

# Numerisches Programmieren (IN0019)

Frank R. Schmidt

Winter Semester 2016/2017

6. Quadratur . . . . .	2
<b>Quadratur</b>	<b>3</b>
Motivation . . . . .	4
Integration (Beispiel) . . . . .	5
Allgemeine Form . . . . .	6
<b>Klassische Quadratur</b>	<b>7</b>
Mittelpunktregel . . . . .	8
Trapezregel . . . . .	9
Quadratur mit Hilfe von Interpolation . . . . .	10
Mittelpunktsregel und Trapezregel . . . . .	11
Simpsonregel / Keplersche Fassregel . . . . .	12
Fehlerabschätzung . . . . .	13
Polynome und Simpsonregel . . . . .	14
Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	15
<b>Skalarprodukte</b>	<b>16</b>
Skalarprodukte (Wdh.) . . . . .	17
Skalarprodukte . . . . .	18

Legendre-Polynome . . . . .	19
Rekursion . . . . .	20
3-Term-Rekursion . . . . .	21
Legendre-Polynome . . . . .	22
<b>Gauß-Quadratur</b> . . . . .	<b>23</b>
Gauß-Quadratur . . . . .	24
Optimalität der Gauß-Quadratur . . . . .	25
Gewichte der Gauß-Quadratur . . . . .	26
Gauß-Quadratur auf $[-1; 1]$ . . . . .	27
Naive Integration ( $I_1$ ) . . . . .	28
Gauß-Quadratur ( $I_1$ ) . . . . .	29
Simpsonregel ( $I_2$ ) . . . . .	30
Gauß-Quadratur ( $I_2$ ) . . . . .	31
Vorteile und Nachteile . . . . .	32
Gewichtete Skalarprodukte . . . . .	33
3-Term-Rekursion . . . . .	34
Gauß-Tschebyscheff-Quadratur . . . . .	35
<b>Romberg-Integration</b> . . . . .	<b>36</b>
Zusammengesetzte Quadratur . . . . .	37
Extrapolation . . . . .	38
Romberg-Integration . . . . .	39
Romberg-Integration (Beispiel) . . . . .	40

**Motivation**

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

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

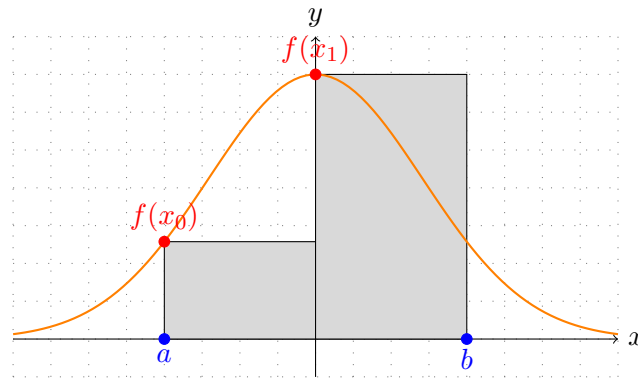
$$I(f) := \int_a^b f(x) dx$$

möglichst gut approximieren.

Eine erste naive Vorgehensweise ergibt sich aus folgender Gleichung

$$I(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{n} \quad x_i = a + \frac{i(b-a)}{n}$$

## Integration (Beispiel)



Für die Funktion  $f(x) = \exp(-x^2)$  ergibt sich also (für  $a = -1$  und  $b = 1$ )

$$I(f) \approx 1.49365$$

$$\frac{f(x_0) + f(x_1)}{1} \approx 1.36788$$

$$\varepsilon_{\text{rel}} \approx 8.42\%$$

## Allgemeine Form

Um eine verbesserte Approximation zu finde, 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  $f: [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$  berechenbar. Außerdem sind diese Ausdrücke **lineare Funktionale**, d.h. für  $f, g \in C^0(\mathbb{R})$  und  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  gilt

$$\begin{aligned} I(\alpha \cdot f + \beta \cdot g) &= \alpha \cdot I(f) + \beta \cdot I(g) \\ I_n(\alpha \cdot f + \beta \cdot g) &= \alpha \cdot I_n(f) + \beta \cdot I_n(g) \end{aligned}$$

**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:

$$\begin{aligned} I_0(f) &= \int_a^b f\left(\frac{a+b}{2}\right) dx \\ &= (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \end{aligned}$$

