

Numerik 1

Prof. Schaedle

April 17, 2019

I Numerische Integration

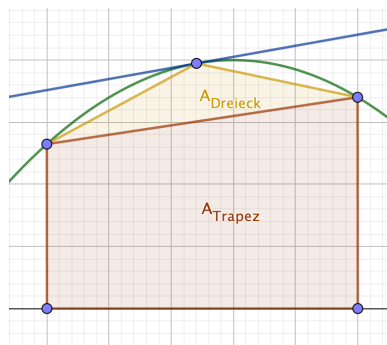
1 Einführung

Problem 1.1.

Gegeben $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ 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



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

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):

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{|\Delta| \rightarrow 0} \sum_{j=1}^n f(\xi_j)(x_j - x_{j-1}),$$

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

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

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. $[a, b] \rightarrow [x_{j-1}, x_j], t \mapsto x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1})$.

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

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 $i = 1, \dots, s$ 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:* $s = 1, b_1 = 1, c_1 = \frac{1}{2}$

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

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

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

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

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

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:*

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

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

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

wobei $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.

Achtung: Dieses gewöhnliche MC-Verfahren konvergiert sehr langsam. Verbesserungen sind z.B.: Importance sampling, Control variates, Antithetic variates und stratified 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 $q = 1, \dots, p$

Beweis.

” \Rightarrow ”

QF hat Ordnung $p \Rightarrow$ QF ist exakt für $g(t) = t^{q-1}$ für $q = 1, \dots, p$ auf $[0, 1]$

\Rightarrow

$$\sum b_i c_i^{q-1} = \int_0^1 t^{q-1} dt = \left[\frac{t^q}{q} \right]_{t=0}^1 = \frac{1}{q}$$

” \Leftarrow ”

Jedes Polynom von Grad $p - 1$ lässt sich als Linearkombination von $1, t, t^2, \dots, t^{p-1}$. Die Behauptung folgt aus der Linearität in g von

$$\int_0^1 g(t) dt$$

und

$$\sum_{i=1}^s b_i g(c_i)$$

□

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 vorgegebenen paarweise verschiedenen Knoten c_1, \dots, c_s lässt sich aus (*) für $p = s$ ein lineares Gleichungssystem für die Gewichte b_1, \dots, b_s aufstellen.

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

Falls die Vandermonde-Matrix V invertierbar ist, so lassen sich die Gewichte b_1, \dots, 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 $i = 1, \dots, s$

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.

Beweis. Sei die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ exakt für Polynome vom Grad $\leq 2m - 2$ (für $m \in \mathbb{N}$), (dann ist die Ordnung $\geq 2m - 1$).

$$\forall g \in \mathcal{P} : \deg(g) \leq 2m - 2 \Rightarrow \sum_{i=1}^s b_i g(c_i) = \int_0^1 g(t) dt$$

Sei $f \in \mathcal{P}$ mit $\deg(f) = 2m - 1$.

Wir zeigen QF ist exakt für f .

$$f(t) = ct^{2m-1} + g(t)$$

für $g \in \mathcal{P}$ mit $\deg(g) \leq 2m - 2$ mit $c \neq 0$.

Trick: $f(t) = c(t - \frac{1}{2})^{2m-1} + \tilde{g}(t)$ mit $\tilde{g} \in \mathcal{P}$ und $\deg(\tilde{g}) \leq 2m - 2$

1. Für \tilde{g} ist die QF exakt

- 2.

