sich aus (*) für* $p = s$ *ein lineares Gleichungssystem für die Gewichte* $b_1, ..., b_s$ *aufstellen.*

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & ... & 1 \\ c_1 & c_2 & ... & c_s \\ ... & ... & ... & ... \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & ... & c_s^{s-1} \end{bmatrix}}_{=V} * \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ ... \\ b_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ ... \\ 1/s \end{bmatrix}$$

Falls die Vandermonde-Matrix V invertierbar ist, so lassen sich die Gewichte $b_1, ..., b_s$ *bestimmen, sodass die QF* $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ *mindestens Ordnung s hat.*

Definition 2.5.
Eine QF heißt symmetrisch, falls für $i = 1, ..., s$

1. $c_i = 1 - c_{s+1-i}$

2. $b_i = b_{s+1-i}$

Beispiel 2.6.
MP, TP, Simpson,...

Satz 2.7.
Die maximal erreichbare Ordnung einer symmetrischen QF ist gerade.

Satz 2.8.
Sind Knoten $c_1 < c_2 < ... < c_s$ $(c_i \in \mathbb{R}, i = 1, ...s)$ *gegeben, so existieren eindeutig bestimmte Gewichte* $b_1, ..., b_s$ *derart, dass die QF* $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ *die maximale Ordnung* $p \geq s$ *hat.*
Es gilt

$$b_i = \int_0^1 l_i(t) dt$$

mit

$$l_i(t) = \frac{\prod_{j=1,j\neq i}^{s}(t-c_j)}{\prod_{j=1,j\neq i}^{s}(c_i-c_j)}$$

Bemerkung/Definition

l_i *ist das i-te Lagrangepolynom zu den Knoten* $c_i, ..., c_s$. *Es gilt* $deg(l_i) = s-1$

$$l_i(c_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$

3 Quadraturfehler

Allgemeine Voraussetzung $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ sei hinreichend oft differenzierbar (f ist eine glatte Funktion)

Definition 3.1.
Der Fehler bei der Approximation des Integrals durch die QF ist

$$err = \int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + h_{j+1}c_i)$$

mit $h_{j+1} = x_{j+1} - x_j$

$$= \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x_j+\tau)d\tau - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + h_{j+1}c_i)$$

$$= \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \int_0^1 g_j(\xi)d\xi - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i g_j(c_i)$$

mit $g_j(\xi) = f(x_j + \xi h_{j+1})$.
Der Quadraturfehler auf Teilintervallen $[x_j, x_j + h_{j+1}]$ *ist*

$$E(f, x_j, h_{j+1}) = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_{j+1})$$

$$= h_{j+1} \left(\int_0^1 g_j(\xi)d\xi - \sum_{i=1}^{s} b_i g_j(c_i) \right)$$

3.2 (Fehlerabschätzung - 1. Versuch)**.**
Falls f auf $[x_0, x_0+h]$ glatt genug ist und die QF Ordnung p hat, aber nicht Ordnung $p+1$, so erhält man durch Taylorentwicklung um x_0 von $f(x_0+\xi h) = g_0(\xi)$ und $f(x_0+c_i h)$:

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \sum_{k \geq 0} \frac{h^{k+1}}{k!} \left(\int_0^1 t^k dt - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^k \right) f^{(k)}(x_0) \\ &= \frac{h^{p+1}}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p \right) f^{(p)}(x_0) + \underbrace{\mathcal{O}(h^{p+2})}_{Taylerrestglied} \end{aligned}$$

Die Konstante $C = \frac{1}{p!}\left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p\right)$ heißt Fehlerkonstante.
Ist h klein genug, sodass das Taylorrestglied im Vergleich zu $h^{p+1} C f^{(p)}(x_0)$ vernachlässigbar ist, so gilt:

$$err = \sum_{j=0}^{n-1} E(f, x_j, h),$$

mit $x_j = x_0 + jh$

$$\begin{aligned} &\approx C h^p \sum_{j=0}^{n-1} h f^{(p)}(x_j) \\ &\approx C h^p \int_a^b f^{(p)}(x) dx \\ &= C h^p \left(f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a) \right) \end{aligned}$$

