

Kapitel 4

Numerische Quadratur

4.1 Einführung

Bemerkung 4.1 *Aufgabenstellung.* Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine integrierbare Funktion. Die Berechnung von

$$I(f) : C([a, b]) \rightarrow \mathbb{R}, \quad f \mapsto \int_a^b f(x) dx \quad (4.1)$$

kann schwierig oder sogar analytisch nicht durchführbar sein. Aus diesem Grunde benötigt man numerische Verfahren zur Approximation von $I(f)$. Diese Verfahren sollten den üblichen Ansprüchen an numerische Verfahren genügen: Genauigkeit, Effizienz, Stabilität. Zugehörige Konzepte wurden bereits in CoMa 2 eingeführt und werden hier teilweise wiederholt und erweitert. \square

Lemma 4.2 *Eigenschaften des Operators $I(f)$.*

- i) *Der Operator I ist linear.*
- ii) *Der Operator I ist positiv. Das bedeutet, aus $f(x) \geq 0$ für alle $x \in [a, b]$ folgt $I(f) \geq 0$.*
- iii) *Die absolute Kondition von I bezüglich der Norm $\|\cdot\|_\infty$ ist*

$$\kappa_{\text{abs}}(I(f)) = b - a.$$

- iv) *Die relative Kondition von I ist beschränkt durch*

$$\kappa_{\text{rel}}(I(f)) = \kappa(I(f)) = (b - a) \frac{\|f\|_\infty}{|I(f)|}. \quad (4.2)$$

Beweis: *i) und ii)* folgen direkt aus Eigenschaften des Integrals.

iii). Sei $\Delta f \in C([a, b])$. Dann folgt mit der Linearität von I

$$\begin{aligned} |I(f) - I(f + \Delta f)| &= |I(f) - I(f) - I(\Delta f)| = \left| \int_a^b \Delta f(x) dx \right| \leq \int_a^b |\Delta f(x)| dx \\ &\leq (b - a) \max_{x \in [a, b]} |\Delta f(x)| = (b - a) \|f - (f + \Delta f)\|_\infty. \end{aligned}$$

Die Abschätzung ist scharf, denn im Fall, dass Δf eine Konstante ist, gilt die Gleichheit. Damit ist

$$\kappa_{\text{abs}}(I(f)) = \sup_{\Delta f \in C([a, b])} \frac{|I(f) - I(f + \Delta f)|}{\|f - (f + \Delta f)\|_\infty} = b - a.$$

- iv). Für den relativen Fehler gilt nach der Abschätzung aus dem Beweis von iii)

$$\frac{|I(f) - I(f + \Delta f)|}{|I(f)|} = \frac{|I(\Delta f)|}{|I(f)|} \leq (b - a) \frac{\|f\|_\infty}{|I(f)|} \frac{\|\Delta f\|_\infty}{\|f\|_\infty}.$$

Damit gilt für die relative Konditionszahl

$$\frac{|I(\Delta f)|}{|I(f)|} \frac{\|f\|_\infty}{\|\Delta f\|_\infty} \leq (b-a) \frac{\|f\|_\infty}{|I(f)|} = \sup_{\Delta f \in C([a,b])} (b-a) \frac{\|f\|_\infty}{|I(f)|} = \kappa(I(f)).$$

■

Beispiel 4.3 *Zur relativen Kondition.* Die obere Schranke für die relative Kondition (4.2) ist sehr groß in dem Fall, dass die Funktion große Funktionswerte (im Betrag) besitzt, aber der Betrag des Integrals relativ klein ist. Dieser Fall tritt insbesondere bei oszillierenden Funktionen ein.

Betrachte für $n = 0, 1, \dots$ die Funktionen

$$f_n(x) = \frac{(2n+1)\pi}{2} \sin((2n+1)\pi x), \quad x \in [0, 1],$$

siehe Abbildung 4.1 Es gilt

$$\begin{aligned} I(f_n) &= \frac{(2n+1)\pi}{2} \int_0^1 \sin((2n+1)\pi x) dx \\ &= -\frac{(2n+1)\pi}{2} \frac{1}{(2n+1)\pi} \cos((2n+1)\pi x) \Big|_0^1 \\ &= -\frac{1}{2} (\cos((2n+1)\pi) - \cos(0)) = 1. \end{aligned}$$

Andererseits gilt

$$\|f_n\|_\infty = \frac{(2n+1)\pi}{2} \max_{x \in [0,1]} |\sin((2n+1)\pi x)| = \frac{(2n+1)\pi}{2}.$$

Damit folgt für die Schranke bezüglich der relativen Konditionszahl

$$\kappa(I(f_n)) = \frac{(2n+1)\pi}{2} \rightarrow \infty \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

□

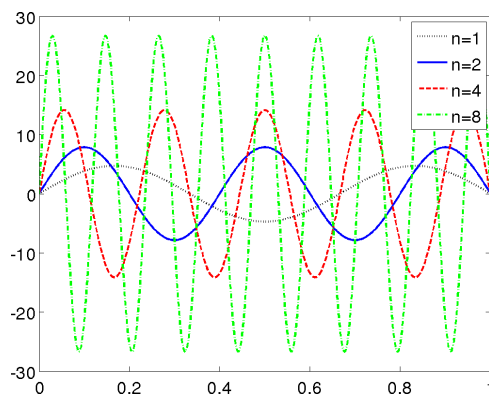


Abbildung 4.1: Beispiel 4.3. Die Funktionen $f_n(x)$.

Bemerkung 4.4 *Weitere Kriterien zur Bewertung einer Quadraturformel.* Die Kosten und die Genauigkeit einer Quadraturformel sind für die Praxis wichtige Kriterien.

Als Maß für die Kosten verwendet man die Anzahl N der benötigten Funktionsauswertungen von $f(x)$. Eine Quadraturformel mit N Funktionsauswertungen wird mit I_N bezeichnet.

