

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. \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 $I(f) \geq 0$.¹
- iii) Sei $f \in C([a, b])$, dann ist die absolute Kondition von I bezüglich der Norm $\|\cdot\|_\infty$

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

- iv) Sei $f \in C([a, b])$, dann ist die relative Kondition von I beschränkt durch

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

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

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

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

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

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

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

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

Damit gilt für die relative Konditionszahl

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

da der Ausdruck $(b - a) \|\Delta f\|_\infty / |I(f)|$ bezüglich Δf eine Konstante ist. \blacksquare

¹Man bezeichnet den Operator als „positiv“, obwohl seine Werte lediglich nichtnegativ sind.

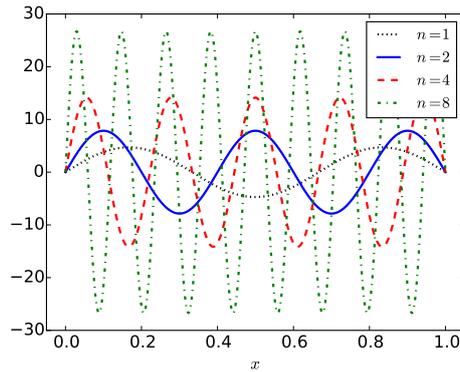


Abbildung 4.1: Beispiel 4.3. Die Funktionen $f_n(x)$.

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

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

□

Bemerkung 4.4 *Prinzipielle Herangehensweise zur Approximation eines bestimmten Integrals.* Die numerische Approximation eines bestimmten Integrals wird numerische Quadratur genannt. Die prinzipielle Herangehensweise der numerischen Quadratur besteht darin, zunächst die Funktion im gegebenen Integral durch eine Funktion zu approximieren, die man exakt integrieren kann. Das ist oft ein Polynom. Dann entwickelt man eine Vorschrift, eine sogenannte Quadraturformel, welche die approximierende Funktion, zum Beispiel das Polynom, exakt integriert.

Ist das Intervall lang, dann kann man es vorher in Teilintervalle zerlegen, auf jedem Teilintervall die Quadraturformel anwenden, und letztlich das Integral auf dem Gesamtintervall durch Summation der Ergebnisse auf den Teilintervallen approximieren. Diese Herangehensweise nennt man summierte Quadraturformel. □

Bemerkung 4.5 *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.

Ziel ist es, 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

$$|I(f) - I_N(f)| = \mathcal{O}(N^{-q}) \quad (4.3)$$

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

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

gegeben. Dieser Quotient wird klein, wenn die Kosten N groß sind. 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 4.6 *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 $I(f)$ in der Form

$$I(f) = \sum_{k=1}^m \int_{I_k} f(x) \, dx$$

darstellen. In jedem der Teilintervalle wird $f(x)$ nun durch ein Polynom $p_{nk} \in P_n$ interpoliert. 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 (3.6) und Integration des Interpolationspolynoms liefert

$$\int_{I_k} f(x) \, dx \approx \int_{I_k} p_{nk}(x) \, dx = \sum_{i=0}^n h_k \lambda_{ik} f(x_{ik}) \quad (4.4)$$

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

$$\lambda_{ik} = \frac{1}{h_k} \int_{I_k} L_{ik}(x) \, dx \quad (4.5)$$

mit den Lagrange-Polynomen $L_{ik}(x)$ definiert in (3.7). Durch Summation erhält man als Approximation von $I(f)$ die Quadraturformel

$$I_{\Delta}(f) = \sum_{k=1}^m \sum_{i=0}^n h_k \lambda_{ik} f(x_{ik}). \quad (4.6)$$

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 $mn + 2 \leq N \leq m(n+1)$, wobei die 2 von der Berechnung der Funktionswerte in den Randknoten herrührt. \square

Satz 4.7 Exaktheit der Quadraturformel für Polynome. *Betrachte das Intervall $[a, b]$ und die Quadraturformel (4.6) für $m = 1$, das heißt, $[a, b]$ ist nicht zerlegt. Dann ist (4.6) genau dann exakt für alle $f \in P_n([a, b])$ wenn (4.5) gilt.*

Beweis: Es reicht aus, die Aussage für eine Basis von $P_n([a, b])$ zu zeigen. Nach Bemerkung 3.8 bildet die Menge der Lagrange-Polynome eine Basis von $P_n([a, b])$.