3.3 (Rigorose Fehlerabschätzung)**.**

Satz 1:
Sei $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ k-mal stetig differenzierbar ($f \in C^k([a,b])$) und habe die QF Ordnung p, so gilt für $h < b-a$ und $k \leq p$

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 K_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau k) d\tau,$$

wobei der Peanokern $K_k(\tau)$ durch

$$K_k(\tau) := \frac{(1-\tau)^k}{k!} - \sum_{i=1}^{s} b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!},$$

mit $(\sigma)_+^{k-1} = \begin{cases} \sigma^{k-1} & \sigma > 0 \\ 0 & sonst \end{cases}$ *, gegeben ist.*

Satz 2: *(Eigenschaften des Peanokerns)*
Für eine QF der Ordnung p gilt für $k \leq p$ $(k, p \in \mathbb{N})$

1. $K_k'(\tau) = -K_{k-1}(\tau)$ *für* $k \geq 2$ *und* $\tau \neq c_i$ *falls* $k = 2$
2. $K_k(1) = 0$ *für* $k \geq 1$*, falls* $c_i \leq 1$ *für* $i = 1, ..., s$
3. $K_k(0) = 0$ *für* $k \geq 2$*, falls* $c_i \leq 1$ *für* $i = 1, ..., s$
4. $\int_0^1 K_p(\tau) = \frac{1}{p!}\left(\frac{1}{p-1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p\right) =: C$ *(Fehlerkonstante C aus (3.2))*
5. $K_1(\tau)$ *ist stückweise linear mit Steigung* -1 *und Sprüngen der Höhe* b_i *an den Stellen* c_i

Beispiel:
Mittelpunktsregel:

$$\begin{aligned} K_1(\tau) &= \frac{(1-\tau)^1}{1!} - 1\frac{(\frac{1}{2}-\tau)_+^1}{0!} \\ &= 1 - \tau - \left(\frac{1}{2} - \tau\right)_+^0 \\ &= \begin{cases} 1 - \tau - 1 & \tau < \frac{1}{2} \\ 1 - \tau & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_2(\tau) &= \frac{(1-\tau)^2}{2!} - 1\frac{(\frac{1}{2}-\tau)_+^1}{1!} \\ &= \frac{1}{2}(1-\tau)^2 - \left(\frac{1}{2} - \tau\right)_+^1 \\ &= \begin{cases} \frac{\tau^2}{2} & \tau < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(1-\tau)^2 & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

Satz 3:
Sei $f \in C^k([a, b])$ *und habe die QF* $(b_i, c_i)_{i=1}^s$*, Ordnung* $p \geq k$*, so gilt für den Fehler* err *aus* (3.1)

$$|err| \leq h^k(b-a)\int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x\in[a,b]} |f^{(k)}(x)|$$

mit $h = \max_{j=1,..,n} h_j$

Beispiele

Für die Mittelpunktsregel (maximale Ordnung = 2) erhält man

$$|err| \leq h^2(b-a)\frac{1}{24}\max_{x\in[a,b]}|f^{(2)}(x)|$$

Für die Trapezregel (maximale Ordnung = 2)

$$|err| \leq h^2(b-a)\frac{1}{12}\max_{x\in[a,b]}|f^{(2)}(x)|$$

Für die Simpsonregel (maximale Ordnung = 4)

$$|err| \leq h^4(b-a)\frac{1}{2880}\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|$$

→ *Der Fehler wird klein, falls* h *klein und die Ordnung* p *groß wird.*

4 Quadratur mit hoher Ordnung

$c_1 < ... < c_s$ Knoten gegeben. Aus §2 wissen wir:
Es gibt Gewichte $b_1, ..., b_s$, sodass $p \leq s$.
Fragen:

- Kann man c_j so wählen, dass $p > s$?
- Wenn ja, wie?
- Wie groß kann p maximal werden?

