3 Numerische Integration

Die Berechnung bestimmter Integrale kann in der Praxis meist nur näherungsweise mit Hilfe von sog. „Quadraturformeln“ erfolgen. Dazu macht man für eine Funktion $f \in C[a,b]$ den Ansatz

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \sim I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$$

mit Stützstellen $a \le x_0 < \ldots < x_n \le b$ und Gewichten $\alpha_i \in \mathbb{R}$. Ein einfaches Beispiel ist die sog. „(summierte) Rechteckregel“:

$$I(f) \approx \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_i).$$

3.1 Interpolatorische Quadraturformeln

Ein naheliegender Weg zur Konstruktion von Quadraturformeln ist der über die Polynominterpolation. Zu den (paarweise verschiedenen) Stützstellen $a \le x_0 < \ldots < x_n \le b$ wird das Lagrange-Interpolationspolynom gebildet

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$

und dann gesetzt

$$I^{(n)}(f) := \int_a^b p_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \underbrace{\int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx}_{=:\,\alpha_i}. \tag{3.1.1}$$

Die Quadraturgewichte α_i hängen offenbar nur von $[a,b]$ und den Stützstellen $x_0, \ldots, x_n$ ab. Der Quadraturfehler einer solchen sog. „interpolatorischen“ Quadraturformel lässt sich leicht angeben:

Satz 3.1 (Lagrange-Quadratur): *Für interpolatorische Quadraturformeln gilt:*

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_a^b f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx. \tag{3.1.2}$$

Beweis: Die allgemeine Darstellung des Quadraturfehlers folgt aus der Restglieddarstellung der Lagrange-Interpolation in Satz 2.4. Q.E.D.

Aus der Fehlerdarstellung (3.1.2) folgt, dass die interpolatorische Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ „exakt“ ist für Polynome $p \in P_n$; dies ergibt sich ja bereits aus ihrer Konstruktion.

Definition 3.1: *Eine Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ wird „(mindestens) von der Ordnung m“ genannt, wenn durch sie alle Polynome aus P_{m-1} exakt integriert werden.*

Die interpolatorischen Quadraturformeln $I^{(n)}(\cdot)$ zu $n+1$ Stützstellen sind also mindestens von der Ordnung $n+1$.

Ein wichtiger Spezialfall sind die auf äquidistant verteilten Stützstellen basierenden sog. „Newton-Cotes[1]-Quadraturformeln“:

(a) „abgeschlossene“ Newton-Cotes-Formeln (a, b sind Stützstellen)

$$x_i = a + iH\,, \quad i = 0, \dots, n\,, \quad H = \frac{b-a}{n}\,,$$

(b) „offene“ Newton-Cotes-Formeln (a, b sind keine Stützstellen)

$$x_i = a + (i+1)H\,, \quad i = 0, \dots, n\,, \quad H = \frac{b-a}{n+2}\,,$$

Zur Berechnung der Gewichte α_i geht man z. B. im Fall der abgeschlossenen Formeln wie folgt vor: Jedes $x \in [a,b]$ ist darstellbar als $x = a + tH$ mit einem $t \in [0,n]$. Durch Koordinatentransformation $x \to t = (x-a)/H$ erhält man

$$L_i^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{a + tH - a - jH}{a + iH - a - jH} = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{t-j}{i-j}.$$

Also ist

$$\alpha_i = \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx = H \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{t-j}{i-j}\,dt\,, \quad i = 0, \dots, n.$$

Diese Gewichte werden ein für allemal berechnet und tabelliert. Für die offenen Newton-Cotes-Formeln verfährt man analog.

[1]Roger Cotes (1682–1716): Englischer Mathematiker; Professor für Astronomy an der Universität Cambridge (1706) (zusammen mit Newton); Beiträge zu vielen konkreten Fragen der reellen Analysis, insbesondere zur Numerik, Interpolation und Integraltafelnberechnung).

Beispiel 3.1: Als abgeschlossene Newton-Cotes-Formel für $n = 2$, $H := (b-a)/2$:

$$a_0 = H \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\,\frac{t-2}{0-2}\,dt = \frac{H}{2}\int_0^2 (t^2-3t+2)\,dt = \frac{1}{3}H$$
$$a_1 = H \int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\,\frac{t-2}{1-2}\,dt = -H\int_0^2 (t^2-2t)\,dt = \frac{4}{3}H$$
$$a_2 = H \int_0^2 \frac{t-0}{2-0}\,\frac{t-1}{2-1}\,dt = \frac{H}{2}\int_0^2 (t^2-t)\,dt = \frac{1}{3}H$$

ergibt sich die sog „Simpson[2]-Regel“:

$$I^{(2)}(f) = \frac{H}{3}\Big(f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\Big).$$

Beispiel 3.2: Wir geben im Folgenden einige der einfachsten Newton-Cotes-Formeln an:
(a) Abgeschlossene Formeln $(n = 1, 2, 3, 4)$: $\quad H := (b-a)/n$

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\big\{f(a) + f(b)\big\} \quad (\text{„Trapezregel“ bzw. „Sehnen-Trapezregel“})$$
$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{6}\Big\{f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\Big\} \quad (\text{„Simpson-Regel“})$$
$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{8}\big\{f(a) + 3f(a+H) + 3f(b-H) + f(b)\big\} \quad (\text{„}\tfrac{3}{8}\text{-Regel)“})$$
$$I^{(4)}(f) = \frac{b-a}{90}\Big\{7f(a) + 32f(a+H) + 12f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + 32f(b-H) + 7f(b)\Big\}.$$

(b) Offene Formeln $(n = 0, 1, 2, 3)$ $\quad H := (b-a)/n$

$$I^{(0)}(f) = (b-a)f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) \quad (\text{„Mittelpunktsregel“ bzw. „Tangenten-Trapezregel“})$$
$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\big\{f(a+H) + f(b-H)\big\}$$
$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{3}\Big\{2f(a+H) - f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + 2f(b-H)\Big\}$$
$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{24}\big\{11f(a+H) + f(a+2H) + f(b-2H) + 11f(b-H)\big\}.$$

[2]Thomas Simpson (1710–1761): Englischer Mathematiker; seit 1743 Professor an der Royal Military Academny at Woolwich; neben der nach ihm benannten Quadraturformel Beiträge zur Geometrie, Trogonometrie, Wahrscheinlichkeitstheorie und Astronomie; auf ihn gehen die heutige üblichen Bezeichnungen Sinus, Cosinus, Tangens und Cotangens zurück, auch die differentielle Form des Newton-Verfahrens wurde von ihm 1740 eingeführt.

Bemerkung 3.1: Im Gegensatz zu den Newton-Cotes-Formeln verwenden die sog. „Besselschen[3] Formeln" auch Stützstellen außerhalb von $[a,b]$; z. B.:

$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{24}\big\{-f(2a-b) + 13f(a) + 13f(b) - f(2b-a)\big\}.$$

Die sog. „Hermiteschen Formeln" verwenden Ableitungswerte; z. B.:

$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{2}\big\{f(a) + f(b)\big\} + \frac{(b-a)^2}{12}\big\{f'(a) - f'(b)\big\}.$$

Sie basieren auf dem Hermite-Interpolationspolynom zu $n+1 = 2m+2$ Stützstellen $a \le x_0 < \ldots < x_m \le b$ und Stützwerten $f(x_i), f'(x_i),\ i = 0,\ldots,m$.