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

$$w_0 = b - a$$

$$x_0 = \frac{a+b}{2}.$$

## 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:

$$\begin{aligned} I_1(f) &= \int_a^b \frac{x \cdot (f(b) - f(a)) + bf(a) - af(b)}{b - a} dx \\ &= \frac{1}{2} \frac{(b^2 - a^2) \cdot (f(b) - f(a))}{b - a} + \frac{(b - a)[bf(a) - af(b)]}{b - a} \\ &= \frac{1}{2} ((a + b) \cdot (f(b) - f(a))) + [bf(a) - af(b)] \\ &= (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2} \end{aligned}$$

Das heißt bei der Trapezregel ist  $n = 2$  und wir haben

$$w_1 = w_2 = \frac{b - a}{2}$$

$$x_1 = a$$

$$x_2 = b.$$

## Quadratur mit Hilfe von Interpolation

Wenn wir Stützstellen  $x_0 < \dots < x_n$  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

$$I_n(f) = \int_a^b p_n(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot w_i$$



## 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  $n = 1$  und  $x_0 = a$  und  $x_1 = b$  erhalten wir

$$L_0(x) = \frac{b-x}{b-a}$$

$$L_1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

$$w_0 = \int_a^b L_0(x) dx = \frac{a+b}{2}$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x) dx = \frac{a+b}{2},$$

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

$$L_0(c+x) = \frac{x^2 - hx}{2h^2}$$

$$L_1(c+x) = -\frac{x^2 - h^2}{h^2}$$

$$L_2(c+x) = \frac{x^2 + hx}{2h^2}$$

$$w_0 = \int_{-h}^h L_0(c+x) dx = \frac{h}{3}$$

$$w_1 = \int_{-h}^h L_1(c+x) dx = \frac{4h}{3}$$

$$w_2 = \int_{-h}^h L_2(c+x) dx = \frac{h}{3}$$

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

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

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:

$$\begin{aligned} I_2(p_0) &= \frac{b-a}{6}[1+4+1] & &= \frac{b-a}{1} = I(p_0) \\ I_2(p_1) &= \frac{b-a}{6}[a+2(a+b)+b] & &= \frac{b^2-a^2}{2} = I(p_1) \\ I_2(p_2) &= \frac{b-a}{6}[a^2+(a^2+2ab+b^2)+b^2] & &= \frac{b^3-a^3}{3} = I(p_2) \\ I_2(p_3) &= \frac{b-a}{6}\left[a^3+\frac{1}{2}(a^3+3a^2b+3ab^2+b^3)+b^3\right] & &= \frac{b^4-a^4}{4} = I(p_3) \end{aligned}$$

## 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.

**Skalarprodukte (Wdh.)**

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

$$\begin{aligned}\langle \alpha x + \beta y, z \rangle &= \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle && \text{(Linear in der ersten Komponente)} \\ \langle x, \alpha y + \beta z \rangle &= \alpha \langle x, y \rangle + \beta \langle x, z \rangle && \text{(Linear in der zweiten Komponente)} \\ \langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle && \text{(Symmetrisch)} \\ \langle x, x \rangle &\geq 0 \\ \langle x, x \rangle = 0 &\Leftrightarrow x = 0 && \text{(Positiv-Definit)}\end{aligned}$$

## Skalarprodukte

Betrachten wir Funktionen aus  $C^0([a, b])$ , d.h. stetige Funktionen  $f, g: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , 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  $P_0, P_1, \dots$  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

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \langle P_n, P_j \rangle = \langle P_{n-1}, (x + A)P_j \rangle + B \langle P_{n-2}, P_j \rangle + \sum_{i=0}^{n-3} C_i \langle P_i, P_j \rangle \\ &= C_j \langle P_j, P_j \rangle \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} 0 &= \langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle + A \langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle && \Leftrightarrow && A = -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle}{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle} \\ 0 &= \langle xP_{n-1}, P_{n-2} \rangle + B \langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle && \Leftrightarrow && B = -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-2} \rangle}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle} \end{aligned}$$

### 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:

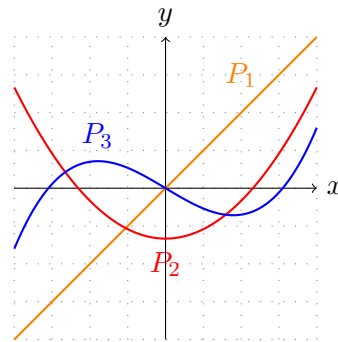
$$P_0 = 1$$

$$P_1 = x$$

$$P_2 = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$P_3 = x^3 - \frac{3}{5}x$$

## Legendre-Polynome



Wir werden sehen, dass uns die **Nullstellen** dieser Polynome die **Stützstellen** der **Gauß-Quadratur** liefern werden.