Ziel: QF mit Ordnung $p = s+m$ für $m \in \mathbb{N}, m > 1$ Sei $g \in \mathcal{P}_{s+m-1}$ (Polynome von Grad $\leq s+m-1$).
g soll durch die QF exakt integriert werden.
Idee: Dividiere g durch $M(t) = \prod_{i=1}^{s}(t-c_i)$ "Knotenpolynom"
$deg(M) = s$
$g(t) = M(t)h(t) + r(t)$ mit Rest r, $deg(r) \leq s-1$ und $deg(h) \leq m-1$
Dann gilt einerseits

$$\int_0^1 g(t)dt = \int_0^1 M(t)h(t)dt + \int_0^1 r(t)dt$$

und andererseits

$$\sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i) = \sum_{i=1}^{s} b_i \underbrace{M(c_i)}_{=0} h(c_i) + \sum_{i=1}^{s} b_i r(c_i)$$
$$= 0 + \int_0^1 r(t)dt,$$

da $p \leq s$
Damit ist gezeigt:

Satz 4.1.
Sei $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ der Ordnung $p \geq s$. Äquivalent sind:

1. *QF hat Ordnung $s + m$*
2. *$\forall h \in (P)_{m-1} : \int_0^1 M(t)h(t)dt = 0$*

Korollar 4.2.
Die Ordnung einer s-stufigen QF ist höchstens $2s$

4.3 (Beispiele/Korollare)**.**

1. *Jede 3-stufige QF mit Ordnung ≥ 4 muss*

$$\int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3)dt = 0$$

$$\int_0^1 t^3 + t^2(-c_1 - c_2 - c_3) + t(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 dt$$
$$= \frac{1}{4} + \frac{1}{3}(-c_1 - c_2 - c_3) + \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3$$

erfüllen, dh

$$c_3 = \frac{\frac{1}{4} - (c_1 + c_2)\frac{1}{3} + c_1c_2\frac{1}{2}}{\frac{1}{3} - (c_2 + c_1)\frac{1}{2} + c_1c_2}$$

2. *Zur Berechnung der Knoten einer 3-stufigen QF der Ordnung 6 verwenden wir (4.2) mit $h(t) = 1, t, t^2$*

$$\int_0^1 M(t)h(t) = 0$$

$h(t) = 1 \to c_1c_2c_3 - \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{3}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{4}$
$h(t) = t \to \frac{1}{2}c_1c_2c_3 - \frac{1}{3}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{4}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{5}$
$h(t) = t^2 \to \frac{1}{3}c_1c_2c_3 - \frac{1}{4}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{5}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{6}$

nichtlineares Gleichungssystem in c_1, c_2, c_3
Trick:

$$\sigma_1 = c_1 + c_2 + c_3$$
$$\sigma_2 = c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3$$
$$\sigma_2 = c_1c_2c_3$$

Das sind die Koeffizienten von $M(t)$ *in der Monombasis.*
$M(t) = (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) = t^3 - \sigma_1 t^2 + \sigma_2 t - \sigma_3$
und das Gleichungssystem ist linear in $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
mit Lösung $\sigma_1 = \frac{3}{2}, \sigma_2 = \frac{3}{5}, \sigma_3 = \frac{1}{20}$
und damit ist $M(t) = t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{3}{5}t - \frac{1}{20}$
$= (t - \frac{1}{2})(t - \frac{5-\sqrt{15}}{10})(t - \frac{5+\sqrt{15}}{10})$
Glücklicherweise sind die Wurzeln von $M(t)$ *in* $[0, 1]$*. Damit lassen sich die Gewichte mit* (2.4) *berechnen und wir erhalten*

$$\int_0^1 g(t)dt = \frac{5}{18} g\left(\frac{5 - \sqrt{15}}{10}\right) + \frac{8}{18} g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{18} g\left(\frac{5 + \sqrt{15}}{10}\right)$$