Man erwartet, dass man das Integral mit wachsendem Aufwand beliebig genau approximieren kann: $\lim_{N \rightarrow \infty} I_N(f) = I(f)$. Die Quadraturformel I_N ist von Ordnung q , falls

$$|I(f) - I_N(f)| = \mathcal{O}(N^{-q})$$

gilt.

Die Effizienz, also das Verhältnis von Genauigkeit und Aufwand, spielt die wesentliche Rolle in Anwendungen. Eine hohe Genauigkeit hat man, wenn der Fehler klein ist. Nimmt man als Genauigkeit das Reziproke des Fehlers, dann ist die Effizienz durch

$$\frac{1}{|I(f) - I_N(f)| N} \quad (4.3)$$

gegeben. Man beachte, dass die Effizienz von $f(x)$ abhängt. Das bedeutet, eine Quadraturformel kann für eine Funktion(-enklasse) effizient sein und für eine andere nicht. \square

4.2 Newton–Cotes–Formeln

Bemerkung 4.5 *Inhalt.* Die Newton–Cotes¹–Formeln wurden bereits in CoMa 2 eingeführt. In diesem Abschnitt werden sie hinsichtlich Aufwand und Kondition untersucht. \square

Bemerkung 4.6 *Prinzipielle Herangehensweise und Aufwand.* Das Intervall $[a, b]$ wird durch ein Gitter

$$\Delta = \{a = z_0 < z_1 < \dots < z_{m-1} < z_m = b\}, \quad I_k = [z_{k-1}, z_k],$$

zerlegt. Dann kann man $I(f) = I_\Delta(f)$ in der Form

$$I_\Delta(f) = \sum_{k=1}^n \int_{I_k} f(x) dx$$

darstellen. In jedem der Teilintervalle wird $f(x)$ nun durch eine Funktion interpoliert, die man analytisch integrieren kann, nämlich durch ein Polynom $p_{nk} \in P_n$. Für gewisse Stellen

$$z_{k-1} \leq x_{0k} < \dots < x_{nk} \leq z_k$$

gilt also

$$p_{nk}(x_{ik}) = f(x_{ik}), \quad i = 0, \dots, n.$$

Dazu sind $(n+1)$ Funktionsauswertungen nötig. Einsetzen der Interpolierenden und Integration des Interpolationspolynoms liefert

$$\int_{I_k} f(x) dx \approx \int_{I_k} p_{nk}(x) dx = \sum_{i=0}^n h_k \lambda_{ik} f(x_{ik})$$

mit $h_k = z_k - z_{k-1}$ und den Gewichten

$$\lambda_{ik} = \frac{1}{h_k} \int_{I_k} L_{ik}(x) dx$$

¹Roger Cotes (1682 – 1716)

mit den Lagrange-Polynomem $L_{ik}(x)$ definiert in (3.7). Durch Summation erhält man die Quadraturformel

$$I_{\Delta}(f) = \sum_{k=1}^m \sum_{i=0}^n h_k \lambda_{ik} f(x_{ik}). \quad (4.4)$$

Falls man Funktionsauswertungen in den Knoten z_k , $k = 1, \dots, m-1$, braucht, kann man diese in zwei Teilintervallen nutzen. Damit gilt für den Aufwand $mn+2 \leq N \leq m(n+1)$. \square

Lemma 4.7 Eigenschaften des Operators $I_{\Delta}(f)$. Sei $I_{\Delta} : C([a, b]) \rightarrow \mathbb{R}$ der in (4.4) definierte Operator.

- i) Der Operator I_{Δ} ist linear.
ii) Eine obere Schranke für die absolute Kondition ist gegeben durch $\gamma(b-a)$ mit

$$\gamma = \max_{k=1, \dots, m} \left(\sum_{i=0}^n |\lambda_{ik}| \right). \quad (4.5)$$

- iii) Eine obere Schranke für die relative Kondition ist gegeben durch

$$\kappa(I_{\Delta}(f)) = \gamma(b-a) \frac{\|f\|_{\infty}}{|I_{\Delta}(f)|}.$$

Beweis: i). Diese Eigenschaft folgt aus der Linearität der Summation.

ii). Sei $\Delta f \in C([a, b])$. Aus der Linearität von I_{Δ} , der Linearität der Interpolation und der Dreiecksungleichung folgt

$$\begin{aligned} |I_{\Delta}(f) - I_{\Delta}(f + \Delta f)| &= |I_{\Delta}(\Delta f)| \leq \sum_{k=1}^m \sum_{i=0}^n h_k |\lambda_{ik}| |\Delta f(x_{ik})| \\ &\leq \left(\sum_{k=1}^m h_k \left(\sum_{i=0}^n |\lambda_{ik}| \right) \right) \|\Delta f\|_{\infty} \\ &\leq \max_{k=1, \dots, m} \left(\sum_{i=0}^n |\lambda_{ik}| \right) \left(\sum_{k=1}^m h_k \right) \|\Delta f\|_{\infty} \\ &= \gamma(b-a) \|\Delta f\|_{\infty}. \end{aligned}$$

Damit ist die obere Schranke für die absolute Kondition gezeigt.

iii). Mit der Abschätzung für die absolute Konditionszahl erhält man sofort

$$\frac{|\Delta I_{\Delta}(f)|}{|I_{\Delta}(f)|} \frac{\|f\|_{\infty}}{\|\Delta f\|_{\infty}} \leq \gamma(b-a) \frac{\|f\|_{\infty}}{|I_{\Delta}(f)|}.$$

Da die relative Kondition das Supremum der linken Seite ist, hat man eine obere Schranke erhalten. \blacksquare

Bemerkung 4.8 Der Wert von (4.5), Quadraturformel vom positiven Typ. Die konstante Funktion $p_0 = 1$ wird exakt interpoliert. Damit gilt

$$h_k = \int_{I_k} 1 \, dx = \sum_{i=0}^n h_k \lambda_{ik} \cdot 1 = h_k \sum_{i=0}^n \lambda_{ik}.$$

Es folgt

$$\sum_{i=0}^n \lambda_{ik} = 1.$$

Gilt $\lambda_{ik} \geq 0$ für alle $i = 0, \dots, n$, dann gilt auch $\gamma = 1$. Anderenfalls erhält man mit Hilfe der Dreiecksungleichung $\gamma > 1$.