Sei (4.6) exakt für alle $f \in P_n([a, b])$. Setze $f(x) = L_j(x)$, $j = 0, \dots, n$, dann gilt, mit $h_k = b - a$, $\lambda_{ik} = \lambda_i$, $x_{ik} = x_i$ und der Eigenschaft $L_j(x_i) = \delta_{ij}$

$$\int_a^b L_j(x) \, dx = \sum_{i=0}^n (b-a) \lambda_i L_j(x_i) = (b-a) \lambda_j,$$

woraus (4.5) folgt (mit dem Index j statt ik). Aus dieser Gleichung folgt umgekehrt, wenn die Gewichte wie in (4.5) gewählt werden, dass dann alle Lagrange-Polynome exakt integriert werden und damit, wegen der Basiseigenschaft der Menge der Lagrange-Polynome und der Linearität von Integral und Quadraturformel, alle Polynome in $P_n([a, b])$. ■

Lemma 4.8 Eigenschaften des Operators $I_\Delta(f)$. Sei $I_\Delta : C([a, b]) \rightarrow \mathbb{R}$ der in (4.6) definierte Operator.

i) Der Operator I_Δ ist linear.

ii) Eine obere Schranke für die absolute Kondition ist gegeben durch $\gamma(b-a)$ mit

$$\gamma = \max_{k=1, \dots, m} \left(\sum_{i=0}^n |\lambda_{ik}| \right). \quad (4.7)$$

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 Dreiecksungleichung und der Definition der Maximumsnorm 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

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

da $\gamma(b-a) \|f\|_\infty / |I_\Delta(f)|$ nicht von Δf abhängt. ■

Bemerkung 4.9 Der Wert von (4.7), Quadraturformel vom positiven Typ. Die konstante Funktion $p_0 = 1$ wird exakt integriert. Mit dieser Forderung und (4.6) 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. Außerdem folgt für solche Quadraturformeln, dass I_Δ ein positiver Operator ist. Deswegen ist man in der Praxis nur an Quadraturformeln vom positiven Typ interessiert. \square

Beispiel 4.10 *Trapezregel.* Betrachte das Intervall $[a, b]$ und eine Funktion $f \in C^2([a, b])$. Bei der Trapezregel wird $f(x)$ durch eine lineare Funktion approximiert, die durch die beiden Werte in den Endpunkten des Intervalls gegeben ist

$$p_1(x) = \frac{b-x}{b-a} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b),$$

vergleiche (3.6), (3.7). Damit erhält man die Approximation

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &\approx \int_a^b p_1(x) \, dx = -\frac{(b-x)^2}{2(b-a)} f(a) \Big|_a^b + \frac{(x-a)^2}{2(b-a)} f(b) \Big|_a^b \\ &= (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2} =: I_1(f). \end{aligned}$$

Das ist genau die Fläche des Trapezes, welches durch die x -Achse, $p_1(x)$ und die Geraden $x = a$ und $x = b$ gebildet wird.

Nutzt man die Darstellung (3.9) des Interpolationsfehlers, die Definition der Maximumsnorm $x-a \geq 0$ und $b-x \geq 0$ im Intervall, dann erhält man

$$\begin{aligned} |I(f) - I_1(f)| &= \left| \int_a^b \left(p_1(x) + \frac{f''(\xi(x))}{2} (x-a)(x-b) \right) dx - \int_a^b p_1(x) \, dx \right| \\ &\leq \frac{1}{2} \int_a^b |f''(\xi(x))| |(x-a)(x-b)| \, dx \\ &\leq \frac{1}{2} \|f''\|_\infty \int_a^b (x-a)(b-x) \, dx = \frac{1}{12} \|f''\|_\infty (b-a)^3. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Der Fehler hängt also vom Maximum der zweiten Ableitung von $f(x)$ und der Länge des Intervalls ab. \square

Beispiel 4.11 *Simpson-Regel.* Es wird wiederum ein Intervall $[a, b]$ betrachtet. Nun wird die Funktion $f \in C([a, b])$ durch ein quadratisches Polynom interpoliert, wobei die Knoten $a, m = (a+b)/2$ und b verwendet werden. Mittels (3.6) und (3.7) erhält man

$$p_2(x) = \frac{(x-m)(x-b)}{(a-m)(a-b)} f(a) + \frac{(x-a)(x-b)}{(m-a)(m-b)} f(m) + \frac{(x-a)(x-m)}{(b-a)(b-m)} f(b).$$

