8 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 $a \le x_0 < \cdots < x_n \le b$ und Gewichten $\alpha_i \in \boldsymbol{R}$. Ein einfaches Beispiel ist die sog. Rechteck-Regel:

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

8.1 Interpolatorische Quadraturformeln

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

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

und dann gesetzt

$$I^{(n)}(f) := \int_a^b p_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i^{(n)}(x)\,dx}_{\equiv\, \alpha_i}\,. \tag{8.1.1}$$

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

Theorem 8.1.1 *(Lagrange-Quadratur)*

Für interpolatorische Quadraturformeln gilt:

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_a^b f[x_0,\dots,x_n,x] \prod_{j=0}^n (x - x_j)\,dx\,. \tag{8.1.2}$$

Beweis: Die allgemeine Darstellung des Quadraturfehlers folgt aus der Restglieddarstellung der Interpolation in Theorem 7.2.3. □

Aus der Fehlerdarstellung (8.1.2) folgt, dass die interpolatorische Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ "exakt" ist für Polynome $p \in \mathbb{P}_n$; dies ergibt sich ja bereits aus ihrer Konstruktion. Allgemein heisst eine Quadraturformel "von der Ordnung m", wenn durch sie wenigstens alle Polynome aus $\mathbb{P}_{m-1}$ 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-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)

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

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 $x \to t = \frac{x-a}{H}$ erhält man

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

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.

Beispiel 8.1.2 Abgeschlossene Newton-Cotes-Formel für $n = 2$ ($H := \frac{b-a}{2}$)

$$\alpha_0 = H \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\,\frac{t-2}{0-2}\, dt = \frac{H}{2} \int_0^2 (t^2 - 3t + 2)\, dt = \frac{1}{3} H$$

$$\alpha_1 = H \int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\,\frac{t-2}{1-2}\, dt = -H \int_0^2 (t^2 - 2t)\, dt = \frac{4}{3} H$$

$$\alpha_2 = H \int_0^2 \frac{t-0}{2-0}\,\frac{t-1}{2-1}\, dt = \frac{H}{2} \int_0^2 (t^2 - t)\, dt = \frac{1}{3} H$$

$$I_2(f) = \frac{H}{3}\Big[f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\Big] \quad \text{(Simpson-Regel)}$$

Wir geben im folgenden einige der einfachsten Newton-Cotes-Formeln an:

a) Abgeschlossene Formeln ($n = 1, 2, 3, 4$) : $H := (b-a)/n$

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\big[f(a) + f(b)\big] \quad \text{(Trapez-Regel)}$$

$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{6}\Big[f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\Big] \quad \text{(Simpson-Regel)}$$

$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{8}\big[f(a) + 3f(a+H) + 3f(b-H) + f(b)\big] \quad \text{(}\tfrac{3}{8}\text{-Regel)}$$

$$I^{(4)}(f) = \frac{b-a}{90}\Big[7f(a) + 32f(a+H) + 12f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + 32f(b-H) + 7f(b)\Big].$$

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

$$
\begin{aligned}
I^{(0)}(f) &= (b-a)\, f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) \quad \text{(Mittelpunkt-Regel)} \\
I^{(1)}(f) &= \frac{b-a}{2}\,[f(a+\widetilde{H}) + f(b-\widetilde{H})] \\
I^{(2)}(f) &= \frac{b-a}{3}\,\Big[2f(a+\widetilde{H}) - f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + 2f(b-\widetilde{H})\Big] \\
I^{(3)}(f) &= \frac{b-a}{24}\,[11\, f(a+\widetilde{H}) + f(a+2\widetilde{H}) + f(b-2\widetilde{H}) + 11\, f(b-\widetilde{H})]\,.
\end{aligned}
$$

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 $f(f'' \geq 0)$ mit der (Sehnen)-Trapezregel und der (Tangenten)-Trapezregel (Mittelpunkts-Regel):

$$
(b-a)\, f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) \leq I(f) \leq \frac{b-a}{2}\,[f(a) + f(b)]\,. \tag{8.1.3}
$$

Im Gegensatz zu den Newton-Cotes-Formeln verwenden die sog. “**Besselschen Formeln**” auch Stützstellen ausserhalb von $[a, b]$; z.B.:

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

Die sog. “**Hermiteschen Formeln**” verwenden Ableitungswerte; z.B.:

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

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

Wir wollen nun **für die drei gebräuchlichsten Newton-Cotes-Formeln**, die **Trapez-Regel**, die **Simpson-Regel** und die **Mittelpunkt-Regel**, die Restglieddarstellungen ableiten.