Eine Quadraturformel wird als Formel vom positiven Typ bezeichnet, wenn $\lambda_{ik} \geq 0$ für alle $i = 0, \dots, n$. Sie ist in dem Sinne stabil, dass der Faktor γ die Kondition nicht zusätzlich erhöht. Vom Standpunkt der Numerik ist diese Stabilität sehr wichtig. Insbesondere folgt für solche Quadraturformeln, dass I_Δ positiv ist. Deswegen ist man in der Praxis nur an Quadraturformeln vom positiven Typ interessiert. \square

Bemerkung 4.9 *Summierte Newton–Cotes–Formeln.* In CoMa 2 wurden summierte Newton–Cotes–Formeln eingeführt. Diese erhält man durch die Wahl äquidistanter Stützstellen

$$x_{ik} = z_{k-1} + i \frac{h_k}{n}, \quad i = 0, \dots, n, \quad h_k = z_k - z_{k-1}.$$

Das sind sogenannte geschlossene Newton–Cotes–Formeln, da die Randpunkte des Intervalls zu den Stützstellen gehören. Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über summierte Newton–Cotes–Formeln mit

$$h = \max_{k=1, \dots, m} h_k.$$

n	Gewichte pro Intervall						Fehler	Name
1		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$			$h^2 \ f''\ _\infty$	Trapezregel
2		$\frac{1}{6}$		$\frac{4}{6}$		$\frac{1}{6}$	$h^4 \ f^{(4)}\ _\infty$	Simpson ² –Regel
3		$\frac{1}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{3}{8}$	$h^4 \ f^{(4)}\ _\infty$	$\frac{3}{8}$ –Regel
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$		$\frac{12}{90}$		$\frac{32}{90}$	$h^6 \ f^{(6)}\ _\infty$	Milne–Regel
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$		$\frac{50}{288}$		$\frac{50}{288}$	$h^6 \ f^{(6)}\ _\infty$	
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$		$\frac{27}{840}$		$\frac{272}{840}$	$h^8 \ f^{(8)}\ _\infty$	Weddle–Regel

Tabelle 4.1: Newton–Cotes–Formeln. Der Fehler ist bis auf eine von h und f unabhängige Konstante angegeben.

Die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen ist in jedem Teilintervall I_k konstant. Damit ist die Gesamtanzahl der Funktionsauswertungen proportional zur Anzahl der Intervalle. Für äquidistante Gitter

$$\Delta_h = \{z_k = a + kh : k = 0, \dots, m\}, \quad h = \frac{b-a}{m},$$

ist sie also proportional zu h^{-1} . Damit folgt für die Ordnung aus (4.3)

$$|I(f) - I_N(f)| = \mathcal{O}(N^{-q}) = \mathcal{O}(h^q).$$

Die angegebenen Konvergenzraten in Tabelle 4.1 sieht man in der Praxis nur, wenn die zu integrierende Funktion die angegebenen Glattheitsanforderungen erfüllt.

²Thomas Simpson (1710 – 1761)

Des Weiteren sollten die Faktoren $\|f^{(q)}\|_\infty$ nicht zu schnell wachsen, damit der Fehler klein ist. Für Funktionen solcher Art sind die Newton–Cotes–Formeln effizient, insbesondere für $n \in \{2, 4, 6\}$.

Es stellt sich jedoch heraus, dass bei der Nutzung von Polynomen siebten oder höheren Grades immer mindestens ein Gewicht negativ ist. Damit sind die resultierenden Quadraturformeln nicht mehr vom positiven Typ und für die Numerik uninteressant. \square

Beispiel 4.10 *Funktion mit schwer zu berechnender Stammfunktion, summierte Trapezregel.* Gesucht ist das bestimmte Integral von $f(x) = \sqrt{x+1} + \sqrt{x}$ im Intervall $[1, 2]$. Bei diesem Integranden hilft auch MAPLE nicht weiter. Obwohl MAPLE keine Stammfunktion bestimmen kann, wird trotzdem als Integralwert

$$\int_1^2 \sqrt{x+1} + \sqrt{x} \, dx \approx 1.925537468$$

angegeben. Dieser wurde mit einem der numerischen Verfahren berechnet (Clenshaw–Curtis–Quadratur–Verfahren).

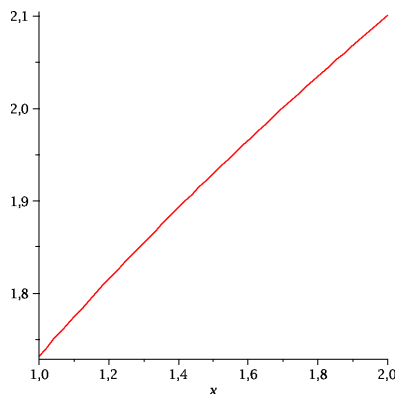


Abbildung 4.2: Integrand zum Beispiel 4.10.