Ziel: Konstruktion von QF der Ordnung $2s$ *mit Hilfe von orthogonalen Polynomen.*

5 Orthogonalpolynome

Bedingung 2. in Satz (4.1)

$$\forall h \in \mathcal{P}_{m-1} : \int_0^1 M(t)h(t) = 0$$

kann als Orthogonalitätsbedingung bzgl. eines Skalarprodukts $\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(t)g(t)dt$ auf dem Vektorraum $L^2([0, 1])$ oder $C([0, 1])$ aufgefasst werden.
Erinnerung:

$$\mathcal{P}_s := \left\{ \sum_{j=0}^{s} \alpha_j X^j, \alpha_j \in \mathbb{R} \right\}$$

ist ein $\mathbb{R}$-VR mit $dim(\mathcal{P}_s) = s + 1$ und Basis $\{1, X, X^2, ..., X^s\}$

$\langle \cdot, \cdot \rangle : C([0,1]) \times C([0,1]) \to \mathbb{R}, (f, g) \mapsto \int_0^1 f(t)g(t)dt$ ist

1. symmetrisch $\langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle$
2. linear $\langle \alpha f + g, h \rangle = \alpha \langle f, h \rangle + \langle g, h \rangle$
3. positiv definit $\langle f, f \rangle \geq 0$ und $\langle f, f \rangle = 0 \Rightarrow f = 0$

Wie in der linearen Algebra definieren wir f steht senkrecht auf g: $f \perp g \Leftrightarrow \langle f, g \rangle = 0$

Satz 5.1.
QF hat die Ordnung $s + m \Leftrightarrow M$ ist orthogonal auf allen Polynome in $\mathcal{P}_{m-1}$

Definition 5.2.
Für eine Gewichtsfunktion $\omega : (a, b) \to \mathbb{R}$ mit

1. *ω stetig*
2. *$\forall x \in (a, b) : \omega(x) > 0$*
3. *$\forall k \in \mathbb{N} : \int_a^b \omega(x)|x|^k dx < \infty$*

definieren wir auf den Vektorraum

$$V = \left\{ f : [a, b] \to \mathbb{R} : f \text{ stetig und } \int_a^b f(x)^2 \omega(x) dx < \infty \right\}$$

das gewichtete Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_\omega := \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx$$

für $f, g \in V$
$f \perp_\omega g :\Leftrightarrow \langle f, g, \rangle_\omega = 0$

Satz 5.3.
Es existiert eine eindeutige Folge von Polynomen $p_0, p_1, ...$ mit

1. *$deg(p_k) = k$*

2. $\forall q \in \mathcal{P}_{k-1} : p_k \perp q$ *für* $k \geq 1$

3. $p_k(x) = x^k + r$ *mit* $deg(r) \leq k - 1$ *"Normierung"*

Diese Polynome lassen sich rekursiv berechnen durch
$p_{k+1}(x) := (x - \beta_{k+1})p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x)$ *für* $k \geq 2$
$p_0(x) := 1,\ p_1(x) := x$
$\beta_{k+1} := \frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle}$
$\gamma_{k+1}^2 := \frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle}$

Für eine QF maximaler Ordnung müssen nach Satz (4.1) die Knoten c_i, $i = 1, ..., s$ so gewählt werden, dass

$$M(t) = \prod_{i=1}^{s}(t - c_i)$$

das Orthogonalpolynom vom Grad s bezüglich des Skalarprodukts mit $\omega(x) \equiv 1$ auf $[0, 1]$ ist.
Frage: Sind die Wurzeln der Orthogonalpolynome aus (5.3) reell? (Spoiler: Ja)