Wir wollen nun für die drei einfachsten Newton-Cotes-Formeln, die Trapezregel, die Simpson-Regel und die Mittelpunktsregel, die Restglieddarstellungen ableiten.

Satz 3.2 (Quadraturrestglieder): *Es gelten die folgenden Restglieddarstellungen*
(i) *für die Trapezregel:*

$$I(f) - \frac{b-a}{2}\big\{f(a) + f(b)\big\} = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\zeta), \quad f \in C^2[a,b],$$

(ii) *für die Simpson-Regel:*

$$I(f) - \frac{b-a}{6}\Big\{f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\Big\} = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\zeta), \quad f \in C^4[a,b],$$

(iii) *für die Mittelpunktsregel:*

$$I(f) - (b-a)f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\zeta), \quad f \in C^2[a,b],$$

mit gewissen Zwischenstellen $\zeta \in [a,b]$.

Beweis: (i) Wegen $(x-a)(x-b) \le 0$ in $[a,b]$ gilt

$$I(f) - I^{(1)}(f) = \frac{f''(\zeta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\zeta).$$

(ii) Da $(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)$ in $[a,b]$ einen Vorzeichenwechsel hat, kann der in (i) verwendete trick nicht direkt angewendet werden. Mit der Newton-Form des Interpolationsrestglieds gilt:

[3]Friedrich Wilhelm Bessel (1784–1846): Deutscher Astromom und Mathematiker; Direktor des Observatoriums in Königsberg und Mitglied der Berliner Akademie; grundlegende Beiträge zur mathematischen Fehlerkorrektur bei astronomischen Beobachtungen und zur Sternpositionierung.

$$
\begin{aligned}
I(f) - I^{(2)}(f) &= \int_a^b f[a, \tfrac{a+b}{2}, b, x](x - Bernoullia)(x - \tfrac{a+b}{2})(x-b)\,dx \\
&= \int_a^b \frac{f[a, \frac{a+b}{2}, b, x] - f[a, \frac{a+b}{2}, b, \frac{a+b}{2}]}{x - \frac{a+b}{2}} \underbrace{(x-a)(x - \tfrac{a+b}{2})^2(x-b)}_{\leq 0}\,dx + \\
&\quad + f[a, \tfrac{a+b}{2}, b, \tfrac{a+b}{2}] \underbrace{\int_a^b (x-a)(x - \tfrac{a+b}{2})(x-b)\,dx}_{=0}.
\end{aligned}
$$

Nach dem verallgemeinerten Mittelwertsatz der Integralrechnung folgt

$$
\begin{aligned}
I(f) - I^{(2)}(f) &= \int_a^b f[a, \tfrac{a+b}{2}, \tfrac{a+b}{2}, b, x](x-a)(x - \tfrac{a+b}{2})^2(x-b)\,dx \\
&= \frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!} \int_a^b (x-a)(x - \tfrac{a+b}{2})^2(x-b)\,dx.
\end{aligned}
$$

(iii) Da $x - \frac{a+b}{2}$ in $[a,b]$ einen Vorzeichenwechsel hat, verwenden wir eine analoge Schlussweise wie in (ii):

$$
\begin{aligned}
I(f) - I^{(0)}(f) &= \int_a^b f[\tfrac{a+b}{2}, x](x - \tfrac{a+b}{2})\,dx \\
&= \int_a^b \frac{f[\frac{a+b}{2}, x] - f[\frac{a+b}{2}, \frac{a+b}{2}]}{x - \frac{a+b}{2}} \underbrace{(x - \tfrac{a+b}{2})^2}_{\geq 0}\,dx + f'(\tfrac{a+b}{2}) \underbrace{\int_a^b (x - \tfrac{a+b}{2})\,dx}_{=0} \\
&= \int_a^b f[\tfrac{a+b}{2}, \tfrac{a+b}{2}, x](x - \tfrac{a+b}{2})^2\,dx = \frac{f''(\zeta)}{2} \int_a^b (x - \tfrac{a+b}{2})^2\,dx.
\end{aligned}
$$

Analog lassen sich die Restglieddarstellungen der Newton-Cotes-Formeln höherer Ordnung herleiten. Q.E.D.

Bemerkung 3.2: Besitzen die in den Restgliedern auftretenden Ableitungen von f auf $[a,b]$ festes Vorzeichen, so gestattet der Vergleich der abgeschlossenen und offenen Formeln (unter Vernachlässigung des Rundungsfehlers) eine Einschließung des Integralwertes. Zum Beispiel ergibt sich für „konvexe“ Funktionen f (mit $f'' \geq 0$) mit der (Sehnen)-Trapezregel und der (Tangenten)-Trapezregel (Mittelpunktsregel):

$$
(b-a) f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) \leq I(f) \leq \frac{b-a}{2}\big\{f(a) + f(b)\big\}. \tag{3.1.3}
$$

Bei den abgeschlossenen Newton-Cotes-Formeln treten ab $n = 7$ und bei den offenen ab $n = 2$ *negative* Gewichte α_i auf. Dadurch erhöht sich die Rundungsfehleranfälligkeit dieser Formeln (Auslöschungsgefahr). Außerdem kann i. Allg. keine Konvergenz

$$I^{(n)}(f) \to I(f) \quad (n \to \infty)$$

erwartet werden, da die Lagrange-Interpolation kein generell konvergenter Prozess ist. Man wendet daher zur Berechnung von $I(f)$ die Quadraturformeln nur auf Teilintervalle der Länge h an und summiert die Einzelbeiträge zu den sog. „summierten" Quadraturformeln.

$$I_h^{(n)}(f) := \sum_{i=0}^{N-1} I_{[x_i,x_{i+1}]}^{(n)}(f), \quad h = \frac{b-a}{N}. \tag{3.1.4}$$

Gilt für die verwendete Quadraturformel die Fehlerdarstellung

$$I_{[x_i,x_{i+1}]}(f) - I_{[x_i,x_{i+1}]}^{(n)}(f) = \omega_n\, h^{m+2} f^{(m+1)}(\zeta_i)\,, \quad \zeta_i \in [x_i, x_{i+1}],$$

mit einem $m \geq n$, so ergibt sich mit dem Zwischenwertsatz für den Fehler die Darstellung

$$I(f) - I_h^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} \omega_n\, h^{m+2}\, f^{(m+1)}(\zeta_i) = \omega_n\, h^{m+2}\, N\, f^{(m+1)}(\zeta),$$

mit einem $\zeta \in [a,b]$. Wegen $N = \frac{b-a}{h}$ folgt also

$$I(f) - I_h^{(n)}(f) = \omega_n(b-a)\, h^{m+1}\, f^{(m+1)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in [a,b]\,. \tag{3.1.5}$$