Mit der summierten Trapezregel erhält man für unterschiedliche Anzahlen von äquidistanten Intervallen die in Tabelle 4.2 angegebenen Ergebnisse. Man sieht deutlich die Konvergenz zweiter Ordnung. \square

4.3 Gauß–Christoffel–Quadratur

Bemerkung 4.11 *Motivation.* Gegeben sei eine Funktion $f(x)$, welche in $[a, b]$ (gewichtet) integriert werden soll. Dabei wird zunächst nur der Fall betrachtet, dass das Intervall nicht weiter zerlegt wird, dass also noch keine summierte Quadraturformel betrachtet wird. Man möchte also das Integral

$$\int_a^b f(x)\mu(x) \, dx$$

durch

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i) \tag{4.6}$$

approximieren. Hierbei ist $\mu(x)$ eine gegebene Funktion, eine sogenannte Gewichtsfunktion. Bei den Newton–Cotes–Formeln hat man (für $\mu(x) = 1$) ausgehend von

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler zum MAPLE-Wert	Konvergenz
1	1.91652690	0.0090105697	
2	1.92324335	0.0022941135	1.97
4	1.92496095	0.0005765162	1.99
8	1.92539314	0.00014432451	2
16	1.92550137	3.6093497e-05	2
32	1.92552844	9.02415e-06	2
64	1.92553521	2.256086e-06	2
128	1.92553690	5.6402454e-07	2
256	1.92553733	1.4100632e-07	2
512	1.92553743	3.5251594e-08	2
1024	1.92553746	8.8129013e-09	2
2048	1.92553747	2.2032198e-09	2
4096	1.92553747	5.5080385e-10	2

Tabelle 4.2: Beispiel 4.10. Konvergenz für summierte Trapezregel.

den $(n + 1)$ vorgegebenen (äquidistanten) Knoten $x_i \in [a, b]$ die Gewichte λ_i so bestimmt, dass man Polynome bis zum Grad n exakt integrieren kann.

Nun hat man schon bei der Interpolation gesehen, dass eine äquidistante Zerlegung von $[a, b]$ bei weitem nicht ideal ist, siehe Abschnitt 3.2.3. Man kann vermuten, dass man mit einer anderen Wahl der Knoten auch für die Quadratur bessere Ergebnisse erzielt. Wenn man eine Quadraturformel mit $(n + 1)$ Knoten und $(n + 1)$ Gewichten verwendet, hat man insgesamt $(2n + 2)$ Freiheitsgrade, die man wählen kann. Damit lassen sich im Idealfall $(2n + 2)$ Koeffizienten eines Polynoms festlegen, welches exakt integriert werden soll. Das heißt, man kann also hoffen, durch eine geschickte Wahl der Knoten und Gewichte Polynome bis zum Grad $(2n + 1)$ exakt zu integrieren. In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass dies wirklich der Fall ist. Man nennt diese Quadratur die Gauß³-Christoffel⁴-Quadratur. \square

Definition 4.12 Gewichtsfunktion. Eine Funktion $\mu(x)$ heißt Gewichtsfunktion, wenn

- i) $\mu \in C([a, b])$ und $\mu(x) \geq 0$ in $[a, b]$,
- ii) die Momente

$$m_k = \int_a^b x^k \mu(x) dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

von $\mu(x)$ existieren und diese endlich sind,

- iii) für alle Polynome $p(x) \geq 0$ in $[a, b]$ mit $\int_a^b p(x)\mu(x) dx = 0$ folgt, dass $p(x) \equiv 0$. \square

Bemerkung 4.13 Gewichtsfunktionen. Man kann die Anforderungen an $\mu(x)$, insbesondere an die Glattheit, noch abschwächen.

Gewichtsfunktionen, welche in Anwendungen und innerhalb der Mathematik von Bedeutung sind, sind in Tabelle 4.3 gegeben. Für die Quadratur werden die Knoten und Gewichte nur in einem Referenzintervall hergeleitet. In der Praxis transformiert man zuerst das zu berechnende Integral auf das Referenzintervall und wendet danach die Quadraturformeln an.

Die Gewichtsfunktion induziert ein Skalarprodukt (Übungsaufgabe)

$$(f, g)_\mu = \int_a^b f(x)g(x)\mu(x) dx. \quad (4.7)$$

³Johann Carl Friedrich Gauß (1777 – 1855)

⁴Elwin Bruno Christoffel (1829 – 1900)

Referenzintervall $[a, b]$	$\mu(x)$
$[-1, 1]$	1
$[-1, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
$[0, \infty)$	e^{-x}
$(-\infty, \infty)$	e^{-x^2}

Tabelle 4.3: Wichtige Gewichtsfunktionen.

□

Lemma 4.14 *Notwendige Bedingung an die Knoten von (4.6) für exakte Quadratur von Polynomen vom Grad $(2n + 1)$. Ist (4.6) für alle Polynome $p \in P_{2n+1}$ exakt, so ist das Polynom*

$$p_{n+1}(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n) \in P_{n+1} \quad (4.8)$$

orthogonal zum Raum P_n bezüglich des Skalarproduktes (4.7).

Beweis: Sei $p_j \in P_n$, dann ist $p_j p_{n+1} \in P_{2n+1}$. Mit (4.6) folgt

$$\begin{aligned} (p_j, p_{n+1})_\mu &= \int_a^b p_j(x) p_{n+1}(x) \mu(x) dx = I_n(p_j p_{n+1}) \\ &= \sum_{i=0}^n \lambda_i p_j(x_i) \underbrace{p_{n+1}(x_i)}_{=0} = 0. \end{aligned}$$

■

Bemerkung 4.15 *Konsequenz von Lemma 4.14.* Lemma 4.14 zeigt, auf welche Art und Weise man die Knoten bestimmen soll. Man benötigt eine Menge orthogonaler Polynome $\{p_0, p_1, \dots, p_{n+1}\}$, wobei $\{p_0, \dots, p_n\}$ den Raum P_n aufspannen. Dann sind die gesuchten Knoten die Nullstellen von p_{n+1} . □