Satz 5.4.
Sei p_k *das Orthogonalpolynom wie in (5.3) definiert (bzgl.* $\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)dx$*). Alle Wurzeln von* p_k *sind einfach und liegen im offenen Intervall* (a, b)*.*

Beispiel 5.5 (Orthogonale Polynome)**.**

Bezeichnung	*(a,b)*	*w(x)*	*Name*
P_k	$(-1, 1)$	1	*Legendrepolynome*
T_k	$(-1, 1)$	$(1 - x^2)^{-1/2}$	*Tschebyscheff-Polynome*
$P_k^{(\alpha,\beta)}$	$(-1, 1)$	$(1 - x)^\alpha(1 - x)^\beta$	*Jacobi-Polynome* $\alpha, \beta > -1$
$L_k^{(\alpha)}$	$(0, \infty)$	$x^\alpha e^{-x}$	*Laguere-Polynome*
M_k	$(-\infty, \infty)$	e^{-x^2}	*Harmitepolynome*

Bemerkung: Teilweise sind andere Normierungen üblich $P_k(1) = 1$*,* $T_k(x) = 2^{k-1}x^k + ...$*, ...*

6 Ein adaptives Programm

Gegeben sei eine QF mit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ mit Ordnung $p = 2s$ (die höchste Ordnung, die es gibt) z.B. $s = 15$

<u>Ziel:</u> Ein Computerprogramm adagaussqf(f, a, b, Tol), welches für eine Funktion f auf dem Interval $[a,b]$ eine Approximation an $\int_a^b f(x)dx$ berechnet, sodass der Fehler $\leq$ Tol ist (für viele Funktionen).
Konstruiere eine Zerlegung $\Delta = \{a = x_0 < ... < x_n = b\}$ des Intervalls, sodass für die Approximation

$$I_\Delta := \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_i + c_i h_{j+1})$$

gilt

$$|I_\Delta - \int_a^b f(x)dx| \leq Tol \int_a^b |f(x)|dx$$

Schwierigkeiten:

a) Schätzung des Fehlers

b) Wahl der Zerlegung des Intervalls

6.1 (Zerlegung des Intervalls)**.**
Für ein Teilintervall $[x_j, x_{j+1}]$ von $[a,b]$ lassen sich

$$res[x_j, x_{j+1}] := h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_{j+1})$$

und

$$resabs[x_j, x_{j+1}] := h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} |b_i f(x_j + c_i h_{j+1})|$$

berechnen.
Angenommen wir können eine Schätzung des Fehlers $err[x,x_{j+1}]$ berechnen mit

$$err[x,x_{j+1}] \approx res[x,x_{j+1}] - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx,$$

dann bietet sich zur folgendes Verfahren zur Konstruktion einer Zerlegung an:

1. *Berechne $res[a,b]$, $resabs[a,b]$ und $err[a,b]$.*
   if $|err[a,b]| \leq Tol\, resabs[a,b]$ return $res[a,b]$
   else

2. *Zerlege* $[a, b]$ *in*

$$I_0 = \left[a, \frac{b-a}{2}\right]$$

und

$$I_1 = \left[\frac{b-a}{2}, b\right]$$

und berechne

$res\, I_0$, $resabs\, I_0$, $err\, I_0$ *und*

$res\, I_1$, $resabs\, I_1$, $err\, I_1$

$n = 2$.

3. *Falls*

$$\sum_{j=0}^{n-1} |err\, I_j| \leq Tol \sum_{j=0}^{n-1} resabs\, I_j$$

return

$$\sum_{j=0}^{n-1} res\, I_j$$

sonst:
Unterteile das Intervall I_k, *in dem der Fehler maximal ist in zwei Teilintervalle* I_k *und* I_n *und berechne:*

$res\, I_k$, $resabs\, I_k$, $err\, I_k$ *und*

$res\, I_n$, $resabs\, I_n$, $err\, I_n$

$n = n + 1$
Gehe zu 3)