Beispiel 3.3: Wir geben die Restglieder für die einfachsten Formeln an:

(1) Summierte Trapezregel $(m = 1)$

$$I_h^{(1)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{x_{i+1}-x_i}{2}\big\{f(x_i) + f(x_{i+1})\big\} = \frac{h}{2}\Big\{f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(b)\Big\}.$$

$$I(f) - I_h^{(1)}(f) = -\frac{b-a}{12}\, h^2\, f''(\zeta)\,, \quad \zeta \in [a,b]. \tag{3.1.6}$$

(2) Summierte Simpson-Regel $(m = 3)$

$$\begin{aligned} I_h^{(2)}(f) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{x_{i+1}-x_i}{6}\Big\{f(x_i) + 4f\Big(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\Big) + f(x_{i+1})\Big\} \\ &= \frac{h}{6}\bigg\{f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{N-1} f\Big(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\Big) + f(b)\bigg\}. \end{aligned}$$

$$I(f) - I_h^{(2)}(f) = -\frac{b-a}{2880}\, h^4\, f^{(4)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in [a,b]. \tag{3.1.7}$$

(3) Summierte Mittelpunktsregel $(m = 1)$

$$I_h^{(0)}(f) = \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i) f\Big(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\Big) = h \sum_{i=0}^{N-1} f\Big(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\Big).$$

$$I(f) - I_h^{(0)}(f) = \frac{b-a}{24}\, h^2\, f''(\zeta), \quad \zeta \in [a,b]. \tag{3.1.8}$$

3.2 Gaußsche Quadraturformeln

Die interpolatorischen Quadraturformeln

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) \tag{3.2.9}$$

zu den Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$ sind nach Konstruktion mindestens von der Ordnung $n+1$, d. h.: Für ihr Restglied gilt:

$$R^{(n)}(p) \equiv I(p) - I^{(n)}(p) = 0, \qquad p \in P_n. \tag{3.2.10}$$

Für den Spezialfall der Newton-Cotes-Formeln mit geradem $n > 0$ haben wir gesehen (Übungsaufgabe), dass sogar Polynome aus P_{n+1} exakt integriert werden. Es stellt sich nun die Frage, die Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ und die Gewichte $\alpha_0, \dots, \alpha_n$ so zu wählen, dass Polynome möglichst hohen Grades exakt integriert werden.

Hilfssatz 3.1: *Eine obere Grenze für die Ordnung einer Quadraturformel der Art $I^{(n)}(\cdot)$ ist $2n+2$.*

Beweis: Wäre $I^{(n)}(\cdot)$ von höherer Ordnung, d. h. insbesondere also exakt für das Polynom

$$p(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2 \in P_{2n+2},$$

so ergäbe sich der Widerspruch

$$0 < \int_a^b p(x)\, dx = I^{(n)}(p) = 0.$$

Q.E.D.

Wir wollen im Folgenden zeigen, dass es tatsächlich interpolatorische Quadraturformeln zu $n+1$ Stützstellen gibt, welche die Maximalordnung $2n+2$ haben. Sie heißen „Gauß-Quadraturformeln“. Seien $p_n \in P_n$ und $p_{2n+1} \in P_{2n+1}$ die Lagrange-Interpolationspolynome einer Funktion $f \in C[a,b]$ zu den $n+1$ bzw. $2n+2$ Stützstellen $x_0,\dots,x_n,x_{n+1},\dots,x_{2n+1} \in [a,b]$. Für die zugehörigen Quadraturformeln $I^{(n)}(\cdot)$ bzw. $I^{(2n+1)}(\cdot)$ gilt dann

$$\begin{aligned} I(f) - I^{(2n+1)}(f) &= I(f) - \sum_{i=0}^{2n+1} f[x_0,\dots,x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x-x_j)\,dx \\ &= I(f) - I^{(n)}(f) - \sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0,\dots,x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x-x_j)\,dx. \end{aligned}$$

Wir schreiben für $i = n+1,\dots,2n+1$:

$$\int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x-x_j)\,dx = \int_a^b \underbrace{\prod_{j=0}^{n} (x-x_j)}_{\in P_{n+1}} \underbrace{\prod_{j=n+1}^{i-1} (x-x_j)}_{\in P_n}\,dx.$$

Die $n+1$ Polynome

$$\Big\{1,\ \ x-x_{n+1},\ \ (x-x_{n+1})(x-x_{n+2}),\ \dots,\ \prod_{j=n+1}^{2n} (x-x_j)\Big\}$$

bilden eine Basis von P_n. Wählen wir nun die ersten $n+1$ Stützstellen $x_0,\dots,x_n \in [a,b]$ so, dass

$$\int_a^b \prod_{j=0}^{n} (x-x_j) q(x)\,dx = 0 \quad \forall\, q \in P_n, \tag{3.2.11}$$

so folgt

$$I(f) - I^{(n)}(f) = I(f) - I^{(2n+1)}(f),$$

d. h.: Die interpolatorische Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ ist exakt für Polynome aus P_{2n+1}, also von der Ordnung $2n+2$.

Auf dem Funktionenraum $C[a,b]$ verwenden wir im Folgenden wieder das übliche L^2-Skalarprodukt und die zugehörige Norm

$$(f,g) := \int_a^b f(x)g(x)\,dx, \quad \|f\| := (f,f)^{1/2}.$$

Die obige Bedingung (3.2.11) besagt dann, dass das Polynom

$$p(x) \equiv \prod_{j=0}^{n} (x-x_j) = x^{n+1} + r(x)\,, \quad r \in P_n,$$

bzgl. des Skalarprodukts $(\cdot,\cdot)$ „orthogonal“ zum Teilraum $P_n[a,b]\subset C[a,b]$ ist. Zur Konstruktion von p und damit seiner Nullstellen $x_0,\dots,x_n$ wenden wir das Gram-Schmidt-Verfahren auf die Monombasis $\{1,x,\dots,x^{n+1}\}$ von $P_{n+1}[a,b]$ an:

$$p_0(x):=1,\quad k=1,\dots,n+1:\quad p_k(x):=x^k-\sum_{j=0}^{k-1}\frac{(x^k,p_j)}{\|p_j\|^2}\,p_j(x). \tag{3.2.12}$$

Dann ist $\{p_0,\dots,p_{n+1}\}$ ein „Orthogonalsystem“ in $P_{n+1}[a,b]$. Offenbar ist

$$p_{n+1}(x)=x^{n+1}+r(x)\,,\quad r\in P_n,$$

so dass wir $p(x):=p_{n+1}(x)$ setzen können. Die $n+1$ Nullstellen $\lambda_0,\dots,\lambda_n$ von $p(x)$ sind dann mögliche Kandidaten für „optimale“ Integrationspunkte.

