

# Numerik 1

Prof. Schaedle

May 1, 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



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

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):

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

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

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

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

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

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.

$$p(t) = g(0)(1-t)2(\frac{1}{2}-t) + g(\frac{1}{2})(1-t)4t + g(1)(\frac{1}{2}-t)2t$$

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

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  $\leq p - 1$ .

$$\mathcal{P} := \left\{ \sum_{i=0}^n a_i X^i, a_i \in \mathbb{R}(\mathbb{C}) \right\}, \quad \text{Menge aller Polynome}$$

Für  $q \in \mathcal{P}$  ist  $\deg(q)$  der 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

$$q = 4: \quad \frac{1}{6} * 0^3 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{1}{6} * 1^3 = \frac{1}{4}$$

$$q = 5: \quad \frac{1}{6} * 0^4 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^4 + \frac{1}{6} * 1^4 = \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5}$$

Nach Satz (2.2) ist damit die Ordnung der Simpsonregel  $p = 4$ .

5. ”pulcherina et utilissima”: Übung

**Bemerkung 2.4.**

Zu vorgegebenen paarweise verschiedenen Knoten  $c_1, \dots, c_s$  lässt sich mit Satz (2.2) 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  $i = 1, \dots, s$  gilt:

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

**Beispiel 2.6** (Symmetrische QF).

Mittelpunktsregel, Trapezregel, Simpsonregel,...

**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  $\Rightarrow$

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

Definiere  $j := s + 1 - i$

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

$$\Rightarrow 2 * \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} = 0$$

$$\sum_{i=1}^s b_i f(c_i) = c \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} + \sum_{i=1}^s b_i \tilde{g}(c_i)$$

$$= c \int_0^1 (t - \frac{1}{2})^{2m-1} dt + \int_0^1 \tilde{g}(t) dt = \int_0^1 f(t) dt$$

$\Rightarrow$  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

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

*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  $c_1, \dots, c_s$  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.

□

**Bemerkung** (zu Satz (2.8)).

$l_i$  ist das  $i$ -te Lagrangepolynom zu den Knoten  $c_1, \dots, c_s$ . Es gilt:

1.  $\deg(l_i) = s - 1$
2.  $l_i(c_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$ , für  $j = 1, \dots, s$

### 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

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

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

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

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  $x_j = x_0 + jh$

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

### 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

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

da

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

gilt. □

**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:

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

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

**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)

$$|err| \leq h^k(b-a) \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)|, \quad h = \max_{j=1, \dots, n} h_j.$$

*Beweis.* Mit Satz 1 gilt

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

Zudem gilt

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

Damit folgt die Behauptung. □

## 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

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

Es gibt Gewichte  $b_1, \dots, b_s$ , sodass  $p \geq s$ .

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

**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  $\geq 4$  muss

$$\begin{aligned} & \int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) dt = 0 \\ \Leftrightarrow & \int_0^1 t^3 + t^2(-c_1 - c_2 - c_3) + t(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 dt \\ & = \frac{1}{4} + \frac{1}{3}(-c_1 - c_2 - c_3) + \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 = 0 \end{aligned}$$

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

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

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

Das ist ein nichtlineares Gleichungssystem in  $c_1, c_2, c_3$ .

Trick:

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

$$\sigma_2 = c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3$$

$$\sigma_3 = c_1c_2c_3$$

Das sind die Koeffizienten von  $M(t)$  in der Monombasis.

$$M(t) = (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) = t^3 - \sigma_1t^2 + \sigma_2t - \sigma_3$$



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

$$\begin{aligned} M(t) &= t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{3}{5}t - \frac{1}{20} \\ &= (t - \frac{1}{2})(t - \frac{5 - \sqrt{15}}{10})(t - \frac{5 + \sqrt{15}}{10}) \end{aligned}$$

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.  $\omega$  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  $f, g \in V$ .

