# Numerisches Programmieren (IN0019)

**Frank R. Schmidt**

Winter Semester 2016/2017

## Inhaltsverzeichnis

<table>
<thead>
<tr>
<th>Kapitel</th>
<th>Seite</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>6. Quadratur</td>
<td>2</td>
</tr>
<tr>
<td>Quadratur</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>Motivation</td>
<td>4</td>
</tr>
<tr>
<td>Integration (Beispiel)</td>
<td>5</td>
</tr>
<tr>
<td>Allgemeine Form</td>
<td>6</td>
</tr>
<tr>
<td>Klassische Quadratur</td>
<td>7</td>
</tr>
<tr>
<td>Mittelpunktreueg</td>
<td>8</td>
</tr>
<tr>
<td>Trapezregel</td>
<td>9</td>
</tr>
<tr>
<td>Quadratur mit Hilfe von Interpolation</td>
<td>10</td>
</tr>
<tr>
<td>Mittelpunktsgregel und Trapezregel</td>
<td>11</td>
</tr>
<tr>
<td>Simpsonregel / Keplersche Fassregel</td>
<td>12</td>
</tr>
<tr>
<td>Fehlerabschätzung</td>
<td>13</td>
</tr>
<tr>
<td>Polynome und Simpsonregel</td>
<td>14</td>
</tr>
<tr>
<td>Zusammenfassung und Ausblick</td>
<td>15</td>
</tr>
<tr>
<td>Skalarprodukte</td>
<td>16</td>
</tr>
<tr>
<td>Skalarprodukte (Wdh.)</td>
<td>17</td>
</tr>
<tr>
<td>Skalarprodukte</td>
<td>18</td>
</tr>
<tr>
<td>Kapitel</td>
<td>Seitenzahl</td>
</tr>
<tr>
<td>---------------------------------------</td>
<td>------------</td>
</tr>
<tr>
<td>Legendre-Polynome</td>
<td>19</td>
</tr>
<tr>
<td>Rekursion</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>3-Term-Rekursion</td>
<td>21</td>
</tr>
<tr>
<td>Legendre-Polynome</td>
<td>22</td>
</tr>
<tr>
<td><strong>Gauß-Quadratur</strong></td>
<td>23</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Quadratur</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Optimalität der Gauß-Quadratur</td>
<td>25</td>
</tr>
<tr>
<td>Gewichte der Gauß-Quadratur</td>
<td>26</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Quadratur auf [-1;1]</td>
<td>27</td>
</tr>
<tr>
<td>Naive Integration (I₁)</td>
<td>28</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Quadratur (I₁)</td>
<td>29</td>
</tr>
<tr>
<td>Simpsonregel (I₂)</td>
<td>30</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Quadratur (I₂)</td>
<td>31</td>
</tr>
<tr>
<td>Vorteile und Nachteile</td>
<td>32</td>
</tr>
<tr>
<td>Gewichtete Skalarprodukte</td>
<td>33</td>
</tr>
<tr>
<td>3-Term-Rekursion</td>
<td>34</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Tschebyscheff-Quadratur</td>
<td>35</td>
</tr>
<tr>
<td><strong>Romberg-Integration</strong></td>
<td>36</td>
</tr>
<tr>
<td>Zusammengesetzte Quadratur</td>
<td>37</td>
</tr>
<tr>
<td>Extrapolation</td>
<td>38</td>
</tr>
<tr>
<td>Romberg-Integration</td>
<td>39</td>
</tr>
<tr>
<td>Romberg-Integration (Beispiel)</td>
<td>40</td>
</tr>
</tbody>
</table>
Motivation

Bei der Interpolation einer Funktion $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sind wir davon ausgegangen, dass $f$ nur für gewisse Stützstellen $x_0 < \ldots < x_n$ bekannt ist.

Im Folgenden wollen wir eine Funktion $f: [a;b] \to \mathbb{R}$ an Stützstellen $x_0 < \ldots < x_n$ so auswerten, dass wir das Integral

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

möglichst gut approximieren.