**Gauß-Quadratur**

Seien  $x_0, \dots, x_n$  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

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

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  $x_0 < \dots < x_n$ . 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.

## Gewichte der Gauß-Quadratur

Da die Gauß-Quadratur  $I_n$  für alle  $q \in \Pi_{2n+1}$  exakt ist, ist sie auch exakt für  $Q_i := \frac{P_{n+1}}{x-x_i} P_n \in \Pi_{2n}$ : ( $x_0 < \dots < x_n$  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**.

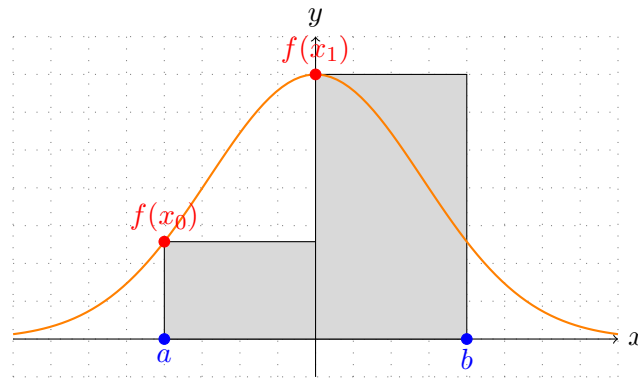
Für  $n = 1$  haben wir  $P_2 = x^2 - \frac{1}{3}$ ,  $x_{0,1} = \pm\sqrt{\frac{1}{3}}$  und die Gauß-Quadratur  $I_1$ :

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

Für  $n = 2$  haben wir  $P_3 = x^3 - \frac{3}{5}x$ ,  $x_{0,2} = \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$ ,  $x_1 = 0$  und

$$I_2(f) = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

## Naive Integration ( $I_1$ )



Für  $f(x) = \exp(-x^2)$  ergibt sich nach der naiven Quadratur  $I_1$  für  $\int_{-1}^1$

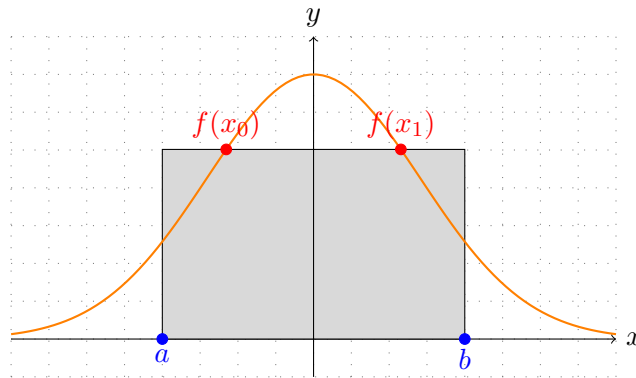
$$I(f) \approx 1.49365$$

$$I_1(f) \approx 1.36788$$

$$\varepsilon_{\text{rel}} \approx 8.42\%$$



## Gauß-Quadratur ( $I_1$ )



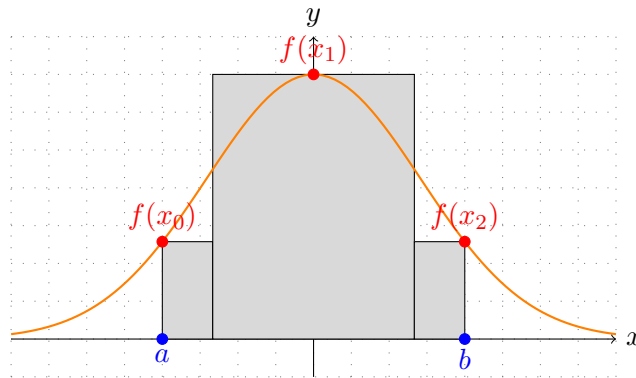
Für  $f(x) = \exp(-x^2)$  ergibt sich nach der Gauß-Quadratur  $I_1$  für  $\int_{-1}^1$

