Numerisches Programmieren (IN0019)

Frank R. Schmidt

Winter Semester 2016/2017

6. Quadratur 2

Quadratur **3**

Motivation 4
Integration (Beispiel) 5
Allgemeine Form 6

Klassische Quadratur **7**

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

Skalarprodukte **16**

Skalarprodukte (Wdh.) 17
Skalarprodukte 18

Legendre-Polynome . . . 19
Rekursion . . . 20
3-Term-Rekursion . . . 21
Legendre-Polynome . . . 22

Gauß-Quadratur **23**
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

Romberg-Integration **36**
Zusammengesetzte Quadratur . . . 37
Extrapolation . . . 38
Romberg-Integration . . . 39
Romberg-Integration (Beispiel) . . . 40

Quadratur

Motivation

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

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

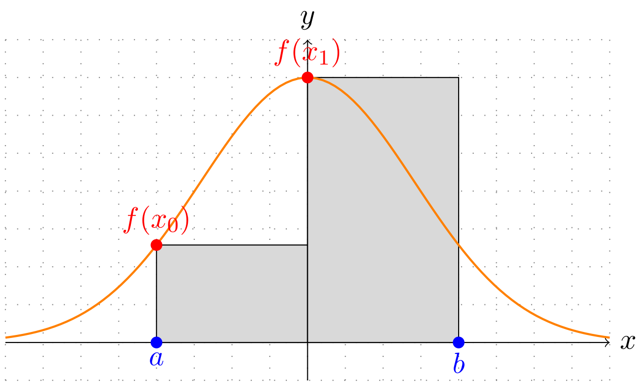
$$I(f) := \int_a^b f(x)\,\mathrm{dx}$$

möglichst gut approximieren.

Eine erste naive Vorgehensweise ergibt sich aus folgender Gleichung

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

Integration (Beispiel)



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

$$I(f) \approx 1.49365 \qquad \frac{f(x_0) + f(x_1)}{1} \approx 1.36788 \qquad \varepsilon_{\text{rel}} \approx 8.42\%$$

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 $f\colon [a;b] \to \mathbb{R}$ berechenbar. Außerdem sind diese Ausdrücke **lineare Funktionale**, d.h. für $f, g \in C^0(\mathbb{R})$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ gilt

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

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:

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

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

$$w_0 = b - a \qquad x_0 = \frac{a+b}{2}.$$

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:

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

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

$$w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2} \qquad x_1 = a \qquad x_2 = b.$$

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

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

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

$$L_0(x) = 1 \qquad w_0 = \int_a^b L_0(x)\,\mathrm{dx} = b - a,$$

was gerade zur Mittelpunktsregel führt.

Für $n = 0$ und $x_0 = a$ und $x_1 = b$ erhalten wir

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

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

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

$$L_0(c+x) = -\frac{x^2 + hx}{2h^2} \qquad w_0 = \int_{-h}^{h} L_0(c+x)\,\mathrm{dx} = \frac{h}{3}$$

$$L_1(c+x) = -\frac{x^2 - h^2}{h^2} \qquad w_1 = \int_{-h}^{h} L_1(c+x)\,\mathrm{dx} = \frac{4h}{3}$$

$$L_2(c+x) = -\frac{x^2 - hx}{2h^2} \qquad w_2 = \int_{-h}^{h} L_2(c+x)\,\mathrm{dx} = \frac{h}{3}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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 $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{V} \times \mathbb{V} \to \mathbb{R}$ ein Skalarprodukt, wenn Folgendes gilt

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

Skalarprodukte

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

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

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:

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

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

$$\begin{aligned} P_n &= x^n + \sum_{i=0}^{n-1} a_{n,i} \cdot x^i \\ \langle P_n, q \rangle &= 0 \qquad\qquad \forall q \in \Pi_{n-1} \end{aligned}$$

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 Π_{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

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

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

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

3-Term-Rekursion

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

$$P_0 = 1 \qquad P_1 = x - \frac{a+b}{2}$$

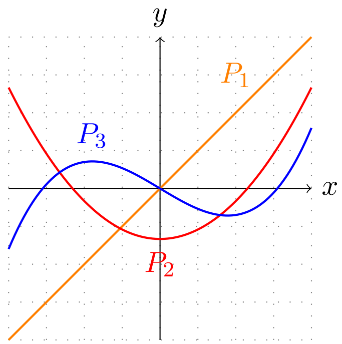
$$P_n = (x+A)P_{n-1} + BP_{n-2} \qquad A = -\frac{\langle xP_{n-1}, P_{n-1}\rangle}{\langle P_{n-1}, P_{n-1}\rangle}$$

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

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

$$P_0 = 1 \qquad P_1 = x \qquad P_2 = x^2 - \frac{1}{3} \qquad P_3 = x^3 - \frac{3}{5}x$$

Legendre-Polynome



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

Gauß-Quadratur

Seien $x_0, \ldots, x_n$ 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

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

Damit erhalten wir

$$I(p) = \langle q, P_{n+1} \rangle + I(r) = I(r)$$
$$I_n(p) = \sum_{i=0}^{n} P_{n+1}(x_i) q(x_i) w_i + I_n(r) = I_n(r) = I(r)$$

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

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{dx} > 0$$

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

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 $Q_i := \frac{P_{n+1}}{x-x_i} P_n \in \Pi_{2n}$: ($x_0 < \ldots < x_n$ 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**.