Eine erste naive Vorgehensweise ergibt sich aus folgender Gleichung

$$I(f) = \lim_{n \to \infty} \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{n} \quad x_i = a + \frac{i(b-a)}{n}$$
Für die Funktion \( f(x) = \exp(-x^2) \) ergibt sich also (für \( a = -1 \) und \( b = 1 \))

\[
I(f) \approx 1.49365 \quad \frac{f(x_0) + f(x_1)}{1} \approx 1.36788 \quad \varepsilon_{\text{rel}} \approx 8.42\%
\]
Allgemeine Form

Um eine verbesserte Approximation zu finden, wollen wir folgende Quadraturformel betrachten

\[ I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cdot w_i \]

Die Parameter, die wir wählen können, sind die \( n + 1 \) verschiedenen Stützstellen \( x_i \) sowie die \( n + 1 \) Gewichte \( w_i \).

Beide Ausdrücke \( I(f) \) und \( I_n(f) \) sind für beliebige stetige Funktionen \( f : [a; b] \to \mathbb{R} \) berechenbar. Außerdem sind diese Ausdrücke lineare Funktionale, d.h. für \( f, g \in C^0(\mathbb{R}) \) und \( \alpha, \beta \in \mathbb{R} \) gilt

\[
I(\alpha \cdot f + \beta \cdot g) = \alpha \cdot I(f) + \beta \cdot I(g) \\
I_n(\alpha \cdot f + \beta \cdot g) = \alpha \cdot I_n(f) + \beta \cdot I_n(g)
\]


**Mittelpunktregel**

Sind die Stützstellen $x_i$ äquidistant über das Intervall $[a, b]$ verteilt, so nennt man die Quadratur **Newton-Cotes-Formeln**. Ist $x_0 = a$ und $x_n = b$, so redet man von **geschlossenen**, andernfalls von **offenen** Newton-Cotes Formeln.

Bei der **Mittelpunktregel** interpoliert man die Funktion $f$ an der Stelle $\frac{a+b}{2}$. Das heißt wir ersetzen $f(x)$ durch das interpolierende Polynom vom Grad 0:

\[
I_0(f) = \int_a^b f \left( \frac{a + b}{2} \right) \, dx \\
= (b - a) f \left( \frac{a + b}{2} \right)
\]

Das heißt bei der Mittelpunktregel ist $n = 0$ und wir haben

\[
w_0 = b - a \quad \quad x_0 = \frac{a + b}{2}.
\]
Trapezregel

Bei der Trapezregel interpoliert man die Funktion \( f \) zwischen \( a \) und \( b \). Das heißt wir ersetzen \( f(x) \) durch das interpolierende Polynom vom Grad 1:

\[
I_1(f) = \int_a^b \frac{x \cdot (f(b) - f(a)) + bf(a) - af(b)}{b - a} \, dx
\]

\[
= \frac{1}{2} \frac{(b^2 - a^2) \cdot (f(b) - f(a))}{b - a} + \frac{(b - a)[bf(a) - af(b)]}{b - a}
\]

\[
= \frac{1}{2} ((a + b) \cdot (f(b) - f(a)) + [bf(a) - af(b)]
\]

\[
= (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}
\]

Das heißt bei der Trapezregel ist \( n = 1 \) und wir haben

\[
w_0 = w_1 = \frac{b - a}{2} \quad x_0 = a \quad x_1 = b.
\]
Quadratur mit Hilfe von Interpolation

Wenn wir Stützstellen $x_0 < \ldots < x_n$ wählen, erhalten wir das eindeutige Interpolationspolynom mit Hilfe der Lagrangedarstellung, d.h.

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

Damit erhalten wir eine Quadratur mittels

$$w_i = \int_a^b L_i(x) \, dx$$

Denn es gilt wegen der Linearität

$$I_n(f) = \int_{a}^{b} p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cdot w_i$$
Mittelpunktsregel und Trapezregel

Für \( n = 0 \) und \( x_0 = \frac{a+b}{2} \) erhalten wir

\[
L_0(x) = 1
\]
\[
w_0 = \int_a^b L_0(x) \, dx = b - a,
\]

was gerade zur Mittelpunktsregel führt.