Zudem definiere:

$$f \perp_\omega g \Leftrightarrow \langle f, g \rangle_\omega = 0$$

**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

$$\begin{aligned} p_0(x) &:= 1 \\ p_1(x) &:= x \\ p_{k+1}(x) &:= (x - \beta_{k+1})p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x), \quad \text{für } k \geq 2 \end{aligned}$$

Wobei  $\beta$  und  $\gamma$  definiert sind durch:

$$\begin{aligned} \beta_{k+1} &:= \frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle} \\ \gamma_{k+1}^2 &:= \frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} \end{aligned}$$

*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  $\alpha_j$ :

$$1. \quad 0 = \langle p_{k+1}, p_k \rangle = \langle xp_k, p_k \rangle + \alpha_k \langle p_k, p_k \rangle + \underbrace{\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \langle p_j, p_k \rangle}_{=0}$$

$$\Rightarrow \alpha_k = -\frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle} =: -\beta_{k+1}$$

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

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

□

**Bemerkung.**

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.**

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  $(a, b)$ .

*Beweis.* Sei  $x_1, \dots, x_r$  jene Wurzeln in  $p_k$ , die reell sind, in  $(a, b)$  liegen und bei denen  $p_k$  das Vorzeichen wechselt (Wurzeln mit ungerader Vielfachheit).

Klar ist:  $r \leq k$ .

Sei

$$g(x) = \prod_{j=1}^r (x - x_j)$$

Dann ist

$$\langle p_k, g \rangle = \int_a^b \underbrace{p_k(x) g(x)}_{\text{Wechselt das Vorzeichen in (a,b) nicht}} \omega(x) dx \neq 0$$

Andererseits ist  $p_k$  orthogonal zu allen Polynomen vom Grad  $\leq k-1$

$\Rightarrow r = \deg(g) \geq k$

$\Rightarrow r = k$

□

**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 $\alpha, \beta > -1$
$L_k^{(\alpha)}$	$(0, \infty)$	$x^\alpha e^{-x}$	Laguerre-Polynome
$M_k$	$(-\infty, \infty)$	$e^{-x^2}$	Hermitepolynome

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

## 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

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

gilt

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

Schwierigkeiten:

- Schätzung des Fehlers
- 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 folgendes Verfahren zur Konstruktion einer Zerlegung an:

1. Berechne  $res[a, b]$ ,  $resabs[a, b]$  und  $err[a, b]$ .

Falls

$$|err[a, b]| \leq Tol \, resabs[a, b]$$

Gebe  $res[a, b]$  zurück.

Ansonsten:

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

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

Gebe

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

zurück. Ansonsten:

Unterteile das Intervall  $I_k = [a_k, b_k]$ , in dem der Fehler maximal ist in zwei Teilintervalle

$$I_l = \left[ a_k, \frac{b_k - a_k}{2} \right]$$

und

$$I_m = \left[ \frac{b_k - a_k}{2}, b_k \right]$$

und berechne:

$res I_l, resabs I_l, err I_l$  und

$res I_m, resabs I_m, err I_m$

$n = n + 1$

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  $\hat{b}_i$  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

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

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)  $\text{err}[x_j, x_{j+1}] \approx \text{diff}[x_j, x_{j+1}]$ . Sehr pessimistisch
- II)  $\text{err}[x_j, x_{j+1}] \approx (\text{diff}[x_j, x_{j+1}])^2$ , 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

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

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



## 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.

### Beispiel.

$s = 1$  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).

Zusammengefasst:

**Satz:** Es seien  $P_0, \dots, P_n$  Polynome definiert wie in Satz (5.3).

$\lambda \in \mathbb{R}$  ist eine Nullstelle von  $P_n \Leftrightarrow \lambda$  ist ein Eigenwert der Tridiagonalmatrix  $T_n$ .  $\Phi_n(\lambda)$  ist dann der Eigenvektor zum Eigenwert  $\lambda$ .