Wir legen im Folgenden ein Skalarprodukt der allgemeineren Gestalt

$$(f,g)_\omega\;:=\;\int_a^b f(x)g(x)\omega(x)\,dx$$

mit einer integrablen Gewichtsfunktion $\omega(x)\ge 0,\ x\in(a,b)$, mit höchstens endlich vielen Nullstellen in $[a,b]$, zugrunde. Seien dann p_n, $n=0,1,2,\dots,$ die mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahren aus $\{1,x,x^2,\dots,\}$ gewonnenen bzgl. $(\cdot,\cdot)_\omega$ orthogonalen Polynome.

Satz 3.3 (Nullstellen orthogonaler Polynome): *Die bzgl. des Skalarproduktes $(\cdot,\cdot)_\omega$ orthogonalen Polynome p_n besitzen lauter reelle, einfache Nullstellen, die alle im Innern des Intervalls $[a,b]$ liegen.*

Beweis: Wir definieren die Menge

$$N_n:=\{\lambda\in(a,b)|\,\lambda\ \text{Nullstelle}\ \textit{ungerader}\ \text{Vielfachheit von}\ p_n\}$$

und setzen

$$q(x):=1\quad\text{für}\ N_n=\emptyset,$$
$$q(x):=\prod_{i=1}^m(x-\lambda_i)\quad\text{für}\ N_n=\{\lambda_1,\dots,\lambda_m\}.$$

Dann ist $p_n\cdot q\in P_{n+m}$ reell und hat in (a,b) keinen Vorzeichenwechsel. Es gilt

$$(p_n,q)_\omega=\int_a^b p_n(x)q(x)\omega(x)\,dx\;\ne\;0.$$

Für $m<n$ ist dies ein Widerspruch zu $p_n\perp P_{n-1}$. Q.E.D.

Die orthogonalen Polynome p_n bzgl. des Skalarprodukts $(\cdot,\cdot)$ auf $[-1,1]$ sind Vielfache der „Legendre-Polynome“ $L_n(x)$. Aufgrund von Satz 3.3 können wir nun die Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n$ des $(n+1)$-ten Legendre-Polynoms L_{n+1} als Stützstellen einer interpolatorischen Quadraturformel auf dem Intervall $[-1,1]$ verwenden:

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(\lambda_i)\,, \quad \alpha_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-\lambda_j}{\lambda_i-\lambda_j}\, dx. \tag{3.2.13}$$

Wir fassen die Ergebnisse dieser Vorüberlegungen in folgendem Satz zusammen.

Satz 3.4 (Gaußsche Quadraturformeln): *Es gibt genau eine interpolatorische Quadraturformel zu* $n+1$ *paarweise verschiedenen Stützstellen über dem Intervall* $[-1,1]$ *mit der (optimalen) Ordnung* $2n+2$ *. Ihre Stützstellen sind gerade die Nullstellen* $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1,1)$ *des* $(n+1)$*-ten Legendre-Polynoms* $L_{n+1} \in P_{n+1}$ *, und ihre Gewichte genügen der Beziehung*

$$\alpha_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \Big(\frac{x-\lambda_j}{\lambda_i-\lambda_j}\Big)^2 dx > 0, \quad i = 0, \dots, n. \tag{3.2.14}$$

Für $f \in C^{2n+2}[-1,1]$ *besitzt ihr Restglied die Darstellung*

$$R^{(n)}(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^{1} \prod_{j=0}^{n} (x-\lambda_j)^2\, dx\,, \quad \xi \in (-1,1). \tag{3.2.15}$$

Beweis: (i) Das orthogonale Polynom p_{n+1} ist orthogonal zu $P_n[-1,1]$ und hat mit seinen (reellen) Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1,1)$ die Darstellung

$$p_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n} (x-\lambda_i) = x^{n+1} + \dots .$$

Aufgrund der obigen Vorbetrachtung ist die zugehörige interpolatorische Quadraturformel dann von $(2n+2)$-ter Ordnung. Zur Bestimmung der Gewichte α_i setzen wir

$$l_i(x) := \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-\lambda_j}{\lambda_i-\lambda_j}\,, \quad i = 0, \dots, n,$$

und erhalten wegen $l_i^2 \in P_{2n}$

$$0 < \int_{-1}^{1} l_i(x)^2\, dx = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \underbrace{l_i(\lambda_j)^2}_{\delta_{ij}} = \alpha_i.$$

(ii) Zum Beweis der Eindeutigkeit der Gauß-Quadraturformel sei angenommen, es gäbe eine zweite Formel

$$\tilde{I}^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \tilde{\alpha}_i\, f(\tilde{\lambda}_i)$$

der Ordnung $2n+2$. Mit den analog gebildeten Polynomen $\tilde{l}_i \in P_n$ folgte dann ebenfalls $\tilde{\alpha}_i > 0$. Also wäre

$$0 = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\tilde{\alpha}_i} \underbrace{\tilde{l}_i(x)}_{\in P_n} p_{n+1}(x)\, dx = \sum_{j=0}^{n} \frac{\tilde{\alpha}_j}{\tilde{\alpha}_i} \underbrace{\tilde{l}_i(\tilde{\lambda}_j)}_{= \delta_{ij}} p_{n+1}(\tilde{\lambda}_j) = p_{n+1}(\tilde{\lambda}_i).$$

Wegen der eindeutigen Bestimmtheit der Nullstellen λ_i von p_{n+1} bzw. L_{n+1} folgte damit $\lambda_i = \tilde{\lambda}_i$ sowie $\alpha_i = \tilde{\alpha}_i$.

(iii) Es bleibt, die Restglieddarstellung herzuleiten. Nach Satz 2.5 und 2.6 gibt es ein Polynom $h \in P_{2n+1}$, welches die Hermite-Interpolationsaufgabe

$$h(\lambda_i) = f(\lambda_i)\,, \quad h'(\lambda_i) = f'(\lambda_i)\,, \quad i = 0, \dots, n,$$

löst und für $f \in C^{2n+2}[-1,1]$ die Restglieddarstellung hat:

$$f(x) - h(x) = f[\lambda_0, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_1, \dots, \lambda_n, \lambda_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - \lambda_i)^2.$$

Anwendung der Gauß-Quadraturformel auf $h(x)$ ergibt dann wegen der Identität $I^{(n)}(h) = I(h)$:

$$\begin{aligned} I(f) - I^{(n)}(f) &= I(f-h) - I^{(n)}(f-h) \\ &= \int_{-1}^{1} f[\lambda_0, \lambda_0, \dots, \lambda_n, \lambda_n, x] \prod_{i=0}^{n} \underbrace{(x-\lambda_i)^2}_{\geq 0}\, dx - \sum_{i=0}^{n} \alpha_i \underbrace{\{f(\lambda_i) - h(\lambda_i)\}}_{=0} \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^{1} \prod_{i=0}^{n} (x-\lambda_i)^2\, dx. \end{aligned}$$

Dies vervollständigt den Beweis. Q.E.D.