Für \( n = 0 \) und \( x_0 = a \) und \( x_1 = b \) erhalten wir

\[
L_0(x) = \frac{b - x}{b - a}
\]
\[
w_0 = \int_a^b L_0(x) \, dx = \frac{b - a}{2}
\]
\[
L_1(x) = \frac{x - a}{b - a}
\]
\[
w_1 = \int_a^b L_1(x) \, dx = \frac{b - a}{2},
\]

was gerade zur Trapezregel führt.
### Simpsonregel / Keplersche Fassregel

Für $n = 2$ sowie $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ und $x_2 = b$ erhalten wir mit der Notation $c = x_1$ und $h = c - x_0 = x_2 - x_1$ gerade

\[
L_0(c + x) = \frac{x^2 - hx}{2h^2} \quad \text{mit} \quad w_0 = \int_{-h}^{h} L_0(c + x) \, dx = \frac{h^3}{3}
\]

\[
L_1(c + x) = -\frac{x^2 - h^2}{h^2} \quad \text{mit} \quad w_1 = \int_{-h}^{h} L_1(c + x) \, dx = \frac{4h^3}{3}
\]

\[
L_2(c + x) = \frac{x^2 + hx}{2h^2} \quad \text{mit} \quad w_2 = \int_{-h}^{h} L_2(c + x) \, dx = \frac{h^3}{3}
\]

Dies führt zur **Simpsonregel** und wir haben

\[
I_2(f) = \frac{b - a}{6} \left( f(a) + 4f \left( \frac{a + b}{2} \right) + f(b) \right)
\]
Fehlerabschätzung

Um den Fehler bei der Quadraturformel abschätzen zu können, erinnern wir uns an folgendes Fehlerabschätzung für Interpolationen

\[
f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0) \cdots (x - x_n) \quad \xi \in [a; b]
\]

Definieren wir \( M := \max_{\xi \in [a; b]} |f^{(n+1)}(\xi)| \), so gilt wegen \(|x - x_i| \leq b - a\) gerade

\[
|I(f) - I_n(f)| \leq \int_a^b \frac{M}{(n+1)!}(b - a)^{n+1} \, dx = \frac{M}{(n+1)!}(b - a)^{n+2}
\]

Dies führt dazu, dass Quadraturformeln, die Polynome vom Grad \( n \) benutzen, für Polynome vom Grad \( n \) exakte Lösungen liefern.
Polynome und Simpsonregel

Für die Monome $p_n(x) = x^n$ gilt gerade

$$I(p_n) = \int_a^b x^n \, dx = \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1}$$

Wir wissen, dass die Simpsonregel dies exakt berechnen sollte, falls $n \leq 2$ gilt:

\[ I_2(p_0) = \frac{b - a}{6} \left[ 1 + 4 + 1 \right] = \frac{b - a}{6} = I(p_0) \]
\[ I_2(p_1) = \frac{b - a}{6} \left[ a + 2(a + b) + b \right] = \frac{b^2 - a^2}{6} = I(p_1) \]
\[ I_2(p_2) = \frac{b - a}{6} \left[ a^2 + (a^2 + 2ab + b^2) + b^2 \right] = \frac{b^3 - a^3}{6} = I(p_2) \]
\[ I_2(p_3) = \frac{b - a}{6} \left[ a^3 + \frac{1}{2} (a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3) + b^3 \right] = \frac{b^4 - a^4}{6} = I(p_3) \]
Zusammenfassung und Ausblick

Jede Quadraturformel $I_n$, die auf der Lagrange-Darstellung beruht, berechnet das Integral $I(f)$ exakt, falls $f \in \Pi_n$.

Wir können die Stützstellen so wählen, dass die Quadraturformel $I_n$ auch für $f \in \Pi_{n+k}$ noch gilt. Das Ziel ist es, $k$ möglichst groß zu wählen.

Die Simpsonregel berechnet $I(f)$ exakt für $f \in \Pi_3$, d.h. $k = 1$.

Die Mittelpunktregel berechnet $I(f)$ exakt für $f \in \Pi_1$, d.h. $k = 1$.

Die Gauß-Quadratur kann $k = n + 1$ wählen, d.h. wir können z.B. zwei Stützstellen so wählen, dass $I_1(f) = I(f)$ für alle $f \in \Pi_3$ gilt.

Außerdem werden wir sehen, dass es für jede Quadratur $I_n$ ein Polynom $f \in \Pi_{2n+2}$ gibt, so dass $I_n(f) \neq I(f)$, d.h. man kann die Gauß-Quadratur als optimale Quadratur interpretieren.
Wir hatten bereits gesehen, dass die *stetigen Funktionen* oder die *Polynome* einen $\mathbb{R}$-*Vektorraum* beschreiben, d.h. man kann solche Funktionen addieren oder mit einem Skalar $\lambda \in \mathbb{R}$ multiplizieren und erhält wieder eine stetige Funktion bzw. ein Polynom.

