In der Praxis:

Wir gehen Abschnittsweise vor und Betrachten z.B. nur das Intervall $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ mit $x_{i+1} - x_i = h$.
Das Polynom sieht dann wie folgt aus:

$$P_1(x) = f(x_i) + (x - x_i)\,\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$$

$$\Rightarrow P_1'(x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

also

$$f'(x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \frac{h}{2} f''(\tau)$$

Wir sprechen von einem Diskretisierungsfehler der Ordnung h: $\mathcal{O}(h)$ und schreiben:

$$f'(x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Durch hinzunahme von mehr Stützstellen können wir den Fehler formal zu einer höheren Ordnung bringen.

$$P_2(x) = f[x_{i-1}] + (x - x_{i+1}) f[x_{i-1}, x_i] + (x - x_{i-1})(x - x_i) f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}]$$

$$\Rightarrow P_2'(x) = f[x_{i-1}, x_i] + \big((x - x_i) + (x - x_{i+1})\big) f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}]$$

$$= f[x_{i-1}, x_i] + (2x - x_i - x_{i+1}) f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}]$$

$$= \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + (2x - x_i - x_{i+1}) \frac{1}{2h}\left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h}\right)$$

$$= \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + (2x - x_i - x_{i+1}) \frac{1}{2h^2}\left(-2f_i + f_{i-1} + f_{i+1}\right)$$

An der Stelle x_i reduziert sich der Therm zu:

$$P_2'(x) = \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1})$$

$$\Rightarrow f'(x) = \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1}) + O(h^2) \qquad \text{3-Punkt-Formel}$$

In analoger Weise lassen sich Ableitungen höherer Ordnung konstruieren, z.B.:

$$f''(x_i) = \frac{1}{h^2}(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})$$

3.2 Einfache Integrationsformeln

Aufgabenstellung

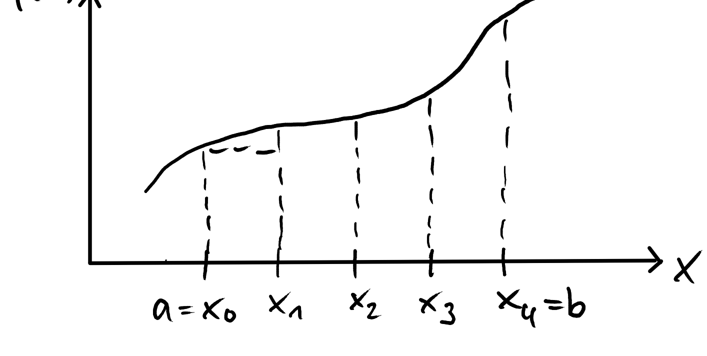
$$\underset{a,b}{E}\{f\} = \int_a^b f(x)\,dx \qquad \text{(Funktional)}$$

Unter der Voraussetzung, dass das Integral nicht uneigentlich und die Funktion $f(x)$ auf dem Intervall $[a,b]$ nicht singulär ist.

Vorgehen:

Approximation der Funktion durch ein Polynom, welches dann integriert werden kann:

In der Praxis:



Im Intervall $I = [x, x_{i+1}]$ war das Polynom 0-ter Ordnung einfach: $P_0(x) = f(x_i) \Rightarrow \underset{x_i, x_{i+1}}{E}\{f\} = (x_{i+1} - x_i) f_i + O(x_{i+1} - x_i)$

äquidistante Stützstellen:

$$\Rightarrow \underset{a,b}{E}\{F\} = \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f_i + \underset{a,b}{R^0}\{f\}$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1} h f_i + O(h) \qquad \text{(Kastenregel)}$$

1ste Ordnung:

$$\underset{x_i, x_{i+1}}{E}\{f\} = (x_{i+1} - x_i) \frac{f_{i+1} + f_i}{2}$$

2te Ordnung

$$\underset{x_{i-1}, x_{i+1}}{E}\{f\} = (x_{i+1} - x_{i-1}) \frac{1}{6} (f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

<u>Trapezregel:</u> (äquidistant)

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n) + O(h^2)$$

<u>Simpsonsche Regel:</u> (äquidistant, n gerade)

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \ldots + 4f_{n-1} + f_n) + O(h^4)$$

Alle Terme proportional zu h^3 heben sich weg!

Kochrezept:

a) Integriere alles analytisch was geht!

b) Überführe uneigentliche Integrale in eigentliche durch betrachten der Integranden:

- Auf welchen Intervallen ist der Integrand signifikant von 0 verschieden

- Gibt es analytisch integrierbare Approximationen des Integranden für sehr kleine/große Argumente?

c) Integriere mit Stützstellenzahl n. Variiere n um eine Abschätzung des Fehlers zu bekommen.

Kontrollmechanismus zur Abschätzung des Fehlers an Hand der Simpsonschen Regel mit der Stützstellenzahl n:

$$\underset{a,b}{E} = \underset{a,b}{E}^{(n)} + (b-a)\frac{h^4}{180} f^{(4)}(\tau) = \underset{a,b}{E}^{(n)} + \frac{(b-a)^5}{180} f^{(4)}(\tau) \frac{1}{n^4}$$

Mit doppelter Stützstellenzahl $2n$:

$$\underset{a,b}{E} = \underset{a,b}{E}^{(2n)} + \frac{(b-a)^5}{180} f^{(4)}(\tau') \frac{1}{(2n)^4}$$

Wir machen nun die Annahme $f^{(4)}(\tau) \approx f^{(4)}(\tau')$, dann gilt für den Fehlerterm:

$$R^{(2n)} \approx \frac{1}{16} R^{(n)} \approx \frac{1}{15} (E^{(2n)} - E^{(n)}$$

Dies erlaubt die Abschätzung des Fehlers der Approximation mit $2n$ Stützstellen, wenn man $E^{(n)}$ und $E^{(2n)}$ berechnet hat.
Eine Verbesserung von $E^{(2n)}$ ist damit auch möglich:

$$E^{(2n)}_{neu} = E^{(2n)} + \frac{1}{15}\left(E^{(2n)} - E^{(n)}\right)$$

Dieser Ansatz kann systematisiert werden und führt zur sogenannten Romberg-Integration, ein Beispiel für die sogenannte Richardson-Extrapolation.