$$\int_0^1 (t - \frac{1}{2})^{2m-1} dt = \left[\frac{1}{2m-2} (t - \frac{1}{2})^{2m-2} \right]_0^1 = 0$$

$$\sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1}$$

Symmetrie \Rightarrow

$$= \sum_{i=1}^s b_{s+1-i} \left(\frac{1}{2} - c_{s+1-i} \right)^{2m-1}$$

Definiere $j := s + 1 - i$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^s b_i \left(\frac{1}{2} - c_i \right)^{2m-1} = - \sum_{i=1}^s b_i \left(c_i - \frac{1}{2} \right)^{2m-1} \\
&\Rightarrow 2 * \sum_{i=1}^s b_i \left(c_i - \frac{1}{2} \right)^{2m-1} = 0 \\
&\Rightarrow \sum_{i=1}^s b_i \left(c_i - \frac{1}{2} \right)^{2m-1} = 0 \\
&\sum_{i=1}^s b_i f(c_i) = c \sum_{i=1}^s b_i \left(c_i - \frac{1}{2} \right)^{2m-1} + \sum_{i=1}^s b_i \tilde{g}(c_i) \\
&= c \int_0^1 \left(t - \frac{1}{2} \right)^{2m-1} dt + \int_0^1 \tilde{g}(t) dt = \int_0^1 f(t) dt
\end{aligned}$$

\Rightarrow QF hat mind. Ordnung $2m$.

□

Satz 2.8.

Sind Knoten $c_1 < c_2 < \dots < c_s$ ($c_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, s$) gegeben, so existieren eindeutig bestimmte Gewichte b_1, \dots, 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_1, \dots, c_s . Es gilt $\deg(l_i) = s-1$

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

Beweis. von 2.8

1. Hat die QF die Ordnung $p \geq s$, so ist wegen $\deg(l_i) = s - 1$:

$$\int_0^1 l_i(t) dt = \sum_{j=1}^s b_j l_i(c_j) = b_i$$

2. Zu den Knoten c_i, \dots, c_s definiere b_i wie angegeben. Die QF ist dann exakt für alle Polynome von Grad $\leq s - 1$, da die l_1, \dots, l_s linear unabhängig sind und eine Basis des Vektorraums der Polynome von Grad $\leq s - 1$ bilden.

□

3 Quadraturfehler

Allgemeine Voraussetzung $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ 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 $h_{j+1} = x_{j+1} - x_j$

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x_j + \tau) d\tau - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + h_{j+1} c_i) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \int_0^1 g_j(\xi) d\xi - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i g_j(c_i) \end{aligned}$$

mit $g_j(\xi) = f(x_j + \xi h_{j+1})$.

Der Quadraturfehler auf Teilintervallen $[x_j, x_j + h_{j+1}]$ ist

$$\begin{aligned} E(f, x_j, h_{j+1}) &= \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) \\ &= h_{j+1} \left(\int_0^1 g_j(\xi) d\xi - \sum_{i=1}^s b_i g_j(c_i) \right) \end{aligned}$$

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 $f(x_0 + c_i h)$:

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

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 $x_j = x_0 + jh$

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

3.3 (Rigorese Fehlerabschätzung).

Satz 1:

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

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

wobei der Peanokern $K_k(\tau)$ durch

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

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

Beweis. Taylorentwicklung mit Integralrestglied und Transformation

$$f(x_0 + th) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau$$

eingesetzt in (*) und die Verwendung von

$$\int_0^{c_i} (c_i - \tau)^{k-1} g(\tau) d\tau = \int_0^1 (c_i - \tau)_+^{k-1} g(\tau) d\tau$$

liefern

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= h \int_0^1 \left(\sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right) dt - \\ &\quad h \sum_{i=1}^s b_i \left(\sum_{j=0}^{k-1} \frac{(c_i h)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^{c_i} \frac{(c_i - \tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right) \\ &\stackrel{\underbrace{\quad}_{k \leq p}}{=} hh^k \left[\int_0^1 \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau dt - \sum_{i=1}^s \int_0^1 \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right] \\ &= hh^k \left[\int_0^1 \int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau dt - \sum_{i=1}^s b_i \int_0^1 \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right] \\ &= h^{k+1} \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} dt - \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \right) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \\ &= h^{k+1} \int_0^1 K_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \end{aligned}$$