Durch eine direkte Berechnung, zum Beispiel unter Nutzung von partieller Integration, ergibt sich die Simpson-Regel

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \int_a^b p_2(x) \, dx = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) =: I_2(f).$$

Sei $f(x)$ nun ein Polynom dritten Grades über $[a, b]$

$$f(x) = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0.$$

Nach Konstruktion wird der quadratische Anteil von $f(x)$ durch die Simpson-Regel exakt integriert. Für den Term dritter Ordnung gelten

$$\int_a^b x^3 \, dx = \frac{b^4 - a^4}{4}$$

und

$$I_2(x^3) = \frac{b-a}{6} \left(a^3 + 4 \left(\frac{a+b}{2} \right)^3 + b^3 \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{b-a}{6} \left(a^3 + \frac{a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3}{2} + b^3 \right) \\
&= \frac{b-a}{6} \cdot \frac{3}{2} (a^3 + a^2b + ab^2 + b^3) = \frac{b^4 - a^4}{4}.
\end{aligned}$$

Somit werden mit der Simpson-Regel sogar Polynome dritten Grades exakt integriert.

Für die Herleitung einer Fehlerabschätzung, nimmt man $f \in C^4([a, b])$ an. Dann wählt man eine weitere Stützstelle aus $[a, b]$, beispielsweise $x^* = a + (b - a)/4$, und erhält mit der Restglieddarstellung (3.9) für das zugehörige Interpolationspolynom $p_3(x)$

$$f(x) = p_3(x) + \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!} (x - a) (x - x^*) (x - m) (x - b)$$

mit $\xi(x) \in [a, b]$ für alle $x \in [a, b]$. Nutzt man die Definition der Maximumnorm und zerlegt man das Integral in Teilintegrale gemäß des Vorzeichens des Restgliedes, dann folgt

$$\begin{aligned}
|I(f) - I_2(f)| &= |I(f) - I_2(p_3)| \\
&\leq \frac{1}{4!} \int_a^b \left| f^{(4)}(\xi(x)) \right| |(x - a) (x - x^*) (x - m) (x - b)| \, dx \\
&\leq \frac{1}{24} \left\| f^{(4)} \right\|_{\infty} (b - a)^5.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Mit einer etwas anderen Herangehensweise kann man sogar zeigen, dass sich der Faktor der Abschätzung auf $1/90$ verbessern lässt, siehe Deuffhard & Hohmann (2008) für Details. \square

Bemerkung 4.12 *Summierte Newton-Cotes-Formeln.* Um in der Praxis eine möglichst gute Approximation des Integralwertes zu erreichen, wird man die in Bemerkung 4.6 vorgestellte Herangehensweise wählen und das Intervall zunächst durch ein Gitter zerlegen. Summierte Newton-Cotes-Formeln erhält man durch die Wahl äquidistanter Stützstellen in den Teilintervallen

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

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

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

Die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen ist in jedem Teilintervall I_k gleich. 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} , das heißt $N = Ch^{-1}$. Damit folgt für die Ordnung aus (4.3)

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

Für ein Verfahren der Ordnung $q \geq 2$, ist die Effizienz somit $\mathcal{O}(h^{1-q})$, sie steigt also mit wachsendem q , wenn h genügend klein ist.

Die angegebenen Konvergenzraten in Tabelle 4.1 erhält man aus den Konvergenzraten für jedes Teilintervall und durch Summation über die Teilintervalle. Da die Anzahl der Teilintervalle sich wie $1/h$ verhält, ist die Potenz von h in Tabelle 4.1 um Eins kleiner als die Potenz von $(b - a)$ in (4.8) und (4.9). Die Konvergenzraten sieht man in der Praxis nur, wenn die zu integrierende Funktion die angegebenen Glattheitsanforderungen erfüllt. 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,

²Thomas Simpson (1710 – 1761)

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

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		$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$	$h^4 \ f^{(4)}\ _\infty$	$\frac{3}{8}$ -Regel		
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$	$h^6 \ f^{(6)}\ _\infty$	Milne-Regel		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$	$h^6 \ f^{(6)}\ _\infty$		
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$	$h^8 \ f^{(8)}\ _\infty$	Weddle-Regel

insbesondere für $n \in \{2, 4, 6\}$, da für gerade n die Ordnung um Eins höher ist, als diejenige, die man nach Konstruktion erwartet (Übungsaufgabe).