Theorem 8.1.3 *(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 Mittelpunkt-Regel:*

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

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 die Methode i) hier nicht angewendet werden. Mit der Newtonschen Formel des Interpolationsrestglieds gilt

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

Nach dem verallgemeinerten Mittelwertsatz der Integralrechnung folgt

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

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

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

Analog lassen sich die Restglieddarstellungen der Newton-Cotes-Formlen höherer Ordnung herleiten.

□

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 im allgemeinen keine Konvergenz $I^{(n)}(f) \to I(f)(n \to \infty)$ 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.

$$I_h^{(n)}(f) := \sum_{i=0}^{N-1} I_{[x_i,x_{i+1}]}^{(n)}(f), \quad h = \frac{b-a}{N}\,. \tag{8.1.4}$$

Gilt für die verwendete Quadraturformel die Fehlerdarstellung

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

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

$$I(f) - I_h^{(n)}(f) = \omega_n (b-a)\, h^{m+1}\, f^{(m+1)}(\zeta), \;\; \zeta \in [a, b]\,. \tag{8.1.5}$$

Beispiel 8.1.4

i) Summierte Trapez-Regel ($m = 1$)

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

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

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

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

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

iii) Summierte Mittelpunkt-Regel ($m = 1$)

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

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

8.2 Das Rombergsche Integrationsverfahren

Die zusammengesetzten Quadraturformeln mit Schrittweite $h = \frac{b-a}{N}$ legen es nahe, das Prinzip der Extrapolation zum Grenzwert "$h = 0$" 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 Trapez-Regel. Das durch Extrapolation der Trapez-Regel gewonnene Integrationsverfahren geht auf Romberg (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 Trapez-Regel gilt dann

$$\int_a^b f(x)\,dx = h\Big\{\frac{1}{2}\,f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2}\,f(b)\Big\} - h^2\,\frac{b-a}{12}\,f''(\zeta)\,. \tag{8.2.1}$$

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.

Theorem 8.2.1 *(Euler-MacLaurinsche Summenformel)*

Für $f \in C^{2m+2}[a,b]$ gilt die sog. "Euler-MacLaurinsche Summenformel"

$$a(h) = \int_a^b f(x)\,dx + \sum_{k=1}^{m} h^{2k}\,\frac{1}{(2k)!}\,B_{2k}\,\{f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\} +$$

$$+\ h^{2m+2}\,\frac{b-a}{(2m+2)!}\,B_{2m+2}\,f^{(2m+2)}(\zeta), \quad \zeta \in [a,b]\,,$$

mit den Bernoulli-Zahlen B_{2k}.

Beweis: Siehe z.B. Stoer I. □

Die Bernoulli-Zahlen sind z.B. bestimmt als die Koeffizienten in der Potenzreihenentwicklung

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!}\,x^k\,, \tag{8.2.2}$$

und genügen der Rekursionsformel

$$B_k = -\sum_{j=0}^{k-1} \frac{k!}{j!(k-j+1)!}\,B_j, \quad k = 1, \dots\,. \tag{8.2.3}$$

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

Für ungerade Indizes gilt $B_{2j+1} = 0$, und für $k \to \infty$ wachsen die Bernoulli-Zahlen sehr schnell (wie $B_{2k} \approx (2k)!/(2\pi)^{2k}$) an.

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

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

geht man nach dem Extrapolationsprinzip wie folgt vor:

i) Für eine Folge von Schrittweiten $h_0 > h_1 > h_2 > \cdots > h_m$ wird $a(h_k)$ berechnet.

   Beispiel: $h_k = h/2^k$ (Romberg-Folge)

Vorteil:	Wiederverwendbarkeit von Funktionswerten
Nachteil:	rasch anwachsende Stützstellenzahl.

ii) Das Interpolationspolynom in h^2 zu den Stützpunkten

$$(h_i^2, a(h_i)), \quad i = 0, \ldots, m\,,$$

wird an der Stelle $h = 0$ nach dem Neville-Schema ausgewertet.