Als nächstes wollen wir ein Skalarprodukt für Funktionen definieren.

Sei $V$ ein $\mathbb{R}$-*Vektorraum*. Dann nennen wir eine Abbildung $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ ein Skalarprodukt, wenn Folgendes gilt

\[
\begin{align*}
\langle \alpha x + \beta y, z \rangle &= \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle & \text{(Linear in der ersten Komponente)} \\
\langle x, \alpha y + \beta z \rangle &= \alpha \langle x, y \rangle + \beta \langle x, z \rangle & \text{(Linear in der zweiten Komponente)} \\
\langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle & \text{(Symmetrisch)} \\
\langle x, x \rangle &\geq 0 \\
\langle x, x \rangle = 0 &\iff x = 0 & \text{(Positiv-Definit)}
\end{align*}
\]
Skalarprodukte

Betrachten wir Funktionen aus $C^0([a, b])$, d.h. stetige Funktionen $f, g: [a, b] \to \mathbb{R}$, so lässt sich wie folgt ein Skalarprodukt definieren

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

Man kann leicht sehen, dass dieser Ausdruck linear in $f$ und in $g$ ist. Die Symmetrie folgt aus der Kommutativität des Produkts. Die Positiv-Definitheit folgt aus der Stetigkeit der Funktionen.

Mit Hilfe des Skalarproduktes kann man von orthogonalen Funktionen sprechen. Zum Beispiel sind $\sin(\cdot), \cos(\cdot) \in C^0[-\pi, \pi]$ orthogonal zueinander:

$$\langle \sin, \cos \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x) \cos(x) \, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{2} \sin(x)^2 \right] \, dx = 0$$
Legendre-Polynome

Im Folgenden wollen wir eine Orthogonalbasis von Polynomen finden. Wir wollen also Polynome $P_0, P_1, \ldots$ finden, so dass Folgendes gilt

$$P_n = x^n + \sum_{i=0}^{n-1} a_{n,i} \cdot x^i$$

$$\langle P_n, q \rangle = 0 \quad \forall q \in \Pi_{n-1}$$

Diese Polynome heissen Legendre-Polynome.

Hierzu reicht es aber, dass $\langle P_n, P_i \rangle = 0$ für alle $i < n$ gilt, da die vorherigen $P_i$ ja bereits eine Basis von $\Pi_{n-1}$ bilden.

Insbesondere kann man $P_n$ wie folgt darstellen

$$P_n = (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2} + \sum_{i=0}^{n-3} C_i P_i$$
Rekursion

Die Koeffizienten von \( P_n = (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2} + \sum_{i=0}^{n-3} C_i P_i \) lassen sich mit Hilfe von Skalarprodukten berechnen. Für \( j < n - 2 \) gilt

\[
0 = \langle P_n, P_j \rangle = \langle P_{n-1}, (x + A)P_j \rangle + B \langle P_{n-2}, P_j \rangle + \sum_{i=0}^{n-3} C_i \langle P_i, P_j \rangle
\]

\[
= C_j \langle P_j, P_j \rangle
\]

Damit sind alle \( C_i = 0 \) und \( P_n \) hängt nur von \( P_{n-1} \) und \( P_{n-2} \) ab:

\[
0 = \langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle + A \langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle \quad \Leftrightarrow \quad A = -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle}{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle}
\]

\[
0 = \langle xP_{n-1}, P_{n-2} \rangle + B \langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle \quad \Leftrightarrow \quad B = -\frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle}
\]
3-Term-Rekursion

Insgesamt erhalten wir also die folgende 3-Term-Rekursion für Polynome, die auf \([a; b]\) definiert sind:

\[
P_0 = 1 \\
P_n = (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2}
\]

\[
P_1 = x - \frac{a + b}{2} \\
A = -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle}{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle} \\
B = -\frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle}
\]

Insbesondere bedeutet das für Polynome, die auf \([-1; 1]\) definiert sind:

\[
P_0 = 1 \\
P_1 = x \\
P_2 = x^2 - \frac{1}{3} \\
P_3 = x^3 - \frac{3}{5}x
\]
Wir werden sehen, dass uns die **Nullstellen** dieser Polynome die **Stützstellen** der **Gauß-Quadratur** liefern werden.
Gauß-Quadratur

Seien $x_0, \ldots, x_n$ die $n + 1$ Nullstellen des Legendre-Polynoms $P_{n+1}$. Dann wird dadurch die Gauß-Quadratur definiert