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 4.13 Funktion mit schwer zu berechnender Stammfunktion, summierte Trapezregel. Gesucht ist das bestimmte Integral von $f(x) = \sqrt{x+1} + \sqrt{x}$ im Intervall $[1, 2]$. Es ist

$$\begin{aligned}
 & \int_1^2 \sqrt{x+1} + \sqrt{x} \, dx \\
 &= \frac{1}{12} \sqrt{x+1} + \sqrt{x} (8x + 2\sqrt{x} + 5) - \frac{3}{8} \operatorname{arsinh} \left(\frac{2\sqrt{x} + 1}{\sqrt{3}} \right) \Big|_{x=1}^{x=2} \\
 &= \frac{1}{12} \sqrt{3 + \sqrt{2}} (21 + 2\sqrt{2}) - \frac{3}{8} \operatorname{arsinh} \left(\frac{2\sqrt{2} + 1}{\sqrt{3}} \right) \\
 &\quad - \frac{1}{12} \sqrt{3} \cdot 15 + \frac{3}{8} \operatorname{arsinh} \left(\frac{3}{\sqrt{3}} \right) \\
 &\approx 1.92553746824726627143.
 \end{aligned}$$

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 4.14 *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

$$\int_a^b f(x) \mu(x) \, dx \tag{4.10}$$

durch

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i) \tag{4.11}$$

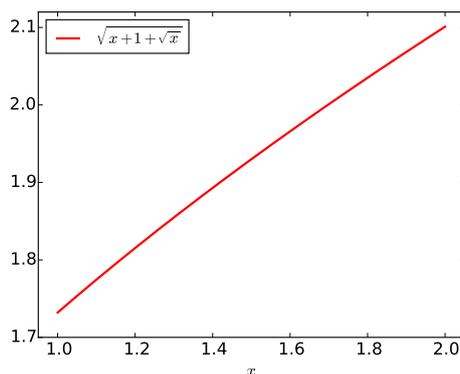


Abbildung 4.2: Integrand zum Beispiel 4.13.

Tabelle 4.2: Beispiel 4.13. Konvergenz für summierte Trapezregel.

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler	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

approximieren³. Hierbei ist $\mu(x)$ eine gegebene Funktion, eine sogenannte Gewichtsfunktion. Bei den Newton-Cotes-Formeln hat man (für $\mu(x) = 1$) ausgehend von den $(n + 1)$ vorgegebenen (äquidistanten) Knoten (Stützstellen) $x_i \in [a, b]$ 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. Man beachte, dass die Ziele für die Interpolation und die Quadratur unterschiedlich sind. Bei der Interpolation hat man versucht, für relativ hohe Polynomgrade n noch brauchbare Ergebnisse zu erzielen. Das Ziel der Quadratur besteht hingegen darin, eine möglichst genaue Approximation des Integralwertes bei vorgegebener Anzahl der Knoten zu berechnen.

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 Gauß⁴-Christoffel⁵-Quadratur. \square

³Man beachte, dass dieser Ansatz sich etwas von dem aus (4.4) unterscheidet. In (4.4) ist die Länge des Integrationsgebiets als Faktor vorhanden, währenddessen diese Länge in (4.11) in den Gewichten integriert ist

⁴Johann Carl Friedrich Gauß (1777 – 1855)

⁵Elwin Bruno Christoffel (1829 – 1900)

Tabelle 4.3: Wichtige Gewichtsfunktionen.

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}

Definition 4.15 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 $p(x) \equiv 0$.

□

Bemerkung 4.16 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)

$$(f, g)_\mu = \int_a^b f(x)g(x)\mu(x) \, dx. \tag{4.12}$$

□

Lemma 4.17 Notwendige Bedingung an die Knoten von (4.11) für exakte Quadratur von Polynomen vom Grad $(2n + 1)$. Ist (4.11) für alle Polynome $p \in P_{2n+1}$ exakt, so ist das Polynom

$$p_{n+1}(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n) \in P_{n+1} \tag{4.13}$$

μ -orthogonal zum Raum P_n , d.h., orthogonal bezüglich des Skalarproduktes (4.12).