$$I(f) \approx 1.49365$$

$$I_1(f) \approx 1.43306$$

$$\varepsilon_{\text{rel}} \approx 4.06\%$$

## Simpsonregel ( $I_2$ )



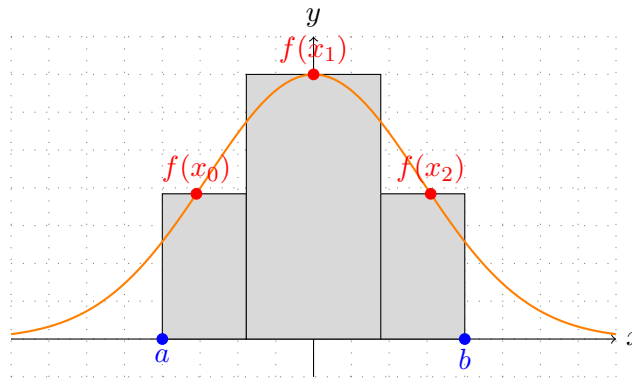
Für  $f(x) = \exp(-x^2)$  ergibt sich nach der Simpsonregel  $I_2$  für  $\int_{-1}^1$

$$I(f) \approx 1.49365$$

$$I_2(f) \approx 1.57859$$

$$\varepsilon_{\text{rel}} \approx 5.69\%$$

## Gauß-Quadratur ( $I_2$ )



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

$$I(f) \approx 1.49365$$

$$I_2(f) \approx 1.49868$$

$$\varepsilon_{\text{rel}} \approx 0.34\%$$

## 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 Legendre-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

$$a = -1$$

$$b = 1$$

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

Auch hierfür läßt sich eine Orthogonalbasis berechnen.

### 3-Term-Rekursion

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

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = x$$

$$P_n = (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2}$$

für

$$A = - \frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}$$

$$B = - \frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{\langle P_{n-2}, P_{n-2} \rangle_\varphi}$$

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

$$P_n = \frac{1}{2^n} \cos((n+1) \cdot \cos^{-1}(x))$$

$$x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right)$$

$$w_i = \frac{\langle P_{n-1}, P_{n-1} \rangle_\varphi}{P'_n(x_i)P_{n-1}(x_i)} = \frac{\pi}{n+1}$$

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 ( $h = \frac{b-a}{k}$ ):

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x) \, dx = \int_a^{a+h} f(x) \, dx + \dots + \int_{a+(k-1)h}^b f(x) \, dx \\ &= h \cdot \sum_{i=1}^k \frac{f(a + (i-1) \cdot h) + f(a + i \cdot h)}{2} =: T_f(h) \end{aligned}$$

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)

$$T_f(h) = I(f) + \tau_1 h^2 + \dots + \tau_{m-1} h^{2m-2} + \rho_m(h) h^{2m}$$



## 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

$$\begin{aligned}T_f(h) &= I(f) + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \dots + \tau_{m-1} h^{2m-2} + \rho_m(h) h^{2m} \\T_f\left(\frac{h}{2}\right) &= I(f) + \frac{h^2}{4} \tau_1 + \frac{h^4}{16} \tau_2 + \dots + \frac{h^{2m-2}}{2^{2m-2}} \tau_{m-1} + \frac{h^{2m}}{2^m} \rho_m(h)\end{aligned}$$

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

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

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**.

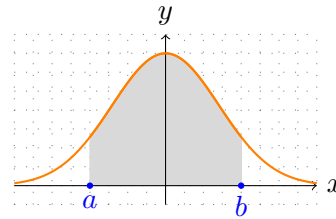
Sie liefert  $R(k, k)$  zurück nachdem  $R(i, j)$  wie folgt berechnet wird

$$R(0, j) = T_f \left( \frac{b-a}{j+1} \right)$$
$$R(i, j) = \frac{4^j R(i, j-1) - R(i-1, j-1)}{4^j - 1}$$

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.

## Romberg-Integration (Beispiel)



Um  $R(k, k)$  ausgeben zu können, werden insgesamt  $2^k + 1$  Stützstellen ausgewertet. Wir werden daher  $R(k, k)$  mit den Quadraturen  $I_{2^k+1}$  vergleichen.

$\varepsilon_{\text{rel}}$ in %	$k = 0$	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$
Trapezregel	50.741	8.4202	2.0693	0.5142	0.1283
Romberg	50.741	5.6866	0.3282	$< 7 \cdot 10^{-3}$	$< 5 \cdot 10^{-5}$
Gauß-Tschebyscheff	9.7932	3.2277	0.7694	0.2457	0.0697
Gauß	<b>4.0562</b>	<b>0.3368</b>	$< 2 \cdot 10^{-3}$	$< 2 \cdot 10^{-9}$	$< 5 \cdot 10^{-10}$