Die Legendre-Polynome $L_n \in P_n$ bzw. ihre Vielfachen p_n lassen sich auf $[-1,1]$ in der Form

$$p_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n \quad (0! := 1)$$

schreiben und genügen der rekursiven Beziehung

$$p_0(x) \equiv 1\,, \quad p_1(x) \equiv x\,, \quad p_{n+1}(x) = x p_n(x) - \frac{n^2}{4n^2-1} p_{n-1}(x)\,, \quad n \geq 1.$$

Ihre Nullstellen werden analytisch bzw. (für $n > 4$) numerisch bestimmt und können Tabellenwerken entnommen werden; z. B.:

$$\begin{aligned} p_2(x) &= x^2 - \tfrac{1}{3} : \quad \lambda_0 = -\sqrt{1/3}\,, \quad \lambda_1 = \sqrt{1/3} \\ p_3(x) &= x^3 - \tfrac{3}{5}x : \quad \lambda_0 = -\sqrt{3/5}\,, \quad \lambda_1 = 0\,, \quad \lambda_2 = \sqrt{3/5}\,. \end{aligned}$$

Die Gewichte der zugehörigen Quadraturformeln bestimmt man gemäß

$$\alpha_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-\lambda_j}{\lambda_i-\lambda_j}\,dx = \frac{1}{p'_{n+1}(\lambda_i)p_n(\lambda_i)} \cdot \frac{(n!)^4\,2^{2n+1}}{(2n)!^3(2n+1)},$$

und für die Restglieder gilt

$$R^{(n)}(f) = \frac{2^{2n+3}\,[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}\,f^{(2n+2)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in (-1,1).$$

Für $n=1$ und $n=2$ ergeben sich also die Quadraturformeln

$$\begin{aligned} I^{(1)}(f) &= f\big(-\sqrt{1/3}\big) + f\big(\sqrt{1/3}\big) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \frac{1}{135}\,f^{(4)}(\zeta)\,,\\ I^{(2)}(f) &= \frac{1}{9}\big\{5f\big(-\sqrt{3/5}\big) + 8f(0) + 5f\big(\sqrt{3/5}\big)\big\}\\ &= \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \frac{1}{15.750}\,f^{(6)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in (-1,1)\,. \end{aligned}$$

Gauß-Quadraturformeln über einem beliebigen (beschränkten) Intervall $[a,b]$ gewinnt man durch Anwendung der Koordinatentransformation $\varphi : [-1,1] \to [a,b]$,

$$y = \varphi(x) = \frac{b-a}{2}\,x + \frac{b+a}{2}. \tag{3.2.16}$$

Es ist dann

$$\begin{aligned} \int_a^b f(y)\,dy &= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\varphi(x))\,dx\\ &= \frac{b-a}{2}\sum_{i=0}^{n} \alpha_i\,f(\varphi(\lambda_i)) + \frac{b-a}{2}\,R^{(n)}(f(\varphi(\cdot))), \end{aligned}$$

wobei

$$R^{(n)}(f(\varphi(\cdot))) = \frac{2^{(2n+3)}\,(n+1)!^4}{(2n+3)(2n+2)!^3}\Big(\frac{b-a}{2}\Big)^{2n+2} f^{(2n+2)}(\varphi(\zeta)),$$

d. h.: Die Stützstellen und Gewichte der Quadraturformel $(2n{+}2)$-ter Ordnung über $[a,b]$,

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \tilde\alpha_i f(\tilde\lambda_i),$$

sind gegeben durch

$$\tilde\lambda_i = \tfrac{1}{2}(b-a)\,\lambda_i + \tfrac{1}{2}(b+a)\,, \quad \tilde\alpha_i = \tfrac{1}{2}(b-a)\,\alpha_i\,, \quad i = 0,\dots,n.$$

Für $n=1$ und $n=2$ erhalten wir mit $c = \frac{b+a}{2}$ und $h = \frac{b-a}{2}$ die folgenden Quadraturformeln:

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\{f(c-\sqrt{1/3}h) + f(c+\sqrt{1/3}h)\}\,,$$
$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{18}\{5f(c-\sqrt{3/5}h) + 8f(c) + 5f(c+\sqrt{3/5}h)\}.$$

Die zugehörigen summierten Gauß-Quadraturformeln haben die Gestalt $(x_j = a+jh\,,\ h = (b-a)/N)$:

$$I_h^{(1)}(f) = \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{N-1}\{f(x_j+h') + f(x_{j+1}-h')\}$$

mit $h' = (\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}})h \sim 0.2113249\,h$,

$$I^{(2)}(f) = \frac{h}{18}\sum_{j=0}^{N-1}\{5f(x_j+h') + 8f(x_j+\tfrac{1}{2}h) + 5f(x_{j+1}-h')\}$$

mit $h' = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}\right)h \sim 0{,}1127012\,h$.

Satz 3.5 (Konvergenz der Gauß-Quadratur): *Seien $I^{(n)}(f)$ die $(n+1)$-punktigen Gauß-Formeln zur Berechnung von*

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx.$$

Für jede Funktion $f \in C[-1,1]$ konvergiert dann

$$I^{(n)}(f) \to I(f)\ \ (n \to \infty).$$

Beweis: Für die Gewichte der Gauß-Formel gilt

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} f(\lambda_i^{(n)})\,, \qquad \alpha_i^{(n)} > 0\,, \quad \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} = 2.$$

Sei $\varepsilon > 0$ beliebig vorgegeben. Nach dem Approximationssatz von Weierstraß gibt es ein $p_\varepsilon \in P_m$ (m hinreichend groß), so dass

$$\max_{-1\le x\le 1} |f(x) - p_\varepsilon(x)| \le \tfrac{\varepsilon}{4}.$$

Es ist $R^{(n)}(p_\varepsilon) = 0$ für $2n+2 > m$ hinreichend groß. Für solche n ist also

$$|I(f) - I^{(n)}(f)| \le |\underbrace{I(f-p_\varepsilon)}_{\le \frac{\varepsilon}{4}\cdot 2}| + |\underbrace{I(p_\varepsilon) - I^{(n)}(p_\varepsilon)}_{=0}| + |\underbrace{I^{(n)}(p_\varepsilon - f)}_{\le \frac{\varepsilon}{4}\cdot 2}| \le \varepsilon\,.$$

Wegen der beliebigen Wahl von $\varepsilon > 0$ muß $I^{(n)}(f) \to I(f)$ konvergieren für $n \to \infty$.

Q.E.D.

Die Methode zur Gewinnung der Gauß-Formeln zur „optimalen“ Berechnung von $I(f)$ lässt sich übertragen auf den Fall von Integralen

$$I(f\omega) = \int_a^b f(x)\omega(x)\,dx$$

mit einer (uneigentlich) R-integrabierbaren Gewichtsfunktion $\omega(x) \geq 0$ mit höchstens endlich vielen Nullstellen auf (a, b). Hierbei verwendet man als Stützstellen gerade die Nullstellen der bzgl. des gewichteten Skalarprodukts

$$(p, q)_\omega = \int_a^b p(x)q(x)\omega(x)\,dx$$

orthogonalen Polynome, was durch Satz 3.3 gesichert ist; Satz 3.4 gilt dann sinngemäß.