6.2 (Schätzung des Fehlers).
<u>*Ziel:*</u> *Berechne Approximation an*

$$\int_{x_j}^{x_{x+1}} f(x)dx - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + h_{j+1} c_i)$$

ohne zusätzliche Funktionsauswertungen.
<u>*Idee:*</u> *Konstruiere eingebettete QF, d.h. QF zu den selben Knoten* c_i *mit*

Gewichten b_i *und Ordnung* $\hat{p} < p$

<u>*Bemerkung:*</u> *Falls* $p = 2s$ *ist, so gilt* $\hat{p} \leq s - 1$ *(wäre* $\hat{p} \geq s$*, so wäre nach (2.8)* $\hat{b}_i < b_i$*).*

Eine Approximation des Fehlers für die eingebettete QF ist durch

$$\begin{aligned} diff[x_j, x_{j+1}] &= h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} \hat{b}_i f(x_j + c_i h_{j+1}) \\ &= h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} (b_i - \hat{b}_i) f(x_j + c_i h_{j+1}) \end{aligned}$$

gegeben. Es gilt

$$\begin{aligned} diff[x_j, x_{j+1}] &= h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \\ &\quad - \left(h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} \hat{b}_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \right) \\ &= \text{Fehler der QF } (b_i, c_i)_{i=1}^{s} - \text{Fehler der QF } (\hat{b}_i, c_i)_{i=1}^{s} \\ &= C_1 h_{j+1}^{p+1} + C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1} \end{aligned}$$

Falls h_{j+1} *klein ist, ist* $C_1 h_{j+1}^{p+1} << C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1}$.

Drei Möglichkeiten den Fehler zu schätzen:

I) *err* $[x_j, x_{j+1}] \approx$ *diff* $[x_j, x_{j+1}]$. *Sehr pessimistisch*

II) *err* $[x_j, x_{j+1}] \approx$ *(diff* $[x_j, x_{j+1}])^2$, *falls* $p = 2s$ *und* $\hat{p} = s - 1$. *Wenig verlässlich*

III) *Verwende dritte eingebettete QF*

$(\hat{\hat{b}}_i, c_i)$ *der Ordnung 6*

zu (b_i, c_i) *der Ordnung* $30 = 2s$, $s = 15$

und $(\hat{b}_i, c_i)$ *der Ordnung 14*

$\widehat{diff} = h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} (b_i - \hat{\hat{b}}_i) f(x_{j+1} + c_i h_{j+1}) \approx C_3 h^7$

$$
\begin{aligned}
err\,[x_j, x_{j+1}] &= diff\,[x_j, x_{j+1}] \left(\frac{diff}{\hat{diff}}\right)^2 \\
&= C_2 \frac{C_2^2}{C_3^2} h_{j+1}^{15} \left(\frac{h_{j+1}^{15}}{h_{j+1}^{7}}\right) = C h_{j+1}^{31}
\end{aligned}
$$

7 Gauß- und Lobatto Quadraturformeln

Ziel: Konstruktion einer s-stufigen QF der Ordnung $p = 2s$.
Für $M(t) = CP_s(2t-1)$, wobei P_s das Legendrepolynom vom Grad s ist (siehe (5.5)), $C \in \mathbb{R}$, erhalten wir mit (5.4) und (4.1):

Satz 7.1.
Für jedes $s \in \mathbb{N}$ gibt es eine eindeutige QF der Ordnung $p = 2s$, die sogenannte Gauß-QF. Ihre Knoten sind die Wurzeln von $P_s(2t-1)$, ihre Gewichte sind durch (2.8) gegeben.