Bemerkung 4.16 *Zu orthogonalen Polynomen.* Nach Satz 1.31 gibt es zu $(\cdot, \cdot)_\mu$ genau ein System von Orthogonalpolynomen auf $[a, b]$, bei dem alle Basisfunktionen den Koeffizienten Eins vor dem Term höchsten Grades besitzen. Man kann auch zeigen, dass die Nullstellen dieser Polynome reell sind und alle in $[a, b]$ liegen, siehe zum Beispiel [Deuffhard and Hohmann, 2008, Satz 6.5]. Damit sind die Knoten für die Quadraturformel (4.6) festgelegt. □

Bemerkung 4.17 *Zu den Gewichten.* Sind die Knoten einer Quadraturformel erst einmal festgelegt, bleibt einem bei den Gewichten keine Wahl. Um zumindest Polynome aus P_n exakt integrieren zu können, bestimmt man bei vorgegebenen Werten $f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, das Lagrangesche Interpolationspolynom und aus der geforderten Exaktheit der Integration erhält man die Gewichte

$$\lambda_i = \frac{1}{b-a} \int_a^b L_{in}(x) dx \quad (4.9)$$

mit den Lagrange-Polynomem $L_{in}(x)$ definiert in (3.7), vergleiche auch CoMa 2. Es stellt sich heraus, dass man damit aber nicht nur die exakte Integration in P_n erhält, sondern sogar in P_{2n+1} . □

Lemma 4.18 *Ordnung der Quadraturformel (4.6).* Seien x_0, \dots, x_n die Nullstellen des $(n + 1)$ -ten Orthogonalpolynoms bezüglich des Skalarproduktes (4.7). Dann ist die Quadraturformel (4.6) genau dann exakt für alle Polynome aus P_{2n+1} , wenn sie für alle Polynome aus P_n exakt ist.

Beweis: Ist (4.6) für alle Polynome aus P_{2n+1} exakt, dann ist sie wegen $P_n \subset P_{2n+1}$ auch für alle Polynome aus P_n exakt.

Sei (4.6) für alle Polynome aus P_n exakt und sei $p \in P_{2n+1}$ ein beliebiges Polynom. Dann gibt es Polynome $q, r \in P_n$, so dass

$$p(x) = q(x)p_{n+1}(x) + r(x),$$

wobei $p_{n+1}(x)$ das Polynom aus (4.8) ist. Die Polynome $q(x)$ und $r(x)$ erhält man beispielsweise mit Polynomdivision $p(x)/p_{n+1}(x)$ oder mit Hilfe des Euklidischen Algorithmus. Damit folgt

$$\int_a^b p(x)\mu(x) dx = \int_a^b q(x)p_{n+1}(x)\mu(x) dx + \int_a^b r(x)\mu(x) dx = (q, p_{n+1})_\mu + \int_a^b r(x)\mu(x) dx.$$

Nach Lemma 4.14 ist der erste Term auf der rechten Seite gleich Null. Damit und mit der Voraussetzung, dass die Quadraturformel für Polynome n -ten Grades exakt ist, erhält man

$$\int_a^b p(x)\mu(x) dx = \int_a^b r(x)\mu(x) dx = I_n(r). \quad (4.10)$$

Andererseits gilt wegen $p_{n+1}(x_i) = 0, i = 0, \dots, n$,

$$I_n(r) = \sum_{i=0}^n \lambda_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n \lambda_i (q(x_i)p_{n+1}(x_i) + r(x_i)) = \sum_{i=0}^n \lambda_i p(x_i) = I_n(p). \quad (4.11)$$

Kombiniert man (4.10) und (4.11), so erhält man

$$\int_a^b p(x)\mu(x) dx = I_n(p),$$

also dass (4.6) alle Polynome aus P_{2n+1} exakt integriert. \blacksquare

Bemerkung 4.19 Positivität. Eine wichtige Motivation dafür, Newton–Cotes–Formel hoher Ordnung nicht zu verwenden war, dass diese Formeln nicht mehr vom positiven Typ sind, siehe Bemerkung 4.9. Die Eigenschaft der Positivität muss nun auch noch für die Quadraturformeln, bei denen die Stützstellen die Nullstellen von (4.8) sind und bei denen die Gewichte durch (4.9) gegeben sind, untersucht werden. Es stellt sich heraus, dass auch diese Eigenschaft vorhanden ist. \square

Lemma 4.20 Darstellung und Positivität der Gewichte. Die Gewichte (4.9) sind alle positiv und sie erfüllen die Gleichung

$$\lambda_i = \frac{1}{p'_{n+1}(x_i)p_n(x_i)} (p_n, p_n)_\mu. \quad (4.12)$$

Hierbei sind $\{p_0, \dots, p_n, p_{n+1}\}$ die orthogonalen Polynome bezüglich $(\cdot, \cdot)_\mu$, welche den Koeffizienten Eins vor dem Term höchster Ordnung besitzen.

Beweis: Zunächst wird die Positivität der Gewichte nachgewiesen. Sei $q \in P_{2n+1}$ ein Polynom, welches in allen Knoten bis auf den Knoten x_k verschwindet, also $q(x_i) = 0$ für $i \neq k$ und $q(x_k) \neq 0$. Da die Quadraturformel (4.6) nach Lemma 4.18 exakt für $q(x)$ ist, gilt

$$\int_a^b q(x)\mu(x) dx = \lambda_k q(x_k),$$

woraus

$$\lambda_k = \frac{1}{q(x_k)} \int_a^b q(x)\mu(x) dx \quad (4.13)$$

folgt. Da das Gewicht unabhängig von der konkret gewählten Funktion $q(x)$ ist, reicht es, für eine spezielle Funktion zu zeigen, dass λ_k positiv ist. Dazu wählt man

$$q(x) = \left(\frac{p_{n+1}(x)}{x - x_k} \right)^2 \in P_{2n} \subset P_{2n+1}.$$