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cdot w_i$$

Diese Quadratur ist exakt für alle $q \in \Pi_n$. Weiter gibt es für jedes $p \in \Pi_{2n+1}$ nach Polynomdivision mit Rest folgende Darstellung

$$p = q \cdot P_{n+1} + r \quad \quad \quad \quad q, r \in \Pi_n$$

Damit erhalten wir

$$I(p) = \langle q, P_{n+1} \rangle + I(r) = I(r)$$

$$I_n(p) = \sum_{i=0}^{n} q(x_i)P_{n+1}(x_i)w_i + I_n(r) = I_n(r) = I(r)$$
Optimalität der Gauß-Quadratur

Wir haben gesehen, dass die Gauß-Quadratur \( I_n \) für alle \( q \in \Pi_{2n+1} \) exakt ist. Wir wollen zeigen, dass keine Quadratur alle \( q \in \Pi_{2n+2} \) exakt integrieren kann.

Sei hierzu \( I_n \) eine beliebige Quadratur mit den Stützstellen \( x_0 < \ldots < x_n \). Wir wählen nun \( f(x) := \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^2 \in \Pi_{2n+2} \).

Hierfür gilt nun

\[
I(f) = \int_a^b f(x) \, dx > 0
\]

\[
I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i \cdot \prod_{j=0}^{n}(x_i-x_j)^2 = 0
\]

Das heißt jede Quadratur \( I_n \) kann bestenfalls die Polynomklasse exakt integrieren, die die Gauß-Quadratur integrieren kann.

\[ \text{IN0019 - Numerisches Programmieren} \]

Gewichte der Gauß-Quadratur

Da die Gauß-Quadratur \( I_n \) für alle \( q \in \Pi_{2n+1} \) exakt ist, ist sie auch exakt für \( Q_i := \frac{P_{n+1}}{x-x_i} P_n \in \Pi_{2n} \): \( (x_0 < \ldots < x_n \text{ sind die Nullstellen von } P_{n+1}) \)

\[
I_n(Q_i) = \sum_{j=0}^{n} w_j Q_i(x_j) = w_i P'_{n+1}(x_i) P_n(x_i)
\]

Da \( \frac{P_{n+1}}{x-x_i} \) als führenden Koeffizienten gerade 1 hat, haben wir die Darstellung \( \frac{P_{n+1}}{x-x_i} = P_n + R \), wobei \( R \in \Pi_{n-1} \) und wir erhalten:

\[
I(Q_i) = \langle P_n, P_n \rangle + \langle P_n, R \rangle = \langle P_n, P_n \rangle
\]

Somit erhalten wir also

\[
w_i = \frac{\langle P_n, P_n \rangle}{P'_{n+1}(x_i) P_n(x_i)}
\]
Gauß-Quadratur auf \([-1;1]\)

Für \(n = 0\) haben wir \(P_1 = x, x_0 = 0\) und die Gauß-Quadratur \(I_0\) wird zu

\[
I_0(f) = 2 \cdot f(0)
\]

das ist genau die Mittelpunktregel.

Für \(n = 1\) haben wir \(P_2 = x^2 - \frac{3}{4}, x_{0,1} = \pm \sqrt{\frac{1}{3}}\) und die Gauß-Quadratur \(I_1\):

\[
I_1(f) = f \left( -\sqrt{\frac{1}{3}} \right) + f \left( +\sqrt{\frac{1}{3}} \right)
\]

Für \(n = 2\) haben wir \(P_2 = x^3 - \frac{3}{5}x, x_{0,2} = \pm \sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0\) und

\[
I_2(f) = \frac{5}{9} f \left( -\sqrt{\frac{3}{5}} \right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f \left( +\sqrt{\frac{3}{5}} \right)
\]
Für $f(x) = \exp(-x^2)$ ergibt sich nach der naiven Quadratur $I_1$ für $\int_{-1}^{1}$

\[
I(f) \approx 1.49365 \quad I_1(f) \approx 1.36788 \quad \varepsilon_{rel} \approx 8.42\%
\]
Für \( f(x) = \exp(-x^2) \) ergibt sich nach der Gauß-Quadratur \( I_1 \) für \( \int_{-1}^{1} \)

\[
I(f) \approx 1.49365 \quad \quad \quad \quad \quad I_1(f) \approx 1.43306 \quad \quad \quad \quad \quad \varepsilon_{rel} \approx 4.06\%
\]
Für \( f(x) = \exp(-x^2) \) ergibt sich nach der Simpsonregel \( I_2 \) für \( \int_1^{-1} \):

\[
I(f) \approx 1.49365 \quad I_2(f) \approx 1.57859 \quad \varepsilon_{rel} \approx 5.69\%
\]
**Gauß-Quadratur ($I_2$)**