, da

$$\int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} dt = \int_0^1 \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} = \left[\frac{1}{k!} (t-\tau)^k \right]_{t=\tau}^1 = \frac{1}{k!} (1-\tau)^k$$

□

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 $i = 1, \dots, s$
3. $K_k(0) = 0$ für $k \geq 2$, falls $c_i \leq 1$ für $i = 1, \dots, s$
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

Beweis. Eventuell Übungsaufgabe

□

Beispiel:

Mittelpunktsregel:

$$\begin{aligned}
 K_1(\tau) &= \frac{(1-\tau)^1}{1!} - 1 \frac{(\frac{1}{2} - \tau)_+^1}{0!} \\
 &= 1 - \tau - \left(\frac{1}{2} - \tau \right)_+^0 \\
 &= \begin{cases} 1 - \tau - 1 & \tau < \frac{1}{2} \\ 1 - \tau & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases} \\
 K_2(\tau) &= \frac{(1-\tau)^2}{2!} - 1 \frac{(\frac{1}{2} - \tau)_+^1}{1!} \\
 &= \frac{1}{2}(1-\tau)^2 - \left(\frac{1}{2} - \tau \right)_+^1 \\
 &= \begin{cases} \frac{\tau^2}{2} & \tau < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(1-\tau)^2 & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases}
 \end{aligned}$$

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

Beweis. Mit Satz 1 gilt

$$|E(f, x_j, h_{j+1})| \leq h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| |f^{(k)}(x_j + \tau h_{j+1})| d\tau$$

$$\leq h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x \in [x_j, x_j + h_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|$$

Für

$$\begin{aligned} |err| &= \left| \sum_{j=0}^{n-1} E(f, x_j, h_{j+1}) \right| \\ &\leq \sum_{j=0}^{n-1} |E(f, x_j, h_{j+1})| \\ &\leq \underbrace{\sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1}}_{b-a} \underbrace{h_{j+1}^k}_{\leq h^k} \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \underbrace{\max_{x \in [x_j, x_j + h_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|}_{\leq \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)|} \end{aligned}$$

□

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

$c_1 < \dots < c_s$ Knoten gegeben. Aus §2 wissen wir:

Es gibt Gewichte b_1, \dots, 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

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

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 $2s$

Beweis (indirekt). Annahme: $p > 2s$

$$(4.1) \Rightarrow \forall h \in \mathcal{P}_s : \int_0^1 M(t)h(t)dt = 0$$

Setze $h = M$, dann ist

$$\int_0^1 M(t)^2 dt = 0$$

↳ zu $\int_0^1 M(t)^2 dt > 0$, da $M(t) \equiv 0$

□

4.3 (Beispiele/Korollare).

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

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

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

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 $h(t) = 1, t, t^2$

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

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

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

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

nichtlineares Gleichungssystem in c_1, c_2, c_3

Trick:

$$\sigma_1 = c_1 + c_2 + c_3$$

$$\sigma_2 = c_1 c_2 + c_1 c_3 + c_2 c_3$$

$$\sigma_2 = c_1 c_2 c_3$$

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 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$

$$\text{mit Lösung } \sigma_1 = \frac{3}{2}, \sigma_2 = \frac{3}{5}, \sigma_3 = \frac{1}{20}$$

$$\text{und damit ist } M(t) = t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{3}{5}t - \frac{1}{20}$$

$= (t - \frac{1}{2})(t - \frac{5-\sqrt{15}}{10})(t - \frac{5+\sqrt{15}}{10})$
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 $\{1, X, X^2, \dots, X^s\}$

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

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

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, \dots 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

$$p_{k+1}(x) := (x - \beta_{k+1})p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x) \text{ für } k \geq 1$$

$$p_0(x) := 1, p_{-1}(x) := 0$$

$$\beta_{k+1} := \frac{\langle x p_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle}$$

$$\gamma_{k+1}^2 := \frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle}$$