$T_n$  und  $\Phi_n(\lambda)$  sind gegeben durch:

$$T_n = \begin{bmatrix} \beta_1 & 1 & & & \\ \gamma_2^2 & \beta_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{n-1}^2 & \beta_{n-1} & 1 \\ & & & \gamma_n^2 & \beta_n \end{bmatrix}$$

$$\Phi_n(\lambda) = [P_0 \quad \dots \quad P_{n-1}]^T$$

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 Integranden 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

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

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  $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$  berechne Polynom  $p$  vom Grad  $\leq n$  mit

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

**Problemstellung B**  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  gegeben. Finde einfach auszuwertende Funktion  $p : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , 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.

## 8 Newtonsche Interpolationsformel

### Beispiel 8.1.

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  $p(x_2) = y_2$

$$y_2 \stackrel{!}{=} y_0 + (x_2 - x_0) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$

$$a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2 - y_0 - (x_2 - x_1) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - y_1 + y_0$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{x_2 - x_0} \left( \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right)$$

**Definition 8.2** (dividierte Differenzen).

Für  $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  mit paarweise verschiedenen Stützstellen  $x_j$  definieren wir

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

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

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

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

Schema:

$$\begin{array}{rcl}
 x_0 & y_0 & \\
 & & \delta^1 y[x_0, x_1] \\
 x_1 & y_1 & \delta^2 y[x_0, x_1, x_2] \\
 & & \delta^1 y[x_1, x_2] \quad \delta^3 y[x_0, x_1, x_2, x_3] \\
 x_2 & y_2 & \delta^2 y[x_1, x_2, x_3] \\
 & & \delta^1 y[x_2, x_3] \\
 x_3 & y_3 &
 \end{array}$$

**Bemerkung 8.3.**

Falls die  $x_i$  äquidistant, dh.  $x_i = x_0 + ih$  so ist:

$$\begin{aligned}
 \delta y[x_i, x_{i+1}] &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h} =: \frac{1}{h} \Delta y_i \\
 \delta^2 y[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] &= \frac{\frac{1}{h} \Delta y_{i+1} - \frac{1}{h} \Delta y_i}{2h} = \frac{1}{2h^2} \Delta^2 y_i \\
 \delta^k y[x_i, \dots, x_{i+k}] &= \frac{1}{k! h^k} \Delta^k y_i,
 \end{aligned}$$

wobei  $\Delta^k := \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i$ .

**Satz 8.4** (Newtonsche Interpolationsformel).

Zu paarweise verschiedenen reellen  $x_i$ ,  $i = 0, \dots, n$ , existiert ein eindeutiges Polynom  $p \in \mathcal{P}_n$  durch die Punkte  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 0, \dots, n$  (d.h.  $p(x_i) = y_i$  für  $i = 0, \dots, n$ ). Es lässt sich berechnen durch:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= y[x_0] + (x - x_0) \delta y[x_0, x_1] + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \delta^n y[x_0, \dots, x_n] \\
 &= \sum_{i=0}^n \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \delta^i y[x_0, \dots, x_i]
 \end{aligned}$$

*Beweis.* (Induktion)

**IA**  $n = 1$  (und  $n = 2$ ) vgl. Beispiel (1.1)

**IS**  $n - 1 \rightarrow n$

$$p_0(x) = y[x_0] + (x - x_0) \delta y[x_1, x_0] + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-2}) \delta^{n-1} y[x_0, \dots, x_{n-1}]$$

ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

$$\deg(p_0) \leq n - 1$$

zu  $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_{n-1}, y_{n-1})$ .

Für den Ansatz

$$p(x) = p_0(x) + a(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})$$

ergibt die Forderung  $p(x_n) = y_n$

$$a = \frac{y_n - p_0(x_n)}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})}$$

Da  $a$  eindeutig ist, ist  $p$  eindeutig.