Für $f(x) = \exp(-x^2)$ ergibt sich nach der Gauß-Quadratur $I_2$ für $\int_{-1}^{1}$

\[
I(f) \approx 1.49365 \quad I_2(f) \approx 1.49868 \quad \varepsilon_{\text{rel}} \approx 0.34\%
\]

**Vorteile und Nachteile**

Für festes $n$ ergibt sich mit der Gauß-Quadratur ein **optimales Ergebnis** für alle Polynome $p \in \Pi_{2n+1}$.

Falls das Resultat nicht gut genug ist, sollte man $n$ **erhöhen**.

Dadurch werden sich aber alle Stützstellen ändern, d.h. es müssen **alle Stützstellen** neu ausgewertet werden.

Dieser Effekt kann abgemildert werden, indem man $n$ in jedem Schritt verdoppelt. Man hat dann maximal doppelt so viele Stützstellen ausgewertet, wie nötig wären.

Wenn man die Gauß-Quadratur **dynamisch** benutzen möchte, müssen Nullstellen von Polynomen hohen Grades berechnet werden. Dies ist im Allgemeinen recht schwierig.

Dieses Problem kann überwunden werden, wenn wir die orthogonalen Polynome bzgl. eines anderen **Skalarprodukts** berechnen.
Gewichtete Skalarprodukte

Ist eine Funktion $\varphi : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}^+$ gegeben, so können wir das bzgl. $\varphi$ gewichtete Skalarprodukt definieren

$$\langle f, g \rangle_\varphi = \int_a^b f(x)g(x)\varphi(x)\,dx$$

Damit läßt sich eine Gauß-Quadratur $I_n$ beschreiben, die für jedes Polynom $p \in \Pi_{2n+1}$ das Integral $\int_a^b p(x)\varphi(x)\,dx$ exakt berechnet.

Von besonderem Interesse ist der folgende Fall

$$a = -1 \quad b = 1 \quad \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

Auch hierfür läßt sich eine Orthogonalbasis berechnen.
3-Term-Rekursion

Wir haben die folgende 3-Term-Rekursion für die Basispolynome:

\[ \begin{align*}
P_0 &= 1 \\
P_1 &= x \\
P_n &= (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2}
\end{align*} \]

für

\[ \begin{align*}
A &= -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi} \\
B &= -\frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle_\varphi}
\end{align*} \]

Man kann zeigen, dass \( P_{2n} \) gerade und \( P_{2n+1} \) ungerade Funktionen sind. Damit ist \( A = 0 \) und wir haben

\[ P_n = xP_{n-1} - \frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle_\varphi} P_{n-2} \]

Weiter kann man zeigen, dass die 3-Term-Rekursion zur Rekursionsformel der Tschebyscheff-Polynome führt.
Gauß-Tschebyscheff-Quadratur

Wir haben also

\[ P_n = \frac{1}{2^n} \cos \left( (n + 1) \cdot \cos^{-1}(x) \right) \]
\[ x_i = \cos \left( \frac{2i + 1}{2n + 2} \pi \right) \]
\[ w_i = \frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{P_n'(x_i)P_{n-1}(x_i)} = \frac{\pi}{n + 1} \]

Die Gauß-Tschebyscheff-Quadratur zur Berechnung von \( \int_{-1}^{1} f(x) \, dx \) ist also

\[ I_n(f) = \frac{\pi}{n + 1} \sum_{i=0}^{n} f \left( \cos \left( \frac{2i + 1}{2n + 2} \pi \right) \right) \cdot \sin \left( \frac{2i + 1}{2n + 2} \pi \right) \]

Sie ist exakt für \( f \), die sich als \( f = \frac{p}{\sqrt{1-x^2}} \) für \( p \in \Pi_{2n+1} \) darstellen lassen.
Zusammengesetzte Quadratur

Mit Hilfe jeder Quadratur $I_n$ kann man eine zusammengesetzten Quadratur definieren ($h = \frac{b-a}{k}$):

\[ I(f) = \int_a^b f(x) \, dx = \int_a^{a+h} f(x) \, dx + \ldots + \int_a^{b} f(x) \, dx \]

\[ = h \cdot \sum_{i=1}^{k} \frac{f(a + (i-1) \cdot h) + f(a + i \cdot h)}{2} =: T_f(h) \]

Wir betrachten hier also die (recht ungenaue) Trapezregel.