Beweis: Sei $p \in P_n$, dann ist $pp_{n+1} \in P_{2n+1}$. Mit (4.11) folgt

$$(p, p_{n+1})_\mu = \int_a^b p(x)p_{n+1}(x)\mu(x) \, dx = I_n(pp_{n+1}) = \sum_{i=0}^n \lambda_i p(x_i) \underbrace{p_{n+1}(x_i)}_{=0} = 0.$$

■

Bemerkung 4.18 Konsequenz von Lemma 4.17. Lemma 4.17 zeigt, auf welche Art und Weise man die Knoten bestimmen soll. Man benötigt eine Menge μ -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 4.19 Zu μ -orthogonalen Polynomen. Nach Satz 1.31 gibt es zu $(\cdot, \cdot)_\mu$ genau ein System von Orthogonalpolynomen auf $[a, b]$, bei dem alle diese Polynome den Koeffizienten Eins vor dem Term höchsten Grades besitzen. Man kann auch zeigen, dass die Nullstellen dieser Polynome reell sind, einfach sind, und alle in $[a, b]$ liegen, Übungsaufgabe. Damit sind die Knoten für die Quadraturformel (4.11) festgelegt. □

Bemerkung 4.20 *Zu den Gewichten.* Sind die Knoten einer Quadraturformel erst einmal festgelegt und fordert man, dass Polynome aus P_n exakt integriert werden sollen, dann bleibt einem bei den Gewichten keine Wahl. Seien $f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, gegebene Werte, mit denen man die Lagrangeschen Interpolationspolynome $L_{in}(x)$, definiert in (3.7), bestimmt. Dann soll das Polynom

$$p(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)L_{in}(x) \in P_n$$

exakt integriert werden, woraus man durch Gleichsetzung von (4.10) und (4.11)

$$\int_a^b p(x)\mu(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_{in}(x)\mu(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i)\lambda_i$$

die Gewichte

$$\lambda_i = \int_a^b L_{in}(x)\mu(x) dx, \quad i = 0, \dots, n, \quad (4.14)$$

erhält.

Es stellt sich heraus, dass man damit nicht nur die exakte Integration in P_n erhält, sondern sogar in P_{2n+1} . \square

Lemma 4.21 Ordnung der Quadraturformel (4.11). *Seien x_0, \dots, x_n die Nullstellen des $(n+1)$ -ten Orthogonalpolynoms bezüglich des Skalarproduktes (4.12). Dann ist die Quadraturformel (4.11) genau dann exakt für alle Polynome aus P_{2n+1} , wenn sie für alle Polynome aus P_n exakt ist.*

Beweis: Ist (4.11) 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 (4.11) 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 (4.13) ist. Die Polynome $q(x)$ und $r(x)$ erhält man beispielsweise mit Polynomdivision $p(x)/p_{n+1}(x)$. 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 4.17 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

$$\int_a^b p(x)\mu(x) dx = \int_a^b r(x)\mu(x) dx = I_n(r). \quad (4.15)$$

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

$$I_n(r) = \sum_{i=0}^n \lambda_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n \lambda_i (q(x_i)p_{n+1}(x_i) + r(x_i)) = \sum_{i=0}^n \lambda_i p(x_i) = I_n(p). \quad (4.16)$$

Kombiniert man (4.15) und (4.16), so erhält man

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

also dass (4.11) alle Polynome aus P_{2n+1} exakt integriert. \blacksquare

Bemerkung 4.22 *Positivität.* Eine wichtige Motivation dafür, Newton-Cotes-Formel hoher Ordnung nicht zu verwenden war, dass diese Formeln nicht vom positiven Typ sind, siehe Bemerkung 4.12. Die Eigenschaft der Positivität muss nun auch noch für die Quadraturformeln, bei denen die Stützstellen die Nullstellen von (4.13) sind und bei denen die Gewichte durch (4.14) gegeben sind, untersucht werden. Es stellt sich heraus, dass auch diese Eigenschaft vorhanden ist. \square

Lemma 4.23 Darstellung und Positivität der Gewichte. Die Gewichte (4.14) sind alle positiv und sie erfüllen die Gleichung

$$\lambda_k = \frac{1}{p'_{n+1}(x_k)p_n(x_k)} (p_n, p_n)_\mu. \quad (4.17)$$

Hierbei sind $\{p_0, \dots, p_n, p_{n+1}\}$ die orthogonalen Polynome bezüglich $(\cdot, \cdot)_\mu$, welche den Koeffizienten Eins vor dem Term höchsten Grades besitzen, vergleiche Satz 1.31.