Diese Funktion erfüllt die Bedingungen an $q(x)$. Speziell gilt

$$q(x_k) = ((x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n))^2 = (p'_{n+1}(x_k))^2,$$

da man beim Ableiten von $p_{n+1}(x)$ mit der Produktregel eine Summe von Produkten enthält, von denen alle Produkte mit dem Faktor $(x - x_k)$ beim Einsetzen von $x = x_k$ zu Null werden. Nur das Produkt, welches man bei der Ableitung des Faktors $(x - x_k)$ erhält, verschwindet nicht, wenn man $x = x_k$ wählt. Einsetzen in (4.13) ergibt

$$\lambda_k = \int_a^b \left(\frac{p_{n+1}(x)}{p'_{n+1}(x_k)(x - x_k)} \right)^2 \mu(x) dx > 0.$$

Die Nichtnegativität von λ_k folgt aus der Nichtnegativität des Integranden und die Positivität aus Eigenschaft iii) der Gewichtsfunktion, da das Polynom im Integranden nicht identisch verschwindet.

Nun muss noch Darstellung (4.12) gezeigt werden. Da die Darstellung nicht von $q(x)$ abhängt, reicht es wiederum, sie für ein geschickt gewähltes Polynom zu beweisen. Dazu setzt man diesmal

$$q(x) = \frac{p_{n+1}(x)p_n(x)}{x - x_k} \in P_{2n} \subset P_{2n+1}.$$

Auch diese Funktion besitzt die geforderten Eigenschaften. Mit Hilfe der Überlegungen im ersten Teil des Beweises gilt

$$q(x_k) = p'_{n+1}(x_k)p_n(x_k).$$

Das Polynom $p_{n+1}(x)/(x - x_k) \in P_n$ hat führenden Koeffizienten Eins. Damit findet man (durch Subtraktion) ein Polynom $r \in P_{n-1}$ mit

$$\frac{p_{n+1}(x)}{x - x_k} = p_n(x) + r(x).$$

Durch Einsetzen in (4.13) erhält man

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{1}{p'_{n+1}(x_k)p_n(x_k)} \int_a^b \frac{p_{n+1}(x)p_n(x)}{x - x_k} \mu(x) dx \\ &= \frac{1}{p'_{n+1}(x_k)p_n(x_k)} \left(\int_a^b p_n(x)p_n(x)\mu(x) dx + \int_a^b r(x)p_n(x)\mu(x) dx \right) \\ &= \frac{1}{p'_{n+1}(x_k)p_n(x_k)} (p_n, p_n)_\mu, \end{aligned}$$

da $p_n(x)$ senkrecht auf P_{n-1} bezüglich $(\cdot, \cdot)_\mu$ steht. ■

Beispiel 4.21 *Gauß–Legendre–Quadratur, Gauß–Quadratur.* Im Fall $\mu(x) = 1$ und $[a, b] = [-1, 1]$ sind die orthogonalen Polynome bereits aus Beispiel 1.30 bekannt – die Legendre–Polynome, siehe auch Bemerkung 1.39. Man beachte, dass man die Polynome für die Berechnung der Gewichte so normieren muss, dass der Koeffizient vor der höchsten Potenz gleich Eins ist. Die so erhaltenen Quadraturformeln nennt man Gauß–Legendre–Quadratur oder oft nur Gauß–Quadratur.

Wählt man $n = 1$, also zwei Stützstellen, so sind die Knoten durch die Nullstellen von $p_2(x) = x^2 - 1/3$ bestimmt

$$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.57735026919, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735026919.$$

Die Gewichte kann man beispielsweise mit (4.12) berechnen. Aus Symmetriegründen sind sie gleich. Man erhält, mit $p_1(x) = x$,

$$\lambda_1 = \frac{1}{p'_2(x_1)p_1(x_1)} \int_{-1}^1 p_1^2(x) dx = \frac{1}{2x_1x_1} \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3x_1^2} = 1 = \lambda_2.$$

In der Tat stellt man fest, dass man mit den beiden Stützstellen (x_1, λ_1) und (x_2, λ_2) Polynome dritten Grades exakt integrieren kann.

Die Summe der Gewichte jeder Gauß–Legendre–Quadraturformel in $[-1, 1]$ ist Zwei, da konstante Funktionen exakt integriert werden und die Quadraturformel für konstante Funktionen gleich der Summe der Gewichte ist. \square

Satz 4.22 Approximationsfehler. *Sei $f \in C^{2n+2}([a, b])$. Dann besitzt der Approximationsfehler der Gauß–Christoffel–Quadratur die Gestalt*

$$\int_a^b f(x)\mu(x) dx - I_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (p_{n+1}, p_{n+1})_\mu \quad (4.14)$$

für ein $\xi \in [a, b]$.

Beweis: Man interpoliert $f(x)$ durch das Hermite–Polynom $p \in P_{2n+1}$ zu den Stützstellen $(x_0, f(x_0)), (x_0, f'(x_0)), \dots, (x_n, f(x_n)), (x_n, f'(x_n))$, siehe Satz 3.13. Nach Satz 3.14 gilt dann

$$f(x) = p(x) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \omega_{n+1}^2(x) = p(x) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} p_{n+1}^2(x),$$

wobei man $\omega_{n+1} = p_{n+1}$ verwendet, siehe (3.8) und (4.8). Nun integriert man diese Gleichung und nutzt dann aus, dass $p(x)$ exakt integriert wird, Lemma 4.18, und $p(x)$ die Funktion $f(x)$ interpoliert, und damit $I_n(f) = I_n(p)$ ist,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\mu(x) dx &= \int_a^b p(x)\mu(x) dx + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b p_{n+1}^2(x)\mu(x) dx \\ &= I_n(f) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (p_{n+1}, p_{n+1})_\mu. \end{aligned}$$

■

Folgerung 4.23 Ordnung der summierten Gauß–Legendre–Quadratur. *Sei $[a, b]$ in ein äquidistantes Gitter mit m Intervallen I_k , $k = 1, \dots, m$, und Gitterweite h zerlegt. Sei $f \in C^{2n+2}([a, b])$. Dann besitzt die summierte Gauß–Legendre–Quadratur*

$$I_n^h(f) = \sum_{k=1}^m I_{n,k}(f)$$

die Ordnung $(2n+2)$, wobei $I_{n,k}(f)$ die Anwendung der Gauß–Legendre–Quadratur in I_k beschreibt.