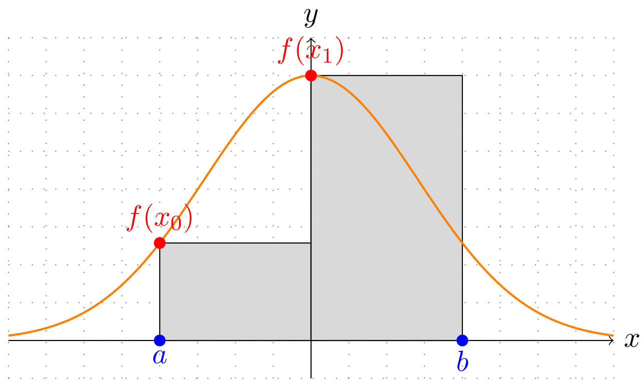
Für $n = 1$ haben wir $P_2 = x^2 - \frac{1}{3}$, $x_{0,1} = \pm\sqrt{\frac{1}{3}}$ und die Gauß-Quadratur I_1:

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

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

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

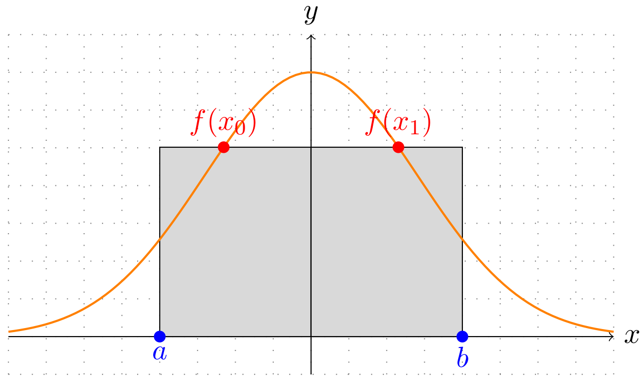
Naive Integration (I_1)



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

$I(f) \approx 1.49365$ $\quad$ $I_1(f) \approx 1.36788$ $\quad$ $\varepsilon_{\text{rel}} \approx 8.42\%$

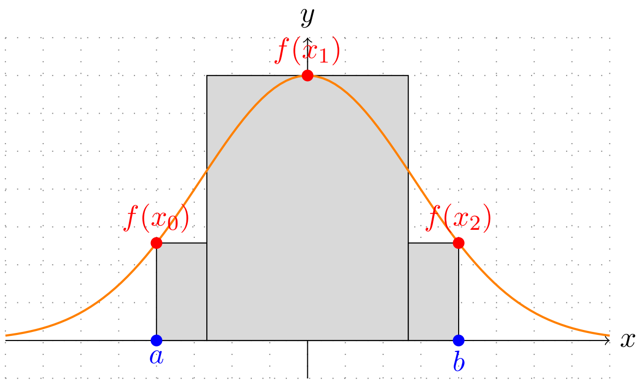
Gauß-Quadratur (I_1)



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

$I(f) \approx 1.49365$ $I_1(f) \approx 1.43306$ $\varepsilon_{\text{rel}} \approx 4.06\%$

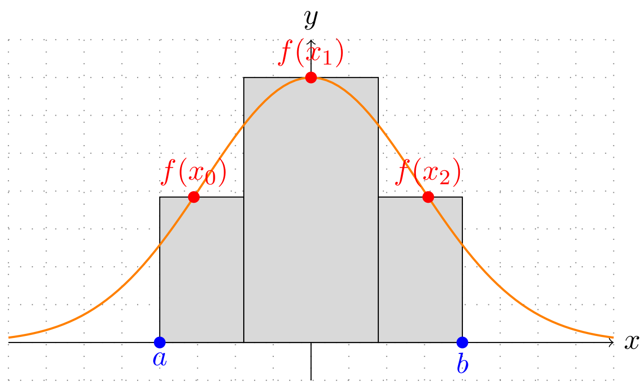
Simpsonregel (I_2)



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

$I(f) \approx 1.49365$ $\quad$ $I_2(f) \approx 1.57859$ $\quad$ $\varepsilon_{\text{rel}} \approx 5.69\%$

Gauß-Quadratur (I_2)



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

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

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 Legendre-Polynome bzgl. eines anderen **Skalarprodukts** berechnen.

Gewichtete Skalarprodukte

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

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

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

Von besonderem Interesse ist der folgende Fall

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

Auch hierfür lässt sich eine Orthogonalbasis berechnen.

3-Term-Rekursion

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

$$P_0 = 1 \qquad P_1 = x \qquad P_n = (x + A)P_{n-1} + BP_{n-2}$$

für

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

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

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

Die **Gauß-Tschebyscheff-Quadratur** zur Berechnung von $\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{dx}$ 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 ($h = \frac{b-a}{k}$):

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

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 (τ_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

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

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

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

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**.

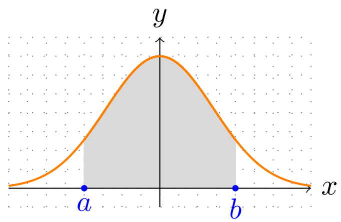
Sie liefert $R(k,k)$ zurück nachdem $R(i,j)$ wie folgt berechnet wird

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

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 der Gauß-Tschebyscheff-Quadratur I_{2^k+1} vergleichen.

ε_{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	**3.2277**	**1.0642**	0.5402	0.1997	0.0622