Der "Algorithmus von Romberg" lautet dann:

$$\begin{aligned} a_{i0} &= a(h_i), \quad i = 0, \ldots, m, \qquad && k = 1, \ldots, m: \\ a_{ik} &= a_{i,k-1} + \frac{a_{i,k-1} - a_{i-1,k-1}}{(\frac{h_{i-k}}{h_i})^2 - 1}\,, && i = k, \ldots, m\,. \end{aligned} \tag{8.2.4}$$

Man baut also sukzessive folgendes Exrapolationsschema 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 $(h_i^2, a(h_i)), i = 0, \ldots, k$, gewinnt.

Als Folgerung aus dem allgemeinen Satz 8.2.1 erhält man die Konvergenzaussage:

Theorem 8.2.2 *(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

$$a(0) - a_{m,m} = \boldsymbol{O}(h^{2m+2})\,. \tag{8.2.5}$$

Bemerkung 8.2.3 Sei $f \in C^{2m-2}(-\infty,\infty)$ mit der Periode $[a,b]$. Dann ist $f^{(k)}(a) = f^{(k)}(b)$, und Satz 8.2.1 ergibt

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

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

$$a(h) = h \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j)\,, \tag{8.2.6}$$

d.h.: Die Trapez-Regel fällt mit der summierten Rechteckregel zusammen. Diese primitivste Quadraturregel konvergiert also bereits besser als jede Potenz von h, sodass die Anwendung komplizierter Formeln eher schädlich wäre.

8.3 Gauss'sche Quadraturformeln

Die interpolatorischen Quadraturformeln

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i\, f(x_i) \tag{8.3.1}$$

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:

$$R^{(n)}(p) \equiv I(p) - I^{(n)}(p) = 0 \quad \forall p \in \mathbb{P}_n\,. \tag{8.3.2}$$

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 das Problem, 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. Eine natürliche obere Grenze für die Ordnung einer Quadraturformel der Art $I^{(n)}(\cdot)$ ist $2n+2$. Wäre nämlich $I^{(n)}(\cdot)$ von höherer Ordnung, d.h. insbesondere also exakt für das Polynom

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

so ergäbe sich der Widerspruch

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

Wir wollen im folgenden zeigen, dass es tatsächlich interpolatorische Quadraturformeln zu $n+1$ Stützstellen gibt, welche die Maximalordnung $2n+2$ haben. Sie heissen "**Gauss'sche Quadraturformeln**".

Seien $p_n \in \mathbb{P}_n$ und $p_{2n+1} \in \mathbb{P}_{2n+1}$ die Lagrangeschen 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 $i = n+1, \dots, 2n+1$:

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

Die Polynome

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

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

$$\int_a^b \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\, q(x)\, dx = 0 \quad \forall q \in \mathbb{P}_n \,, \tag{8.3.3}$$

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 $\mathbb{P}_{2n+1}$, also von der Ordnung $2n+2$.

Auf dem Funktionenraum $C[a,b]$ verwenden wir im folgenden wieder das übliche Skalarprodukt und die zugehörige Norm

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

Die obige Bedingung (8.3.3) besagt dann, dass das Polynom

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

bzgl. des Skalarprodukts $(\cdot,\cdot)$ "orthogonal" zum Teilraum $\mathbb{P}_n \subset C[a,b]$ sein muss. Zur Konstruktion von p und damit seiner Nullstellen $x_0, \dots, x_n$ wenden wir das Gram-Schmidtsche

Orthogonalisierungsverfahren auf die Basis $\{1, x, \dots, x^{n+1}\}$ von $\mathbb{P}_{n+1}$ an:

$$\widetilde{p}_0(x) := 1,\ p_0(x) := \|1\|^{-1}\,\widetilde{p}_0(x)\,,$$
$$\widetilde{p}_k(x) := x^k - \sum_{j=0}^{k-1} (x^k, p_j)\,p_j(x),\quad p_k(x) := \|\widetilde{p}_k\|^{-1}\,\widetilde{p}_k(x), \qquad k = 1, \dots, n+1\,.$$