Beweis: Sei $I_k = [x_{k-1}, x_k]$. Mit der Koordinatentransformation

$$x = \frac{x_k - x_{k-1}}{2}t + \frac{x_k + x_{k-1}}{2} = \frac{h}{2}t + \frac{x_k + x_{k-1}}{2}$$

gilt, unter Verwendung von (4.14),

$$\begin{aligned} \int_{I_k} f(x) dx &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 f(x(t)) dt = I_{n,k}(f) + \frac{h}{2} \frac{f^{(2n+2)}(\xi(\tau))}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 p_{n+1}^2(x(t)) dt \\ &\leq I_{n,k}(f) + \frac{h}{(2n+2)!} \|f^{(2n+2)}\|_\infty h^{2n+2}, \end{aligned}$$

da der Betrag eines jeden Faktors von $p_{n+1}(x)$ kleiner als h ist. Summation über die Intervalle ergibt mit $m = 1/h$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{k=1}^m \int_{I_k} f(x) dx \leq \sum_{k=1}^m I_{n,k}(f) + C \|f^{(2n+2)}\|_\infty h^{2n+3} \sum_{k=1}^m 1 \\ &= \sum_{k=1}^m I_{n,k}(f) + C \|f^{(2n+2)}\|_\infty h^{2n+2}, \end{aligned}$$

woraus die Aussage folgt. \square

Beispiel 4.24 *Funktion mit schwer zu berechnender Stammfunktion, summierte Gauß-Legendre-Formel.* Es wird die Funktion aus Beispiel 4.10 betrachtet. Verwendet man die summierte Gauß-Legendre-Formel mit zwei Quadraturpunkten, das heißt $n = 1$, so erhält man die in Tabelle 4.4 präsentierten Ergebnisse. Die vorhergesagte Konvergenz vierter Ordnung ist klar zu erkennen. \square

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler zum MAPLE-Wert	Konvergenz
1	1.92557382	3.6350414e-05	
2	1.92554011	2.6447248e-06	3.78
4	1.92553764	1.7354588e-07	3.93
8	1.92553748	1.0992488e-08	3.98
16	1.92553747	6.8939254e-10	4
32	1.92553747	4.3123949e-11	4
64	1.92553747	2.6953995e-12	4
128	1.92553747	1.6808777e-13	4
256	1.92553747	9.1038288e-15	4.21
512	1.92553747	6.6613381e-16	3.77

Tabelle 4.4: Beispiel 4.24. Konvergenz für summierte summierte Gauß-Legendre-Formel mit zwei Quadraturpunkten.

Bemerkung 4.25 *Zur Gauß-Christoffel-Quadratur.*

- Zur Berechnung der Knoten muss man nicht die Nullstellen eines Polynoms bestimmen. Das ist numerisch schlecht konditioniert. Man kann das Problem stattdessen so umformulieren, dass die gesuchten Nullstellen gleich den Eigenwerten einer Tridiagonalmatrix sind, siehe beispielsweise [Deuffhard and Hohmann, 2008, Kap. 9.3.2]. Die Berechnung dieser Eigenwerte ist numerisch stabiler. Die Gewichte kann man aus den zugehörigen Eigenvektoren bestimmen.
- Wenn man sich die Herleitung über das Eigenwertproblem genau ansieht, so stellt man fest, dass man nicht einmal die Gewichtsfunktion explizit kennen muss, sondern nur ihre ersten $2(n + 1)$ Momente.
- Bei den Gauß-Legendre-Quadraturformeln liegen die Knoten immer in (a, b) . Möchte man eine summierte Quadraturformel anwenden, so kann man keinen Funktionswert zwei Mal verwenden. Ist das Berechnen der Funktionswerte teuer, so kann dies ein Nachteil sein. Es gibt auch Quadraturformel mit nichtäquidistanten Stützstellen, bei denen die Intervallenden Knoten sind. Das sind sogenannte Gauß-Lobatto-Formeln. Durch das Festlegen der beiden Knoten verliert man aber im Vergleich zu den Gauß-Christoffel-Formeln zwei Ordnungen Genauigkeit. Ein einfaches Beispiel dafür ist die summierte Gauß-Legendre-Formel, die nach Folgerung 4.23 von vierter Ordnung ist, im Vergleich zur Trapezregel, welche eine Gauß-Lobatto-Formel ist und von zweiter Ordnung ist.

\square

4.4 Das Romberg-Verfahren

Bemerkung 4.26 *Idee.* Man kann auch mit Hilfe geschickter Kombination von Trapezregeln mit unterschiedlichen Schrittweiten ein Quadraturverfahren hoher Genauigkeit konstruieren. Dieses Verfahren beruht auf folgender Aussage. \square

Satz 4.27 Euler–Maclaurinsche⁵ Summenformel. Für $f \in C^\infty([a, b])$ besitzt die Trapezregel die asymptotische Fehlerentwicklung

$$I_{1,h}(f) = \int_a^b f(x) dx + c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \dots$$

mit Konstanten c_k , die von $f^{(2k-1)}(a)$ und $f^{(2k-1)}(b)$ abhängen.