Beispiel 3.4: Wir betrachten den Fall

$$[a, b] = [-1, 1], \qquad \omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Die orthogonalen Polynome $p_n \in P_n[-1, 1]$ sind in diesem Fall Vielfache der „Tschebyscheff-Polynome“ $T_n(x) \in P_n[-1, 1]$ und sind durch die rekursive Beziehung

$$p_0(x) = 1\,, \quad p_1(x) = x\,, \quad p_{n+1}(x) = 2xp_n(x) - p_{n-1}(x)\,, \quad n \geq 1,$$

bestimmt. Die Stützstellen und Gewichte der zugehörigen Quadraturformeln sind

$$\lambda_i = \cos\Big(\frac{\pi}{2}\,\frac{2i+1}{n+1}\Big)\,, \quad \alpha_i = \frac{\pi}{n+1}\,, \quad i = 0, \dots, n.$$

Die Restglieder haben die Form

$$R^{(n)}(f) = \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!}\,f^{(2n+2)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in (-1, 1).$$

Fall $n = 2$:

$$\int_{-1}^1 f(x)\omega(x)dx = \frac{\pi}{3}\Big\{f\big(-\tfrac{1}{2}\sqrt{3}\big) + f(0) + f\big(\tfrac{1}{2}\sqrt{3}\big)\Big\} + \frac{\pi}{23.040}\,f^{(6)}(\zeta),$$

mit einem Zwischenwert $\zeta \in (-1, 1)$.

3.3 Das Romberg-Verfahren

Die zusammengesetzten Quadraturformeln mit Schrittweite $h = \frac{b-a}{N}$ legen es nahe, das Prinzip der „Extrapolation zum Limes“ $h = 0$ zu verwenden. Die dazu nötige häufige Anwendung der Quadraturformeln erfordert solche mit einfacher Struktur und einer möglichst geringen Anzahl von Funktionsauswertungen. Wir beschränken uns daher im Folgenden auf die zusammengesetzte Trapezregel. Das durch Extrapolation der Trapezregel gewonnene Integrationsverfahren geht auf Romberg[4] (1955) zurück und trägt daher auch seinen Namen. Wir setzen $h = (b-a)/N$ und $x_j = a + jh,\ j = 0,\dots,N$. Für die zusammengesetzte Trapezregel gilt dann:

$$\int_a^b f(x)\,dx \le h\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(b)\right\} - h^2\,\frac{b-a}{12}f''(\zeta). \tag{3.3.17}$$

Ist $f \in C[a,b]$, so konvergiert bekanntlich

$$a(h) = h\sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) + \underbrace{\frac{h}{2}\{f(b) - f(a)\}}_{\to 0} \to \int_a^b f(x)\,dx \quad (h \to 0).$$

Die Grundlage der Berechnung von $\lim_{h\to 0} a(h)$ durch Extrapolation ist wieder eine asymptotische Entwicklung von $a(h)$ nach Potenzen der Gitterweite h .

Satz 3.6 (Euler-Maclaurinsche Summenformel): *Für $f \in C^{2m+2}[a,b]$ gilt die sog. „Euler[5]-Maclaurinsche[6] Summenformel“*

$$\begin{aligned} a(h) = \int_a^b f(x)\,dx + \sum_{k=1}^{m} h^{2k}\frac{B_{2k}}{(2k)!}\left\{f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right\} + \\ + h^{2m+2}\,\frac{b-a}{(2m+2)!}\,B_{2m+2}f^{(2m+2)}(\zeta)\,, \quad \zeta \in [a,b], \end{aligned} \tag{3.3.18}$$

mit den sog. Bernoulli-Zahlen B_{2k} .

Beweis: Siehe z. B. Stoer [1]. Q.E.D.

[4]Werner Romberg (1909–2003): Deutscher Mathematiker; emigrierte 1937 aus polit. Gründen nach Russland und später nach Norwegen; 1950-1968 Professor in Trondheim und 1968-1977 Inhaber des Lehrstuhls für Mathematische Methoden der Naturwissensch. und Numerik in Heidelberg; Beiträge zur Numerik von Differentialgleichungen und numerischen Integration („Rombergsches Extrapolationsverfahren“).

[5]Leonhard Euler (1707–1783), geb. in Basel: Universeller Mathematiker und Physiker; bedeutendster und produktivster Mathematiker seiner Zeit; wirkte in Berlin und St. Petersburg; Arbeiten zu allen mathemischen Gebieten seiner Zeit.

[6]Colin Maclaurin (1698-1746): Schottischer Mathematischer; Professor an den Universitäten Aberdeen (1717) und Edinburgh (1725); Beiträge zur damals „neuen“ Differentialrechnung von Newton (erste systematische Darstellung des zugehörigen „Kalküls“ und Entwicklung der nach ihm benannten Integralformel (1742)), zur klassischen Mechanik, Geometrie und Algebra.

Die Bernoulli[7]-Zahlen sind z. B. bestimmt als die Koeffizienten in der Potenzreihe

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!}\, x^k, \tag{3.3.19}$$

und genügen der Rekursionsformel

$$B_k = -\sum_{j=0}^{k-1} \frac{k!}{j!(k-j+1)!}\, B_j\,, \quad k = 1, \dots . \tag{3.3.20}$$

$$B_0 = 1\,, \quad B_1 = -\tfrac{1}{2}\,, \quad B_2 = \tfrac{1}{6}\,, \quad B_4 = -\tfrac{1}{30}\,, \quad B_6 = \tfrac{1}{42}\,, \quad B_8 = -\tfrac{1}{30}\,, \dots .$$

Für ungerade Indizes gilt $B_{2j+1} = 0$, und für $k \to \infty$ wachsen die Bernoulli-Zahlen sehr schnell an wie

$$B_{2k} \approx (2k)!/(2\pi)^{2k}.$$

Die summierte Trapezregel besitzt also eine Entwicklung nach geraden Potenzen der Schrittweite h. Dieser Umstand macht die Extrapolation mit geraden Polynomen, d. h. solchen in h^2, besonders effizient. Zur Berechnung von

$$\lim_{h\to 0} a(h) = \int_a^b f(x)\, dx$$

geht man nach dem Extrapolationsprinzip wie folgt vor:

1. Für eine Folge von Schrittweiten $h_0 > h_1 > h_2 > \ldots > h_m$ wird $a(h_k)$ berechnet. Dabei verwendet man in der Regel die sog. „Romberg-Folge“ $h_k = h/2^k$. Diese bietet den Vorteil der Wiederverwendbarkeit der schon berechneten Funktionswerte, führt aber auf eine rasch anwachsende Zahl von Stützstellen.