Es bleibt zu zeigen:  $a = \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$

Sei dazu ein Polynom  $p_1(x)$ , welches durch  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  läuft, mit  $\deg(p_1) \leq n - 1$ . Nach Induktionsannahme gilt

$$\begin{aligned} p_1(x) &= y[x_1] + (x - x_1)\delta^1 y[x_1, x_2] + \dots + (x - x_1) \dots (x - x_{n-1})\delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] \\ &= x^{n-1}\delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] + r \end{aligned}$$

mit  $\deg(r) \leq n - 2$ .

Setze Polynom

$$p(x) := \frac{x_n - x}{x_n - x_0} p_0(x) + \frac{x - x_0}{x_n - x_0} p_1(x)$$

mit  $\deg(p) \leq n$  durch  $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ .

Das gilt, da:

$$p(x_0) = p_0(x_0) = y_0$$

$$p(x_n) = p_1(x_n) = y_n$$

Für  $i = 1, \dots, n - 1$ :

$$p(x_i) = \frac{x_n - x_i}{x_n - x_0} \underbrace{p_0(x_i)}_{y_i} + \frac{x_i - x_0}{x_n - x_0} \underbrace{p_1(x_i)}_{y_i} = y_i$$

Andererseits:

$$p(x) = ax^n + r \quad \text{mit } \deg(r) \leq n - 1$$

Koeffizientenvergleich:

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_0, \dots, x_{n-1}] + \frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] \\ &= \delta^n y[x_0, \dots, x_n] \end{aligned}$$

□

### 8.5 (Horner Schema).

Zur Auswertung des Interpolationspolynom  $p$  an der Stelle  $x$  verwendet man

$$p(x) = y[x_0] + (x - x_0) (\delta y[x_0, x_1] + (x - x_1) (\delta^2 y[x_0, x_1, x_2] + (x - x_2) (\dots (\delta^n y[x_0, \dots, x_n]))))$$

Algorithmus:

```

s =  $\delta^n y[x_0, \dots, x_n]$ 
for  $k = n - 1, \dots, 0$  do
     $s = \delta^k y[x_0, \dots, x_k] + (x - x_k)s$ 
end for

```

### Beispiel 8.6.

$i$	$x_i$	$y_i$	$\delta^1 y[x_0, x_1]$	$\delta^2 y[x_0, x_1, x_2]$	$\delta^3 y[x_0, \dots, x_3]$	$\delta^4 y[x_0, \dots, x_4]$
0	-1	0	$\frac{1-0}{0-(-1)} = 1$			
1	0	1		$\frac{0-1}{2-(-1)} = -\frac{1}{3}$		
			0		$\frac{\frac{2}{3}-(-\frac{1}{3})}{3-(-1)} = \frac{1}{4}$	
2	2	1		$\frac{2-0}{3-0} = \frac{2}{3}$		$\frac{-\frac{2}{5}-\frac{1}{4}}{5-(-1)} = -\frac{13}{120}$
			$\frac{3-1}{3-2} = 2$		$\frac{-\frac{4}{3}-\frac{2}{3}}{5-0} = -\frac{2}{5}$	
3	3	3		$\frac{-2-2}{5-2} = -\frac{4}{3}$		
			$\frac{-1-3}{5-3} = -2$			
4	5	-1				

Das Interpolationspolynom ist also

$$p(x) = 0 + (x+1) * 1 - \frac{1}{3}(x+1)(x) + \frac{1}{4}(x+1)x(x-2) + (x+1)x(x-2)(x-3) \left(-\frac{13}{120}\right)$$

bzw. nach Horner Schema

$$p(x) = 0 + (x+1) \left( 1 + x \left( -\frac{1}{3} + (x-2) \left( \frac{1}{4} + (x-3) \left( -\frac{13}{120} \right) \right) \right) \right)$$

Werte  $p(x)$  an der Stelle 1 aus:

$$\begin{aligned} -\frac{13}{120} * (-2) &= \frac{26}{120} \\ \left(\frac{1}{4} + \frac{26}{120}\right) (-1) &= -\frac{56}{120} = -\frac{7}{15} \\ \left(-\frac{7}{15} - \frac{1}{3}\right) 1 &= -\frac{12}{15} = -\frac{4}{5} \\ \left(-\frac{4}{5} + 1\right) 2 &= \frac{2}{5} = p(1) \end{aligned}$$

## 9 Fehler bei der Polynominterpolation

**Problem:**  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  werde interpoliert in Stützstellen  $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$  durch  $p \in \mathcal{P}_n$  mit  $p(x_i) = f(x_i)$  für  $i = 0, \dots, n$ .