Dann ist $\{\widetilde{p}_0, \dots, \widetilde{p}_{n+1}\}$ ein "Orthogonalsystem" und $\{p_0, \dots, p_{n+1}\}$ ein "Orthonormalsystem" in $\mathbb{P}_{n+1}$. Offenbar ist

$$\widetilde{p}_{n+1}(x) = x^{n+1} + r(x),\quad r \in \mathbb{P}_n\,,$$

sodass wir $p(x) := \widetilde{p}_{n+1}(x)$ 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 allgemeinen Gestalt

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

mit einer integrablen Gewichtsfunktion $\omega(x) > 0$, $x \in (a, b)$ zugrunde. Seien dann $\widetilde{p}_n$, $n = 0, 1, 2, \dots,$ die mit Hilfe des Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens aus $\{1, x, x^2, \dots,\}$ gewonnenen bzgl. $(\cdot,\cdot)_\omega$ orthogonalen Polynome.

Theorem 8.3.1 *(Nullstellen orthogonaler Polynome)*

Die bzgl. des Skalarproduktes $(\cdot,\cdot)_\omega$ orthogonalen Polynome $\widetilde{p}_n$ besitzen lauter reelle, einfache Nullstellen, die alle im Innern des Intervalls $[a, b]$ liegen.

Beweis: Wir definieren die Menge

$$N_n := \{\lambda \in (a, b) | \lambda \text{ Nullstelle } \textbf{ungerader} \text{ Vielfachheit von } \widetilde{p}_n\}$$

und setzen

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

Dann ist das Polynom $\widetilde{p}_n \cdot q \in \mathbb{P}_{n+m}$ reell und hat in (a, b) keinen Vorzeichenwechsel. Es gilt

$$(\widetilde{p}_n, q)_\omega = \int_a^b \widetilde{p}_n(x)\,q(x)\,\omega(x)\,dx \neq 0\,.$$

Für $m < n$ ist dies ein Widerspruch zu $\widetilde{p}_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$. □

Die orthogonalen Polynome $\widetilde{p}_n$ bzgl. des Skalarprodukts $(\cdot,\cdot)$ auf $[a, b]$ heissen "**Legendre-Polynome"** (auf $[a, b]$); üblicherweise betrachtet man diese auf dem Referenzintervall $[-1, 1]$ und bezeichnet sie dann mit $L_n(x)$. Im folgenden betrachten wir daher zunächst den Fall $[a, b] \equiv [-1, 1]$.

Aufgrund von Satz 8.3.1 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 Interval $[-1,1]$ verwenden:

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

Wir fassen die Ergebnisse dieser Vorüberlegungen in folgendem Satz zusammen.

Theorem 8.3.2 *(Gauss'sche Quadraturformeln)*

Es gibt genau eine interpolatorische Quadraturformel zu $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen über dem Intervall $[-1,1]$ mit der Ordnung $2n+2$. Ihre Stützstellen sind gerade die Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1,1)$ des $(n+1)$-the Legendre-Polynoms $L_{n+1} \in \mathbb{P}_{n+1}$, und ihre Gewichte genügen der Beziehung

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

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

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

Beweis: Das Legendre-Polynom L_{n+1} ist orthogonal zu $\mathbb{P}_n$ und hat mit seinen (reellen) Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1,1)$ die Darstellung

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

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

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

und erhalten wegen $l_1^2 \in \mathbb{P}_{2n}$

$$0 < \int_{-1}^{1} l_1(x)^2\, dx = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \underbrace{l_i(\lambda_j)^2}_{\delta_{ij}} = \alpha_i\,.$$

Zum Beweis der Eindeutigkeit der Gauss'schen Quadraturformel sei angenommen, es gäbe eine zweite Formel

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

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

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

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

Es bleibt, die Restglieddarstellung herzuleiten. Nach Satz ? und ? gibt es ein Polynom $h \in \mathbb{P}_{2n+1}$, welches die Hermitesche 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'schen Quadraturformel auf $h(x)$ ergibt dann wegen der Identität $I^{(n)}(h) = I(h)$:

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

□

Die Legendre-Polynome $L_n \in P_n$ lassen sich auf $[-1,1]$ in der Form

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

schreiben und genügen der rekursiven Beziehung

$$L_0(x) \equiv 1, \;\; L_1(x) \equiv x, \;\; L_{n+1}(x) = x\, L_n(x) - \frac{n^2}{4n^2-1} L_{n-1}(x), \;\; n \geq 1\,.$$

Ihre Nullstellen werden analytisch bzw. (für $n > 3$) numerisch bestimmt und können Tabellenwerken entnommen werden; z.B.:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= x^2 - \frac{1}{3}: \quad && \lambda_0 = -\sqrt{1/3}, \;\; \lambda_1 = \sqrt{1/3} \\ L_3(x) &= x^3 - \frac{3}{5}\, x: && \lambda_0 = -\sqrt{3/5}, \;\; \lambda_1 = 0, \qquad \lambda_2 = \sqrt{3/5}\,. \end{aligned}$$

Die Gewichte der zugehörigen Quadraturformeln bestimmt man gemäss

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

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

$$I^{(1)}(f) = f(-\sqrt{1/3}) + f(\sqrt{1/3}) = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \frac{1}{135}\, f^{(4)}(\zeta)\,,$$

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

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

$$y = \varphi(x) = \frac{b-a}{2}\, x + \frac{b+a}{2}\,. \tag{8.3.4}$$

Es ist dann

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

wobei

$$R^{(n)}\big(f(\varphi)(\cdot)\big) = \frac{2^{(2n+3)}(n+1)!^4}{(2n+3)(2n+2)!^3} \underbrace{\frac{d^{2n+2}}{dx^{2n+2}}\, f(\varphi(\zeta))}_{\left(\frac{b-a}{2}\right)^{2n+2} f^{(2n+2)}(\varphi(\zeta))}$$

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

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

sind gegeben durch

$$\widetilde{\lambda}_i = \frac{b-a}{2}\, \lambda_i + \frac{b+a}{2}, \quad \widetilde{\alpha}_i = \frac{b-a}{2}\, \alpha_i, \quad i = 0, \ldots, n\,.$$

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

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2}\,\bigl\{f\bigl(c - \sqrt{1/3h}\bigr) + f\bigl(c + \sqrt{1/3h}\bigr)\bigr\}\,,$$

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

Die zugehörigen summierten Gauss'schen 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 $h' = (\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}})\,h \sim 0.2113249\,h$,

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

mit $h' = (\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}})\,h \sim 0.1127012\,h$.

Theorem 8.3.3 *(Konvergenz der Gauss-Quadratur)*

Sei $I^{(n)}(f)$ die $(n+1)$-punktige Gauss-Legendre-Formeln zur Integration 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-Legendre-Formel gilt

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

Sei $\varepsilon > 0$ belibig vorgegeben. Nach dem Weierstrass'schen Approximationssatz gibt es ein $p_\varepsilon \in \mathbb{P}_m$ (m hinreichend gross), sodass

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

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 $n \to \infty$. □

Die Methode zur Gewinnung der Gauss-Legendre-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 integrablen Gewichtsfunktion $\omega(x) > 0$ auf (a,b), wobei ω auch endlich viele Nullstellen besitzen darf. 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 8.3.1 gesichert ist; Satz 8.3.2 gilt dann sinngemäss.

Beispiel 8.3.4 $[a,b] = [-1,1], \quad \omega(x) = (1-x^2)^{-1/2}$.

Die orthogonalen Polynome sind in diesem Fall die "Tschebyscheff-Polynome" $T_n(x) \in \mathbb{P}_n$, die durch die rekursive Beziehung

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_{n+1}(x) = 2x\,T_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n \geq 1$$

bestimmt sind. Die Stützstellen und Gewichte der zugehörigen Quadraturformeln sind

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

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 $n=2$: $\displaystyle\int_{-1}^1 f(x)\,\omega(x)\,dx = \frac{\pi}{3}\,\Big\{f\Big(-\frac{\sqrt{3}}{2}\Big) + f(0) + f\Big(\frac{\sqrt{3}}{2}\Big)\Big\} + \frac{\pi}{23040}\,f^{(6)}(\zeta).$