3.3 Integration vom Gauß-Typ

Verallgemeinerung der Aufgabenstellung: $E_\rho\{f\} = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$ mit der Integrationsdichte $\rho(x) \geq 0 \ \forall x$.
Die Funktion $f(x)$ kann als Interpolationspolynom geschrieben werden:

$$f(x) = P_n(x) + R_n \quad \text{mit} \quad P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x)}$$

$$\text{und} \quad R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\tau)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

Damit kann das gesuchte Integral geschrieben werden als:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f_i \bar{\omega}_i + \tilde{R}_n$$

$$\text{wobei} \quad \bar{\omega}_i = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\,\omega'(x_i)}\rho(x)dx$$

$$\text{und} \quad \tilde{R}_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\tau[x])}{(n+1)!}\omega(x)\rho(x)dx$$

Die $\tilde{\omega}_i$ nennt man Gewichtsfunktion und sie hängt von $[a,b]$, $\rho(x)$ und $\{x_i\}$ ab. Sie können im Prinzip mit obiger Formel bestimmt werden. Der Fehlerterm $\tilde{R}_n$ verschwindet und die Integration wird exakt, falls $f^{(n+1)}(\tau) = 0$ ist. Dies ist immer dann der Fall, wenn f ein Polynom vom Grad n oder kleiner ist. Durch geschickte Wahl der Stützstellen ist es möglich, die Integrationsformel für Polynome höheren Grades exakt zu machen und für allgemeine Integranden die Genauigkeit zu erhöhen.

<u>orthogonale Polynome:</u>

Der Funktionsraum L_2 wird durch das Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) \rho(x)\, dx$$

festgelegt, mit $\rho(x) > 0$ in $[a,b]$. Orthogonale Polynome $f_0, f_1, \ldots, f_n$ vom Grad $0, 1, \ldots, n$ haben für die Gewichtsfunktion $\rho(x)$ im Intervall $[a,b]$ die Eigenschaft

$$\langle f_i, f_j \rangle = 0 \quad \text{falls} \quad i \neq j$$

<u>Beispiel</u>: Tschebyscheff Polynome $T_n(x)$ für $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ auf $[-1,1]$. Es gilt

$$\int_{-1}^{1} T_k(x)\, T_j(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0 & k \neq j \\ \pi/2 & k = j > 0 \\ \pi & k = j = 0 \end{cases} \qquad k,j \in \mathbb{N}$$

<u>Beweis</u>: Substituiere:

$$x = \cos t\,,\quad T_k(x) = \cos(kt)\,,\quad T_j(x) = \cos(jt)$$

und $dx = -\sin(t)\,dt$, $\sqrt{1-x^2} = \sin(t)$

$$\Rightarrow \int_{-1}^{1} T_k(x)\, T_j(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = -\int_{-\pi}^{0} \cos(kt)\cos(jt)\, \frac{\sin(t)}{\sin(t)}\, dt$$

$$= \int_{0}^{\pi} \cos(kt)\cos(jt)\, dt = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(kt)\cos(jt)\, dt$$

Die besondere Eigenschaft der orthogonalen Polynome ist, dass sie eine Basis bilden und jedes Polynom vom Grad n als Linearkombination von $f_0, \dots, f_n$ geschrieben werden kann. Daraus folgt insbesondere, dass <u>jedes</u> Polynom vom Grad n orthogonal zu f_{n+1} ist! Wir wählen nun $\omega = f_{n+1}$ mit dessen Nullstellen als Stützstellen. Dann ist die Integrationsformel exakt, wenn $f(x)$ ein Polynom vom Grad $2n+1$! Sei $f(x) = P_{2n+1}(x)$, dann gibt es Polynome $P_n^{(1)}$ und $P_n^{(2)}$, so dass

$$P_{2n+1}(x) = f_{n+1} P_n^{(1)} + P_n^{(2)}(x)$$

Die durch Polynomdivision gefunden werden können.

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)\,\varrho(x)\,dx = \int_a^b P_{2n+1}(x)\,\varrho(x)\,dx$$

$$= \underbrace{\int_a^b f_{n+1}(x)\,P_n^{(1)}(x)\,\varrho(x)\,dx}_{=0} + \int_a^b P_n^{(2)}(x)\,\varrho(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} P_n^{(2)}(x_i)\,\omega_i$$

Dieses Ergebnis ist exakt, da $P_n^{(2)}$ vom Grad n ist. Die $\{x_i\}$ sind die Nullstellen von $f_{n+1}(x)$, also gilt:

$$f(x_i) = P_{2n+1}(x_i) = f_{n+1}(x)\,P_n^{(1)}(x_i) + P_n^{(2)}(x_i) = P_n^{(2)}(x_i)$$

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)\,\varrho(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f_i\,\omega_i$$