Beispiele:

$s = 1$	Mittelpunktsregel
$s = 2$	$c_{1,2} = \frac{1}{2} \mp \frac{\sqrt{3}}{6}$, $b_1 = \frac{1}{2} = b_2$
$s = 3$	(4.3) 2)

7.2 (Bezeichnung der Knoten der Gauß-QF)**.**
Details: Siehe Homepage (Übungsaufgabe).
Idee: *Die Wurzeln der Polynome, die durch Rekursion (5.3) erzeugt werden, sind die Eigenwerte einer symmetrischen Tridiagonalmatrix (Matrix: Siehe Homepage).*
In Numerik II lernen Sie Verfahren kennen, um die Eigenwerte zu berechnen.

7.3 (Lobatto Quadraturformeln)**.**
Ein Vorteil der Simpsonquadraturformel war, dass $c_1 = 0$ und $c_s = 1$ gilt. Damit muss man den Integranten in x_j nur einmal auswerten. Zur Konstruktion einer s-stufigen QF der Ordnung $p = 2s - 2$ mit $c_1 = 0$ und $c_s = 1$ setzt man

$$M(t) = P_s(2t-1) - P_{s-2}(2t-1)$$

Da die Legendre-Polynome folgende Rekursion erfüllen

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

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

ist

$$P_s(1) = 1 \quad und \quad P_s(-1) = (-1)^s$$

und damit

$$M(0) = 0 = M(1)$$

Die restlichen Nullstellen (oder Wurzeln) von $M(t)$ sind reell, einfach und liegen in (0,1), wie man analog zu (5.4) zeigt.
Damit gilt:

Satz *Für $s \in \mathbb{N}$, $s \geq 2$ gibt es eine eindeutige s-stufige QF der Ordnung $2s-2$ mit $c_1 = 0$ und $c_s = 1$*

II Interpolation und Approximation

Problemstellung A Zu gegebenen $(x_0, y_0), ..., (x_n, y_n)$ berechne Polynom p vom Grad $\leq n$ mit

$$p(x_j) = y_j, \quad j = 0, ..., n$$

Problemstellung B $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ gegeben. Finde einfach auszuwertende Funktion $p : [a,b] \to \mathbb{R}$, etwa ein Polynom, stückweises Polynom, rationale Funktion, sodass $f - p$ klein ist.

i) $f(x) = p(x)$ für endlich viele vorgegebene Punkte x

ii) $\int_a^b (f(x) - p(x))^2 dx$ soll minimal sein.

iii) $\max_{x \in [a,b]} |f(x) - p(x)|$ soll minimal sein.

1 Newtonsche Interpolationsformel

Beispiel 1.1.

n=1:

$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$, *$p \in \mathcal{P}_1$ das beide Punkte verbindet.*

$$p(x) = y_0 + (x - x_0)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

n=2:

$(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$

$$p(x) = y_0 + (x - x_0)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x - x_0)(x - x_1)$$

Bestimme a so, dass $p(x_2) = y_2$

$$\begin{aligned} y_2 &\overset{!}{=} y_0 + (x - x_0)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x - x_0)(x - x_1) \\ a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) &= y_2 - y_0 - (x_2 - x_1)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - y_1 + y_0 \\ \Rightarrow a &= \frac{1}{x_2 - x_0}\left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}\right) \end{aligned}$$

Definition 1.2 (dividierte Differenzen)**.**
Für $(x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)$ *mit paarweise verschiedenen Stützstellen* x_j *definieren wir*

$$y[x_j] := y_j \quad \left(= \delta^0 y[x_j]\right)$$

$$\delta y[x_j, x_{j+1}] := \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} = \frac{\delta^0 y[x_{j+1}] - \delta^0 y[x_j]}{x_{j+1} - x_j}$$

$$\delta^2 y[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] := \frac{\delta y[x_{j+1}, x_{j+2}] - \delta y[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j}$$

$$\delta^k y[x_j, x_{j+1}, ..., x_{j+k}] := \frac{1}{x_{j+k} - x_j}\left(\delta^{k-1} y[x_{j+1}, ..., x_{j+k}] - \delta^{k-1} y[x_j, ..., x_{j+k-1}]\right)$$