2. Das Interpolationspolynom in h^2 zu den Stützpunkten $(h_i^2, a(h_i))$, $i = 0, \dots, m$ wird an der Stelle $h = 0$ nach dem Neville-Schema ausgewertet:

$$\begin{aligned} & a_{i0} &=& \; a(h_i)\,, \quad i = 0, \dots, m\,, \\ k = 1, \dots, m: & & & \\ & a_{ik} &=& \; a_{i,k-1} + \tfrac{a_{i,k-1} - a_{i-1,k-1}}{(h_{i-k}/h_i)^2 - 1}\,, \quad i = k, \dots, m. \end{aligned}$$

[7]Bernoulli: Schweizer Mathematiker Familie; Jakob Bernoulli (1655–1705) lehrte in Basel; verwendete bereits die vollständige Induktion; Entdecker der „Bernoulli-Zahlen“ und Mitbegründer der Wahrscheinlichkeitsrechnung; sein jüngerer Bruder Johann Bernoulli (1667–1748) wirkte zuletzt in Basel und galt nach dem Tode seines Bruders Jakob als führender Mathematiker seiner Zeit; er leistete Beiträge über Reihen und Differentialgleichungen; sein Sohn Daniel Bernoulli (1700–1782) setzte diese Arbeiten fort; er wirkte in St. Petersburg und Basel und leistete wichtige Beiträge zur Hydromechanik und Gasdynamik.

Dies ist das sog. „Integrationsverfahren von Romberg“. Es baut also sukzessive folgendes Extrapolationstableau auf:

k	0	1	2		$m-1$	m
h_0	$\boxed{a_{00}}$					
h_1	a_{10}	$\boxed{a_{11}}$				
h_2	a_{20}	a_{21}	$\boxed{a_{22}}$			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
h_{m-1}	$a_{m-1,0}$	$a_{m-1,1}$	$a_{m-1,2}$	$\cdots$	$\boxed{a_{m-1,m-1}}$	
h_m	$a_{m,0}$	$a_{m,1}$	$a_{m,2}$	$\cdots$	$a_{m,m-1}$	$\boxed{a_{m,m}}$

Die Diagonalelemente $a_{k,k}$ sind gerade die Näherungen zu $a(0)$, die man durch Extrapolation der Stützpunkte $(h_i^2, a(h_i)),\ i = 0, \dots, k$, gewinnt.

Als Folgerung aus dem allgemeinen Satz 2.7 erhält man die Konvergenzaussage:

Satz 3.7 (Romberg-Integration): *Es sei $f \in C^{2m+2}[a,b]$. Der für die Schrittweitenfolge $h_k = h/2^k,\ k = 0, \dots, m$, berechnete extrapolierte Wert $a_{m,m}$ konvergiert gegen $a(0)$ für $h \to 0$ mit der Fehlerordnung*

$$a(0) - a_{m,m} = O(h^{2m+2}). \tag{3.3.21}$$

Bemerkung 3.3: Sei $f \in C^{2m+2}(-\infty, \infty)$ mit der Periode $[a,b]$. Dann ist $f^{(k)}(a) = f^{(k)}(b)$, und Satz 3.6 ergibt

$$a(h) = \int_a^b f(x)\,dx + O(h^{2m+2}).$$

Ist sogar $f \in C^{\infty}(-\infty, \infty)$, so konvergiert die zusammengesetzte Trapezregel schneller als jede Potenz von h gegen das Integral von f über ein ganzes Periodenintervall. Wegen $f(a) = f(b)$ ist in diesem Fall

$$a(h) = h \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j), \tag{3.3.22}$$

d. h.: Die Trapezregel fällt mit der summierten Rechteckregel zusammen. Diese einfachste Quadraturregel konvergiert also bereits besser als jede Potenz von h, so dass die Anwendung komplizierter Formeln eher schädlich wäre.

3.4 Praktische Aspekte der Integration

Das Hauptproblem bei der numerischen Integration ist die Gewinnung realistischer Schätzungen für den Fehler. Die z. B. für die summierten Newton-Cotes-Formeln hergeleitete *a prio-*

ri Fehlerabschätzung (n ungerade)

$$|I(f) - I_h^{(n)}(f)| \le \omega_n(b-a) \max_{a\le x\le b} |f^{(k)}(x)|\, h^k$$

ist dazu in der Regel ungeeignet, da höhere Ableitungen $f^{(k)}$ des Integranden nur schwer zu berechnen sind. (Man berechne z. B. die 4-te Ableitung von $f(x) = (1+x^2)^{-1/2}\tan(x)\,!$) Die Verwendung der numerischen Differentiation scheidet wegen des damit verbundenen großen Rundungsfehlers und des erneuten Bedarfs von Fehlerabschätzungen aus.

Bei Quadraturformeln, die wie die summierten Newton-Cotes-Formeln von einem Schrittweitenparameter h abhängen, kann das Restglied näherungsweise aus den tatsächlich berechneten Werten durch eine sog. „*a posteriori*“ Fehlerabschätzung bestimmt werden. Für eine Quadraturformel $I_h(f)$ zur Schrittweite h gelte

$$I(f) = I_h(f) + \omega_f h^k + r(f;h)h^{k+1}. \tag{3.4.23}$$

Zur Bestimmung des Restgliedkoeffizienten ω_f berechnet man für ein gewisses h zusätzlich zu $I_h(f)$ noch den Wert $I_{h/2}(f)$ zur halbierten Schrittweite. Für diesen gilt dann

$$I(f) = I_{h/2}(f) + \omega_f\Big(\frac{h}{2}\Big)^k + r\Big(f;\frac{h}{2}\Big)\Big(\frac{h}{2}\Big)^{k+1}. \tag{3.4.24}$$

Durch Elimination von $I(f)$ aus (3.4.23) und (3.4.24) folgt

$$\begin{aligned} I_{h/2}(f) - I_h(f) &= \omega_f\Big\{h^k - \Big(\frac{h}{2}\Big)^k\Big\} + h^{k+1}r(f;h) - \Big(\frac{h}{2}\Big)^{k+1} r\Big(f;\frac{h}{2}\Big) \\ &= \omega_f h^k(1-2^{-k}) + O(h^{k+1}) \end{aligned}$$

bzw.

$$h^k\omega_f = \frac{I_{h/2}(f) - I_h(f)}{1-2^{-k}} + O(h^{k+1}). \tag{3.4.25}$$

Durch den Quotienten

$$\frac{I_{h/2}(f) - I_h(f)}{1-2^{-k}}\, h^{-k} \doteq \omega_f \tag{3.4.26}$$

erhält man also eine Schätzung für den führenden Koeffizienten ω_f im Restglied bis auf einen Fehler der Ordnung $O(h)$, der vernachlässigt wird. Dies kann zu einem heuristischen Abbruchkriterium für die numerische Quadratur verwendet werden:

Für eine Funktion $f \in C^{k+1}[a,b]$ soll das Integral $I(f)$ über $[a,b]$ mit Hilfe einer interpolatorischen Quadraturformel der Ordnung k berechnet werden. Die vorgegebene Fehlertoleranz sei TOL. Das Problem ist also die Bestimmung einer geeigneten Schrittweite h. Wir nehmen wieder an, dass die Quadraturformel eine asymptotische Entwicklung der Art (3.4.23) gestattet. In erster Näherung wollen wir h so bestimmen, dass wenigstens für den führenden Fehlerterm in erster Näherung gilt:

$$|I(f) - I_h(f)| \dot{\leq} |\omega_f h^k| \leq \mathrm{TOL}\,! \tag{3.4.27}$$

Aufgrund der Schätzung für ω_f sollte also gelten:

$$\left| \frac{I_{h/2}(f) - I_h(f)}{1 - 2^{-k}} \right| \leq \mathrm{TOL}\,. \tag{3.4.28}$$

Wegen $I_h(f) \to I(f)$ $(h \to 0)$ wird nach einer gewissen Anzahl von Schrittweitenhalbierungen diese Bedingung erfüllt sein. Aus (3.4.27) lässt sich die gesuchte Schrittweite näherungsweise bestimmen zu

$$h_{\mathrm{TOL}} := \left(\frac{\mathrm{TOL}}{\omega_f} \right)^{1/k}, \quad \omega_f \approx \frac{I_{h/2}(f) - I_h(f)}{1 - 2^{-k}}\, h^{-k}. \tag{3.4.29}$$

Zur Überprüfung der Gültigkeit dieser Schrittweitenwahl, d. h. der Verlässlichkeit der Schätzung von ω_f, vergleicht man noch h_{TOL} mit der Schätzschrittweite h. Im Falle $h_{\mathrm{TOL}} \approx h$ wird das Ergebnis akzeptiert. Ist dagegen $h_{\mathrm{TOL}} \ll h$, so wird der ganze Schätzprozess mit der neuen Schätzschrittweite $h := h_{\mathrm{TOL}}$ wiederholt, bis schließlich der erste Fall eintritt. Bei Unterschreiten einer vorgegebenen minimal erlaubten Schrittweite $h_{\min}$ wird der Approximationsprozess abgebrochen, da das Integral offenbar mit dem zur Verfügung stehenden Aufwand nicht verlässlich berechenbar ist.

Bei gleichem Rechenaufwand (gemessen an der Zahl der Funktionsauswertungen) liefern die Gauß-Formeln die genauesten Resultate. Wenn man bei einem vorgelegten Integral $I(f)$ und gewünschter Genauigkeit TOL wüsste, welche Schrittweite h_{TOL} man zu verwenden hätte, so wären die Gauß-Formeln den anderen Methoden überlegen. Da dies aber a priori kaum möglich ist, müssen die beschriebenen Methoden zur a posteriori Fehlerabschätzung verwendet werden. Da man im Gegensatz zum Extrapolationsverfahren beim Übergang von h nach $h/2$ die bis dahin berechneten Funktionswerte von $f(x)$ nicht weiter verwenden kann, gehen die Vorzüge der Gauß-Formeln schnell verloren. Im Fall $[a,b] = [0,1]$ berechnet sich mit $h = 1/N$ der Rechenaufwand der summierten (abgeschlossene) Newton-Cotes-Formeln (für ungerades n) zu etwa n/h Funktionsauswertungen, d. h.: Zur Erzielung der Ordnung $O(h^{2n+2})$ sind etwa n/h^2 Funktionsauswertungen erforderlich. Die summierten Gauß-Formeln benötigen für dieselbe Genauigkeit nur etwa n/h Funktionsauswertungen. Das Romberg-Verfahren (für $h_i = 2^{-i}h$) liegt mit etwa $2^n/h$ Funktionsauswertungen auch nocht recht gut.

Beispiel 3.5: Für $n = 3$ und $h = 10^{-2}$ ergibt sich ein Fehler der Größe $10^{-16} f^{(8)}(\zeta)$. Die drei Verfahren benötigen hierfür folgende Anzahlen von Funktionsauswertungen:

Newton-Cotes: 30.000 , Gauß: 400 , Romberg: 800.

3.5 Übungsaufgaben

Übung 3.1: Mit wievielen Funktionsauswertungen kann das Integral

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+2x} = 0,54930614\ldots$$

mit einem Fehler kleiner als $\mathrm{TOL} = 10^{-8}$ berechnet werden,

a) mit Hilfe der summierten Trapezregel,

b) mit Hilfe der summierten Simpson-Regel ?

(Hinweis: Die Quadraturformeln brauchen hierzu nicht explizit ausgewertet zu werden.)

Übung 3.2: Man bestimme eine Gauß-Quadraturformel, welche das Integral

$$I = \int_{-1}^1 f(x)\sqrt{|x|}\, dx$$

für alle Polynome aus P_3 exakt integriert.

Übung 3.3: Man gebe eine Quadraturformel zur Berechnung des Integrals

$$I = \int_{-1}^1 \frac{\cos(\pi x/2)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx$$

mit einem garantierten Fehler $\mathrm{TOL} \le 10^{-4}$ an (bei Vernachlässigung der Rundungsfehler). Die Quadraturformel soll so gewählt sein, dass möglichst wenige Funktionsauswertungen erforderlich sind.

Übung 3.4: Man berechne das Integral

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin(x)\, dx$$

mit Hilfe des Romberg-Verfahrens (Schrittweitenfolge $h_i = 2^{-i-1}\pi$, $i = 0, 1, 2, \ldots,$) mit einem Fehler kleiner $\mathrm{TOL} 10^{-4}$. Die Genauigkeit kontrolliere man dabei mit der oben angegebenen Methode zur a posteriori Fehlerabschätzung beim Extrapolationsverfahren.

Übung 3.5 (Praktische Aufgabe): Man schreibe ein Programm zur näherungsweisen Berechnung des Integrals $I(f)$ mit dem Romberg-Verfahren und wende dieses an für das Integral

$$I(f) = \int_0^1 \frac{4}{x^2+1}\, dx.$$

Welcher „exakte“ Wert ergibt sich für das Integral?

a) Der Extrapolationsprozess zur Schrittweitenfolge $h_i = 2^{-i}\,(i = 0, 1, 2, \ldots)$ liefert Näherungswerte $R_i(f) := a_{ii}$ (Diagonalelemente im Extrapolations-Tableau). Man setze den Extrapolationsprozess fort, bis entweder der Fehler kleiner als $\mathrm{TOL} = 10^{-10}$ oder $i = 20$ ist. Dabei kontrolliere man die Genauigkeit von $R_i(f)$ jeweils mit Hilfe der in der oben angegebenen Methode zur a posteriori Fehlerschätzung. Man gebe die Folgen a_{ii} aus und stelle die Entwicklung des geschätzten und des tatsächlichen Fehlers $|b_{ii} - a_{ii}|$ bzw. $|R_i(f) - I(f)|$ grafisch dar.

b) Zur Illustration der Aussagekräftigkeit der Theorie des Extrapolationsverfahrens wiederhole man die Rechnungen (und die grafischen Ausgaben) für die Extrapolation nach Potenzen von h (statt h^2) sowie für die Schrittweitenfolge $h_i = (i+1)^{-1}$, $i = 0, \ldots, 20$.)