Beweis. (vgl. Gram-Schmidt Orthogonalisierung LinA)

Sei p_0, \dots, p_k bereits bekannt. Zur Konstruktion von p_{k+1} setzen wir

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) + \sum_{j=0}^k \alpha_j p_j(x)$$

(damit ist 3. erfüllt)

Zur Bestimmung der α_j :

$$\begin{aligned} 1. \quad 0 &= \langle p_{k+1}, p_k \rangle = \langle xp_k, p_k \rangle + \alpha_k \langle p_k, p_k \rangle + \underbrace{\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \langle p_j, p_k \rangle}_{=0} \\ \Rightarrow \alpha_k &= -\frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle} =: -\beta_{k+1} \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p_{k+1}, p_{k-1} \rangle = \langle xp_k, p_{k-1} \rangle + 0 + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle + 0 \\ &= \langle p_k, xp_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle \end{aligned}$$

Aufgrund von 3. \Rightarrow

$$xp_{k-1} = p_k + r$$

mit $\deg(r) \leq k-1$

$$\Rightarrow \langle p_k, xp_{k-1} \rangle = \langle p_k, p_k \rangle + \underbrace{\langle p_k, r \rangle}_{=0}$$

$$\Rightarrow \alpha_{k-1} = -\frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} =: -\gamma_{k+1}^2$$

3. Für $j \leq k-2$:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p_{k+1}, p_j \rangle = \langle xp_k, p_j \rangle + \alpha_j \langle p_j, p_j \rangle \\ &= \underbrace{\langle p_k, xp_j \rangle}_{=0} + \alpha_j \underbrace{\langle p_j, p_j \rangle}_{\neq 0} \end{aligned}$$

$\langle p_k, xp_j \rangle = 0$ gilt, da $\deg(xp_j) \leq k+1$

Insgesamt haben wir

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \beta_{k+1} p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x)$$

□

Für eine QF maximaler Ordnung müssen nach Satz (4.1) die Knoten c_i , $i = 1, \dots, s$ 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.

Beispiel 5.5.

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. $s = 15$

Ziel: Ein Computerprogramm `adagaussqf(f, a, b, Tol)`, welches für eine Funktion f auf dem Intervall $[a, b]$ eine Approximation an $\int_a^b f(x)dx$ berechnet, sodass der Fehler $\leq \text{Tol}$ ist (für viele Funktionen).

Konstruiere eine Zerlegung $\Delta = \{a = x_0 < \dots < x_n = b\}$ 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

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

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

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

und

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

berechnen.

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

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

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

1. Berechne $\text{res}[a, b]$, $\text{resabs}[a, b]$ und $\text{err}[a, b]$.
if $|\text{err}[a, b]| \leq \text{Tol} \text{resabs}[a, b]$ return $\text{res}[a, b]$
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

$\text{res } I_0$, $\text{resabs } I_0$, $\text{err } I_0$ und

$\text{res } I_1$, $\text{resabs } I_1$, $\text{err } I_1$

$n = 2$.

3. Falls

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

return

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

sonst:

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

$\text{res } I_k, \text{resabs } I_k, \text{err } I_k$ und

$\text{res } I_n, \text{resabs } I_n, \text{err } I_n$

$n = n + 1$

Gehe zu 3)

6.2 (Schätzung des Fehlers).

Ziel: Berechne Approximation an

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

ohne zusätzliche Funktionsauswertungen.

Idee: Konstruiere eingebettete QF, d.h. QF zu den selben Knoten c_i mit Gewichten b_i und Ordnung $\hat{p} < p$

Bemerkung: 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

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

gegeben. Es gilt

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

$$\begin{aligned}
&= \text{Fehler der } QF(b_i, c_i)_{i=1}^s - \text{Fehler der } QF(\hat{b}_i, c_i)_{i=1}^s \\
&= C_1 h_{j+1}^{p+1} + C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1}
\end{aligned}$$

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

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{h}_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

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

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