Beweis: Siehe Literatur, aufwändig. ■

Bemerkung 4.28 Konsequenz der Euler–Maclaurinschen Summenformel. Durch geschickte Linearkombinationen von Trapezregeln versucht man, für unterschiedliche Schrittweiten eine Quadraturformel zu erhalten, in der möglichst viele Summanden der Fehlerentwicklung mit niedrigen Potenzen von h verschwinden. Dieses Vorgehen nennt man Wegextrapolieren der Fehlerterme.

Es gelten

$$\begin{aligned} I_{1,h}(f) &= \int_a^b f(x) dx + c_1 h^2 + c_2 h^4 + \mathcal{O}(h^6), \\ I_{1,h/2}(f) &= \int_a^b f(x) dx + c_1 \frac{h^2}{4} + c_2 \frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6), \end{aligned}$$

woraus folgt

$$\frac{4I_{1,h/2}(f) - I_{1,h}(f)}{3} = \int_a^b f(x) dx - \frac{1}{4}c_2 h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

Damit hat man den quadratischen Fehlerterm in h wegextrapoliert. Ebenso kann man mit $I_{1,h}(f), I_{1,h/2}(f), I_{1,h/4}(f)$ den Term mit h^4 eliminieren und man erhält eine Formel 6. Ordnung. Die fortgesetzte Halbierung der Intervalle nennt man auch Romberg–Folge. □

Satz 4.29 Romberg⁶–Quadratur. Es seien $f \in C^{2m+2}([a, b])$ und $I_{1,h}(f)$ die Approximation von $\int_a^b f(x) dx$ mit der Trapezregel mit Schrittweite h . Dann erhält man mit der Rekursionsformel

$$\begin{aligned} P_{k,0} &:= I_{1,h/2^k}(f), \quad k = 0, 1, \dots, m, \\ P_{k,j} &:= \frac{4^j P_{k,j-1} - P_{k-1,j-1}}{4^j - 1}, \quad j = 1, \dots, m, \quad k = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

in $P_{m,m}$ eine Quadraturformel der Fehlerordnung $(2m + 2)$.

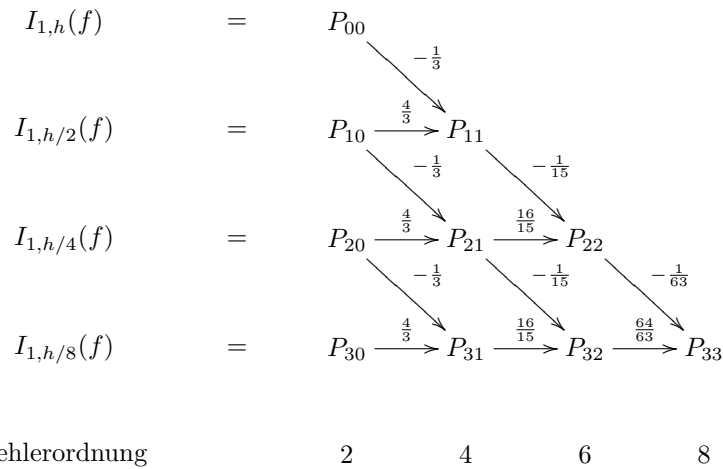
Beweis: Übungsaufgabe, vollständige Induktion. ■

Bemerkung 4.30 Veranschaulichung durch ein Schema, Merkmale. Die Romberg–

⁵Colin Maclaurin (1698 – 1746)

⁶Werner Romberg (1909 – 2003)

Quadratur lässt sich durch folgendes Schema veranschaulichen



Die wesentlichen Merkmale der Romberg-Quadratur sind:

- die Intervalle werden schrittweise halbiert,
- Werte aus vorangegangenen Schritten werden weiter verwendet,
- die Verfeinerung wird abgebrochen, falls die Approximationen hinreichend dicht beieinander liegen.

Am Anfang muss man zwei Funktionswerte, nämlich $f(a)$ und $f(b)$ berechnen. Im ersten Schritt einen Funktionswert $f((a+b)/2)$, im zweiten Schritt zwei Funktionswerte, im dritten vier Funktionswerte und so weiter. Insgesamt ist die Anzahl der benötigten Funktionswertauswertungen nach m Schritten (geometrische Folge)

$$N = 2 + 1 + 2 + 4 + 8 + \dots + 2^{m-1} = 2 + \frac{2^m - 1}{2 - 1} = 2^m + 1.$$

Nach m Schritten hat man 2^m Intervalle. Bei Anwendung der summierten Trapezregel braucht man ebenfalls $2^m + 1$ Funktionswertauswertungen.

Für die Romberg-Folge kann man zeigen, dass man eine Quadraturformel vom positiven Typ erhält, siehe Literatur. \square

Beispiel 4.31 Romberg-Verfahren. Auch hier wird wieder Beispiel 4.10 betrachtet. Man erhält mit Romberg-Quadratur folgendes Ergebnis

m	Intervalle	Integralwert = $P_{m,m}$	Fehler zum MAPLE-Wert	Konvergenz
0	1	1.9165268986	0.009010569655	
1	2	1.9254821734	5.529483461e-05	7.35
2	4	1.9255369052	5.630180961e-07	6.62
3	8	1.9255374646	3.661768888e-09	7.26
4	16	1.9255374682	1.129518701e-11	8.34
5	32	1.9255374682	1.421085472e-14	9.63

Das Romberg-Schema besitzt die Gestalt

1.9165268986				
1.9232433547	1.9254821734			
1.9249609520	1.9255334844	1.9255369052		
1.9253931437	1.9255372076	1.9255374558	1.9255374646	
1.9255013747	1.9255374517	1.9255374680	1.9255374682	1.9255374682

und so weiter. \square