Wie groß ist der Fehler  $f(x) - p(x)$ ?

### Satz 9.1.

Sei  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$   $(n+1)$ -mal stetig differenzierbar,  $p \in \mathcal{P}_n$  mit  $p(x_i) = f(x_i)$  ( $i = 0, \dots, n$ ) das Interpolationspolynom zu paarweise verschiedenen Stützstellen  $x_i \in [a, b]$  ( $i = 0, \dots, n$ ). Dann gilt:

$$\forall x \in [a, b] \exists \xi = \xi(x) \in (a, b) : f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

*Beweis.* Siehe (9.4)

□

**Beispiel 9.2** (Berechnung von Logarithmentafeln: Briggs, 17. Jhd).

$$f(x) = \log_{10}(x), \quad x \in [55, 58]$$

Wähle Stützstellen:

$$x_0 = 55, \quad x_1 = 56, \quad x_2 = 57, \quad x_3 = 58$$

Es seien

$$\log_{10}(55), \log_{10}(56), \log_{10}(57) \text{ und } \log_{10}(58)$$

bereits bekannt. Berechne eine Näherung von  $f$  an bei  $\log_{10}(56.5)$

→ Interpolationspolynom  $p$ :

$$\log_{10}(65.5) = 1.752048448$$

$$p(56.5) = 1.75204845$$

$$f'(x) = \frac{1}{\ln(10)x}$$

$$f''(x) = -\frac{1}{\ln(10)x^2}$$

$$f^{(3)}(x) = \frac{2}{\ln(10)x^3}$$

$$f^{(4)}(x) = -\frac{6}{\ln(10)x^4}$$

Für  $x \in [55, 58]$  :

$$|f^{(4)}(x)| \leq \frac{6}{55^4 \ln(10)} \Rightarrow$$

$$|\log_{10}(56.5) - p(56.5)| \leq 1.5 * 0.5 * 0.5 * 1.5 * \frac{6}{55^4 \ln(10) \frac{1}{4!}}$$

$$\approx 6.7 * 10^{-9}$$

Für den Beweis von (9.1) wird folgendes Lemma benötigt:

**Lemma 9.3.**

Sei  $f \in C^n([a, b])$  und sei für paarweise verschiedene  $x_i \in [a, b]$  ( $i = 0, \dots, n$ )  $y_i := f(x_i)$ . Dann existiert  $\xi \in (\min_i(x_i), \max_i(x_i))$ , sodass

$$\delta^n y[x_0, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \quad (x_0 < x_1 < \dots < x_n)$$

*Beweis.* Sei  $p$  ein Interpolationspolynom zu  $(x_i, y_i)_{i=0}^n$ . Setzt man  $d := p - f$ , so gilt  $d(x_i) = 0$  für  $i = 0, \dots, n$ .

$n$ -maliges anwenden des Mittelwertsatzes liefert paarweise verschiedene  $\xi_i$ , ( $i = 0, \dots, n-1$ ) mit  $d'(\xi_i) = 0$  für  $\xi_i \in (\min_j(x_j), \max_j(x_j))$ .

Dasselbe Argument angewandt auf  $d'$  liefert  $\eta_0, \dots, \eta_{n-2}$  mit  $d''(\eta_i) = 0$  für  $i = 0, \dots, n-2$ .

