§ 8.1 Newton-Coates Formeln

Seien $x_i \in [c,d]$, $i=0,\dots,m$, $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$ gegeben und $P(f|x_0,\dots,x_m)$ das Interpolationspolynom (s Kap. 7).

Approximiere

$$\int_c^d f(x)\,dx \approx I_m(f) := \int_c^d P(f\,|\,x_0, \dots, x_m)(x)\,dx \qquad (8.8)$$

Bemerkung 8.9

$m = 1$, $x_0 = c$, $x_1 = d$ in (8.8) liefert die Trapezregel.

Satz 8.10

Für jedes Polynom $Q \in \Pi_m$ gilt

$$I_m(Q) = \int_c^d Q(x)\,dx\,, \quad \text{d.h.}$$

die „Quadraturformel" (8.8) ist „exakt vom Grade m".

Beweis: über Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms.

Aus der Darstellung des Lagrange-Interpolationspolynoms (in Satz 7.2) folgt ...

Lemma 8.11

$$I_m(f) = h \cdot \sum_{j=0}^{m} c_j f(x_j) \text{ mit } h := d-c$$

$$c_j = \frac{1}{h} \int_c^d \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{m} \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \, dx = \frac{1}{h} \int_c^d l_{jm}(x) \, dx$$

Für äquidistante Stützstellen

$$x_0 = c + \frac{1}{2} h =: c + \xi_0 h \qquad m = 0$$

$$x_j = c + \frac{j}{m} h =: c + \xi_j h \qquad j = 0, \ldots, m \quad m > 0$$

folgen die Newton-Coates Formeln aus Lemma 8.11:

$$I_m(f) = h \cdot \sum_{j=0}^{m} c_j f(c + \xi_j h)$$

m	Verfahren	ξ_j	c_j	Fehler $\left\lvert I_m(f) - \int_c^d f(x)\,dx \right\rvert$
0	Mittelpunktsregel	$1/2$	1	$O(h^3)$
1	Trapezregel	$0, 1$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$O(h^3)$
2	Simpsonregel	$0, 1/2, 1$	$\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6}$	$O(h^5)$
3	3/8-Regel	$0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$	....	$O(h^5)$
4	Milne-Regel	$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1$	...	$O(h^7)$

Tab. 7.13

Analog zu (8.4): Summierte Newton-Coates-Formeln

z. B. für Simpson-Regel

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx S(h) := \frac{h}{6}\Big[f(t_0) + 4\cdot f\left(\frac{t_0+t_1}{2}\right) + 2f(t_1) + 4f\left(\frac{t_1+t_2}{2}\right) + \dots + f(t_n)\Big], \quad t_0 = a, \; t_n = b$$

§8.2 Gauss-Quadratur

Ziel: Formel

$$\sum_{i=0}^{m} \hat{w}_i f(x_i) = \int_c^d P(f|x_0,\dots,x_m)(x)\,dx \tag{8.14}$$

mit 1. positive $\hat{w}_i$ („Gewichte")

2. hoher Exaktheitsgrad $n \geq m$ (für Polynome vom Grad $n \geq m$)

1. ist Alternative zu Newton-Cotes, da deren Gewichte c_j wechselndes Vorzeichen haben, wenn Ordnung $m \geq 8$ ($\to$ Auslöschung!)

Bemerkung 8.15

Höchster Exaktheitsgrad für (8.14),

d.h. $$\int_c^d Q(x)\,dx = \sum_{i=0}^{m} \hat{w}_i\, Q(x_i)$$ für alle $Q \in \Pi_n$

ist $n = 2m+1$.

Bew.: Widerspruchsbeweis

Es gilt für $Q(x) := \prod_{i=0}^{m} (x - x_i)^2 \in \Pi_{2m+2}$:

$$0 < \int_c^d Q(x)\,dx \underset{(8.14)}{=} \sum_{i=0}^{m} \hat{w}_i\, Q(x_i) = 0 \quad \text{↯}$$

Widerspruch!

Durch geeignete Wahl von $\hat{w}_i$ und x_i ist der Exaktheitsgrad $2m+1$ tatsächlich erreichbar.

Satz 8.16

Für $m \geq 0$ gibt es Stützstellen $x_0, \dots, x_m \in (c,d)$, so dass gilt

$$h \cdot \sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i) := \int_c^d P(f|x_0, \dots, x_m)(x)\,dx$$

$$= \int_c^d f(x)\,dx + E_f(h)$$

mit $h := d-c$ und $E_Q = 0$ für $Q \in \Pi_{2m+1}$

und es gilt

$$0 < w_i = \frac{1}{h} \int_c^d l_{im}(x)\, dx =$$

$$\frac{1}{h} \int_c^d \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{m} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}\, dx.$$ Es gibt

$\xi \in [c, d]$ so dass

$$|E_f(h)| = O(h^{2m+3}) \cdot |f^{(2m+2)}(\xi)|$$

Bemerkung 8.17

Satz 8.16 ist eine reine Existenzaussage, die Berechnung der Stützstellen $x_0, \dots, x_m$ ist über die Nullstellen sog. Orthogonal-polynome möglich. Diese findet man in Tabellen.