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 (4.11) nach Lemma 4.21 exakt für $q(x)$ ist, gilt

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

woraus

$$\lambda_k = \frac{1}{q(x_k)} \int_a^b q(x)\mu(x) dx \quad (4.18)$$

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

$$q(x_k) = ((x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n))^2 = (p'_{n+1}(x_k))^2, \quad (4.19)$$

da man beim Ableiten von $p_{n+1}(x)$ mit der Produktregel eine Summe von Produkten erhält, 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. Aus (4.19) folgt auch, dass $q(x_k) \neq 0$, da $x_i \neq x_k$ für $i \neq k$. Einsetzen in (4.18) 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 (4.17) 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 für die Gültigkeit von (4.18). Insbesondere folgt aus der Drei-Term-Rekursion (1.14), dass $p_n(x_k) \neq 0$. Anderenfalls wäre x_k eine Nullstelle aller orthogonalen Polynome $\{p_0, \dots, p_{n+1}\}$, was aber wegen der Wahl von $p_0 = 1$ nicht möglich ist. Mit Hilfe von (4.19) folgt

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

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

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

Durch Einsetzen in (4.18) 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 4.24 *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

$$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.57735026919, \quad x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735026919.$$

Die Gewichte kann man beispielsweise mit (4.17) berechnen. Aus Symmetriegründen sind sie gleich. Man erhält, mit $p_1(x) = x$,

$$\lambda_0 = \frac{1}{p_2'(x_0)p_1(x_0)} \int_{-1}^1 p_1^2(x) dx = \frac{1}{2x_0x_0} \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{1}{3x_0^2} = 1 = \lambda_1.$$

In der Tat stellt man fest, dass man mit den beiden Stützstellen (x_0, λ_0) und (x_1, λ_1) 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 das Ergebnis der Quadraturformel für die konstante Funktion $x = 1$ gleich der Summe der Gewichte ist. \square

Satz 4.25 Approximationsfehler. Sei $f \in C^{2n+2}([a, b])$. Dann besitzt der Approximationsfehler der Gauß-Christoffel-Quadratur die Gestalt

$$\int_a^b f(x)\mu(x) dx - I_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (p_{n+1}, p_{n+1})_\mu \quad (4.20)$$

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 3.14. Nach Satz 3.15 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 hat, vergleiche die Darstellungen (3.8) und (4.13). Nun multipliziert man diese Gleichung mit $\mu(x)$, integriert die erhaltene Gleichung und nutzt dann aus, dass $p(x)\mu(x)$ exakt integriert wird, siehe Lemma 4.21, 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 4.26 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 $I_k = [z_{k-1}, z_k]$ mit $h = z_k - z_{k-1}$. Unter Verwendung von (4.20) gilt

$$\int_{I_k} f(z) dz = I_{n,k}(f) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{I_k} p_{n+1}^2(z) dz$$

Tabelle 4.4: Beispiel 4.27. Konvergenz für summierte summierte Gauß–Legendre-Formel mit zwei Quadraturpunkten.

Anzahl der Intervalle	Integralwert	Fehler	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

$$\begin{aligned} &\leq I_{n,k}(f) + \frac{1}{(2n+2)!} \|f^{(2n+2)}\|_{\infty} h^{2n+2} \int_{I_k} dz \\ &= I_{n,k}(f) + \frac{1}{(2n+2)!} \|f^{(2n+2)}\|_{\infty} h^{2n+3}, \end{aligned}$$

da der Betrag eines jeden Faktors von $p_{n+1}(z)$ kleiner als h ist. Summation über die Intervalle ergibt mit $m = (b-a)/h$ und einer neuen Konstanten, die aber wieder mit C bezeichnet wird,

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

woraus die Aussage folgt. ■

Beispiel 4.27 *Funktion mit schwer zu berechnender Stammfunktion, summierte Gauß–Legendre-Formel.* Es wird die Funktion aus Beispiel 4.13 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. Mit 16 Intervallen (32 Funktionsauswertungen) erhält man einen Quadraturfehler in derselben Größenordnung wie mit der summierten Trapezregel mit 4096 Intervallen (4097 Funktionsauswertungen), vergleiche Tabelle 4.2. □