Wiederhole dies bis:

Es existiert  $\rho_0$  mit  $d^{(n)}(\rho_0) = 0$

$\Rightarrow f^{(n)}(\rho_0) = p^{(n)}(\rho_0) = n! \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$ ,

da  $\delta^n y[x_0, \dots, x_n]$  der Koeffizient von  $x^n$  in  $p$  ist. □



**Bemerkung.**

Für  $n = 1$  ist Lemma (9.3) der Mittelwertsatz (oder Satz von Rolle) aus Analysis I:

$$\exists \xi : \frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2} = f'(\xi)$$

**9.4 (Beweis von (9.1)).**

Sei  $\bar{x} \in [a, b]$  beliebig.

1. **Fall**  $\bar{x} = x_i$  für ein  $i \in \{0, \dots, n\}$ , so ist wegen  $p(x_i) - f(x_i) = 0$  nichts zu zeigen.
2. **Fall**  $\bar{x} \neq x_i$  für alle  $i \in \{0, \dots, n\}$ . Sei  $\bar{p}$  das Interpolationspolynom mit  $\deg(\bar{p}) \leq n + 1$  zu  $(x_i, f(x_i))_{i=0}^n$  und  $(\bar{x}, f(\bar{x}))$ . Die Newton'sche Interpolationsformel liefert dann

$$\begin{aligned} \bar{p}(x) &= p(x) + \prod_{i=0}^n (x - x_i) \delta^{n+1} y[x_0, \dots, x_n, \bar{x}] \\ &\stackrel{(9.3)}{=} p(x) + \prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \end{aligned}$$

Für  $x = \bar{x}$  gilt  $\bar{p}(\bar{x}) = f(\bar{x})$ . Damit ist Satz (9.1) für  $x \in [a, b]$  gezeigt.  $\square$

Fragen:

- Für welche Wahl der Stützstellen  $x_i$  ( $i = 0, \dots, n$ ,  $n$  fest) ist

$$\max_{x \in [a, b]} \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right|$$

minimal? (Siehe Abschnitt 10)

- Wie wirken sich Fehler in den Funktionsauswertungen (etwa Messfehler oder Rechenfehler) auf das Interpolationspolynom aus?

**Satz 9.5** (Lagrange Interpolationsformel).

Das Interpolationspolynom  $p$  zu  $(x_i, y_i)_{i=0}^n$  ist gegeben durch

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

mit

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}$$

$$\text{Beweis. } \deg(l_i) = n, l_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } j = i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Rightarrow p(x_j) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x_j) = y_j \quad \square$$

**Bemerkung.**

Lagranges und Newtons Interpolationsformeln liefern beide das gleiche Polynom nur in unterschiedlichen Darstellungen.

**Definition 9.6.**

$$\Lambda_n := \max_{x \in [a, b]} \sum_{i=0}^n |l_i(x)|$$

heißt die **Lebesgue Konstante** zu den Stützstellen  $x_i, i = 0, \dots, n$  auf dem Intervall  $[a, b]$ .

Damit gilt:

**Satz 9.7.**

Sei  $p$  das Interpolationspolynom (vom Grad  $\leq n$ ) zu  $(x_i, y_i)_{i=0}^n$  und  $\tilde{p}$  das Interpolationspolynom zu  $(x_i, \tilde{y}_i)_{i=0}^n$ , so gilt:

$$\max_{x \in [a, b]} |p(x) - \tilde{p}(x)| \leq \Lambda_n \max_{i=0, \dots, n} |y_i - \tilde{y}_i|$$

*Beweis.* klar  $\square$

**Beispiel 9.8.**

- Für äquidistante Stützstellen  $x_i = a + i \frac{b-a}{n}$  ( $i = 0, \dots, n$ ) ist

$$\Lambda_{10} \approx 40$$

$$\Lambda_{20} \approx 3 * 10^4$$

$$\Lambda_{40} \approx 10^{10}$$

$$\Lambda_n \approx \frac{2^n}{\ln(n) * e * n} \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

$\Rightarrow$  Vorsicht bei Polynominterpolation mit vielen äquidistanten Stützstellen!

In §10 werden wir Stützstellen kennenlernen mit  $\Lambda_n \leq 4$  für  $n \leq 100$ .