Dazu folgende Erläuterung:

betrachte $\displaystyle\int_c^d f(x)\, w(x)\, dx$

mit „Gewichtsfunktion" $w(x) > 0$ für $x \in (c,d)$

Dann definiert (s. Kap. 2)

$$\langle f, g \rangle_w := \int_c^d f(x) g(x) w(x)\, dx \qquad (8.18)$$

ein Skalarprodukt auf $C[c,d] :=$

$\{ f : [c,d] \to \mathbb{R} \mid f \text{ stetig} \}$

Orthogonalpolynome bilden eine bzgl. $\langle\, , \rangle_w$ orthogonale Basis des Polynomraums Π_n.

Erläuterungen zu Satz 8.16

Setze $w(x) \equiv 1$ (in (8.18)) im Intervall $[c, d]$

Sei $P_{m+1}(x)$ das $(m+1)$-te Orthogonal-polynom, d.h.

$$\langle P_{m+1}, Q \rangle_w = \int_c^d P_{m+1}(x)\, Q(x) \cdot 1 \cdot dx$$

$$= 0 \quad \text{für alle } Q \in \Pi_m \qquad (8.19)$$

Normiere P_{m+1} so dass der Koeffizient vor der höchsten Potenz $(m+1)$ gleich 1 ist.

$$P_{m+1}(x) = (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_m)$$

in der Linearfaktorzerlegung mit

paarweise verschiedenen Nullstellen x_j, $j=0,\dots,m$ (Verschiedenheit der Nullstellen ist über „Orthogonalität" beweisbar).

Sei $Q \in \Pi_{2m+1}$. Führe Polynomdivision durch (euklid. Algorithmus):

$$Q = P_{m+1} \cdot Q_1 + Q_2 \quad \text{mit } Q_1, Q_2 \in \Pi_m$$

Es gilt für die Interpolationspolynome

$$P(P_{m+1} \cdot Q_1 \mid x_0, \dots, x_m) = 0$$

(da $x_0, \dots, x_m$ Nullstellen von P_{m+1})

$$P(Q_2 \mid x_0, \dots, x_m) = Q_2 \quad (\text{da } Q \in \Pi_m)$$

(wg. Eindeutigkeit des Interpolations-polynoms, s. Satz 7.2)

Es folgt:

$$\int_c^d Q(x)\,dx = \underbrace{\int_c^d P_{m+1} \cdot Q_1(x)\,dx}_{=0 \text{ wg. } (8.19)} + \int_c^d Q_2(x)\,dx$$

$$\underset{\text{wg. Satz 8.10}}{=} \int_c^d P(Q_2 \mid x_0, \dots, x_m)(x)\,dx$$

$$= \underbrace{\int_c^d P(P_{m+1} Q_1 | x_0, \ldots, x_m)(x)\, dx}_{=0}$$

$$+ \int_c^d P(Q_2 | x_0, \ldots, x_m)(x)\, dx$$

$$= \int_c^d P(Q | x_0, \ldots, x_m)(x)\, dx$$

D.h. es gilt $E_Q = 0$ in Satz 8.16 für $Q \in \Pi_{2m+1}$

Zusammenfassung:

Bemerkung 8.20

Gauss-Quadratur ist exakt vom Grad $2n+1$ für „geeignete Wahl" der Stützstellen x_i.

Vorteil der Gauss-Quadratur
- hoher Exaktheitsgrad

Nachteil der Gauss-Quadratur
- Erhöhung des Genauigkeitsgrads erfordert komplette Neuberechnung (Nullstellen des nächst höheren Orthogonal-polynoms sind verschieden)

Beispiele für Orthogonalpolynome

Tab. 8.21

Gew.fkt. $w(t)$	$[c, d]$	Name (...-polynome)
1	$[-1, 1]$	Legendre $P_n := \frac{d^n}{dx^n}(1-x^2)^n$
$(1-x^2)^{-1/2}$	$[-1, 1]$	Tschebyscheff $T_n := \cos(n \cdot \arccos x)$ (s. Bem. 7.14)
e^{-x}	$[0, \infty)$	Laguerre $L_n := e^x \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n)$
e^{-x^2}	$(-\infty, \infty)$	Hermite $H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2})$

Andere Intervalle $[c, d]$ über Variablen-transformation zugänglich.

Beispiel 8.22

Berechne $\int_{-1}^{1} e^x \, dx = 2.350402$ bei 7-stelliger Rechnung. $f(x) = e^x$

1. Newton-Coates mit $m = 2$ (Simpson-regel)

$$I_m(f) = I_2(f) = 2.362054$$

2. Gauss-Quadratur liefert für $m = 2$ und gleicher Zahl von Funktions-auswertungen von f

mit den Nullstellen x_0, x_1, x_2 der Legendre-Polynome aus Tab. 8.21 und Gewichtsfunktion $w(x) \equiv 1$, also $w_i = 1$, $i = 0, 1, 2$ ergibt sich der Wert 2.350337 als Approximation für $\int_{-1}^{1} e^x \, dx$