Bemerkung 4.28 *Zur Gauß–Christoffel- und Gauß–Legendre-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 & Hohmann, 2008, Kap. 9.3.2). Die Berechnung dieser Eigenwerte ist numerisch stabiler, vergleiche Kapitel 5.6. 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 $\mu(x)$ explizit kennen muss, sondern nur ihre ersten $2(n+1)$ Momente.
- Bei den Gauß–Christoffel-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 für $n = 1$, die nach Folgerung 4.26 von vierter Ordnung ist, im Vergleich zur summierten Trapezregel, welche die summierte Gauß–Lobatto-Formel für $n = 1$ ist und von zweiter Ordnung ist. □

4.4 Das Romberg-Verfahren

Bemerkung 4.29 *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 4.30 Euler-Maclaurinsche⁶ 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. \blacksquare

Bemerkung 4.31 *Konsequenz der Euler-Maclaurinschen Summenformel.* Die Reihe $\sum_{k=1}^{\infty} c_k h^{2k}$ braucht für kein h zu konvergieren. Tut sie es jedoch, so kann man durch geschickte Linearkombinationen von Trapezregeln versuchen, 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. \square

Satz 4.32 Romberg⁷-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 summierten Trapezregel mit Schrittweite h . Dann erhält man mit der Rekursionsformel

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

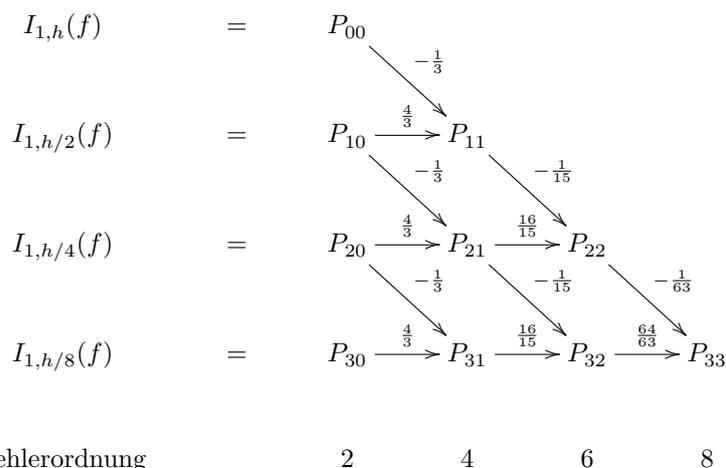
in $P_{m,m}$ eine Quadraturformel der Fehlerordnung $(2m + 2)$.

Beweis: Übungsaufgabe, vollständige Induktion. \blacksquare

⁶Colin Maclaurin (1698 – 1746)

⁷Werner Romberg (1909 – 2003)

Bemerkung 4.33 *Veranschaulichung durch ein Schema, Merkmale.* Die Romberg-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, beispielsweise $|P_{m,m} - P_{m,m-1}| < \varepsilon$ für eine vorgegebene Toleranz ε .

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 (geometrische Folge) nach m Schritten

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

Nach m Schritten hat man 2^m Intervalle und eine Quadraturformel der Ordnung $2m+2$. Bei Anwendung der summierten Trapezregel braucht man ebenfalls $2^m + 1$ Funktionswertauswertungen, hat aber nur eine Quadraturformel der Ordnung 2.

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

Beispiel 4.34 *Romberg-Verfahren.* Auch hier wird wieder Beispiel 4.13 betrachtet. Man erhält mit Romberg-Quadratur folgendes Ergebnis

m	Intervalle	Integralwert = $P_{m,m}$	Fehler zum Integralwert	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. Die Werte in der ersten Spalte muss man mit der summierten Trapezregel berechnen, siehe Tabelle 4.2 und für die anderen Spalten wendet man das Romberg-Schema aus Bemerkung 4.33 an.

Mit dem Romberg-Verfahren erhält man beispielsweise unter Verwendung von 16 Intervallen (17 Funktionswerten) bei der betrachteten Funktion ein genaueres Ergebnis als mit der Gauß-Legendre-Quadratur mit 16 Intervallen (32 Funktionswerten), vergleiche mit Tabelle 4.4. \square