Die wesentliche Idee der Extrapolation ist die Euler-Maclaurin-Summe, die man als komplizierte Erweiterung der Taylor-Entwicklung verstehen kann. Wir benutzen hier lediglich folgendes Ergebnis ($\tau_i$ hängen nur von $a, b, f$ ab)

\[ T_f(h) = I(f) + \tau_1 h^2 + \ldots + \tau_{m-1} h^{2m-2} + \rho_m(h) h^{2m} \]
**Extrapolation**

Halbieren wir nun jedes Integrationsintervall und berechnen $T_f$ erneut, so haben wir in der Tat die beiden Werte $T_f(h)$ und $T_f(h/2)$ berechnet.

Damit erhalten wir folgende Fehlerdarstellungen

\[
T_f(h) = I(f) + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \ldots + \tau_{m-1} h^{2m-2} + \rho_m(h) h^{2m} \\
T_f \left( \frac{h}{2} \right) = I(f) + \frac{h^2}{4} \tau_1 + \frac{h^4}{16} \tau_2 + \ldots + \frac{h^{2m-2}}{2^{2m-2}} \tau_{m-1} + \frac{h^{2m}}{2^m} \rho_m(h)
\]

Für die **Extrapolation** $R := \frac{4T_f(h/2) - T_f(h)}{3}$ ergibt sich dann aber

\[
R = I(f) + \hat{\tau}_2 h^4 + \ldots + \hat{\tau}_{m-1} h^{2m-2} + \rho_m(h) h^{2m},
\]

d.h. wir konnten den Fehler von $h^2$ auf $h^4$ senken.
Romberg-Integration

Da wir diese Operation iterativ durchführen können, erhalten wir eine neue Quadratur, die ohne komplizierte Polynominterpolation auskommt. Diese Quadratur heißt Romberg-Integration.

Sie liefert $R(k, k)$ zurück nachdem $R(i, j)$ wie folgt berechnet wird

$$R(0, j) = T_f \left( \frac{b - a}{j + 1} \right)$$

$$R(i, j) = \frac{4^j R(i, j - 1) - R(i - 1, j - 1)}{4^j - 1}$$

Interessanterweise ergibt sich, dass $R(1, \cdot)$ gerade der Simpsonregel entspricht.

Ab $i = 3$ unterscheiden sich die Newton-Cotes-Formeln von der Romberg-Integration. Man kann zeigen, dass die Romberg-Integration numerisch stabiler sind als die Newton-Cotes-Formeln.
Um $R(k,k)$ ausgeben zu können, werden insgesamt $2^k + 1$ Stützstellen ausgewertet. Wir werden daher $R(k,k)$ mit den Quadraturen $I_{2^k}$ vergleichen.

<table>
<thead>
<tr>
<th>$\varepsilon_{rel}$ in %</th>
<th>$k = 0$</th>
<th>$k = 1$</th>
<th>$k = 2$</th>
<th>$k = 3$</th>
<th>$k = 4$</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Trapezregel</td>
<td>50.741</td>
<td>8.4202</td>
<td>2.0693</td>
<td>0.5142</td>
<td>0.1283</td>
</tr>
<tr>
<td>Romberg</td>
<td>50.741</td>
<td>5.6866</td>
<td>0.3282</td>
<td>$&lt; 7 \cdot 10^{-3}$</td>
<td>$&lt; 5 \cdot 10^{-5}$</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß-Tschebyscheff</td>
<td>9.7932</td>
<td>3.2277</td>
<td>0.7694</td>
<td>0.2457</td>
<td>0.0697</td>
</tr>
<tr>
<td>Gauß</td>
<td>4.0562</td>
<td>0.3368</td>
<td>$&lt; 2 \cdot 10^{-3}$</td>
<td>$&lt; 2 \cdot 10^{-9}$</td>
<td>$&lt; 5 \cdot 10^{-10}$</td>
</tr>
</tbody>
</table>