Satz 27. *Sei* $(b_i, c_i)_{i=1,\dots,s}$ *eine Quadraturformel der Ordnung* $p \geq s$. *Die Ordnung ist genau dann* $s+m$, *falls*

$$\int_0^1 M(x)g(x)dx = 0 \tag{4.3}$$

für alle Polynome g *vom Grad* $\leq m-1$ *gilt.*

Bemerkung 20.

(i) *Wir definieren das Skalarprodukt*

$$< f, g > = \int_0^1 f(x)g(x)dx. \tag{4.4}$$

Bedingung (4.3) *besagt daher, dass* $M(x)$ *orthogonal zum Raum aller Polynome vom Grad* $\leq m-1$ *bezüglich des in* (4.4) *definierten Skalarprodukts steht.*

(ii) *Gleichung* (4.3) *stellt nur Bedingungen an die Knoten, was nach Satz 26 keine Überraschung darstellt.*

Satz 28. *Die maximale Ordnung einer Quadraturformel ist* $2s$.

Beweis: Die Gauß-Quadraturformeln besitzen die Ordnung $2s$ (siehe Satz 29). Eine höhere Ordnung ist nicht möglich, da

$$< M, M > = \int_0^1 M(x)^2 dx > 0,$$

d.h. (4.3) ist für $g = M$ nicht erfüllt. Beachte: $\deg(M) = s$.

□

Satz 29. *(Gauß 1814) Es existiert eine eindeutige Quadraturformel der Ordnung 2s. Sie ist gegeben durch*

$$c_i = \frac{1}{2}(1 + \gamma_i)$$

für $i = 1, \dots, s$, *wobei* $\gamma_1, \dots, \gamma_s$ *die Nullstellen des Legendre-Polynoms vom Grad* s *sind. Die Gewichte* b_i *sind gemäß Satz 26 eindeutig bestimmt.*

Beweis: Nach Satz 27 gilt:

$$\begin{aligned}
\text{Ordnung } p = 2s &\iff \int_0^1 M(x)g(x)dx = 0 \quad \forall_{g,\deg(g)\leq s-1} \\
&\iff \int_{-1}^1 M\Big(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}\Big) f(x)dx = 0 \quad \forall_{f,\deg(f)\leq s-1} \\
&\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Theorie orthogonaler} \\ \text{Polynome}}}{\iff} M\Big(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}\Big) = \underbrace{K \cdot (\text{Legendre-Polynom vom Grad } s)}_{=\prod_{i=0}^s \frac{1}{2}(x-\gamma_i)} \\
&\iff c_i - \frac{1}{2} = \frac{\gamma_i}{2}.
\end{aligned}$$

□

Nachtrag:

(i) Die Gewichte der Gaußschen Quadraturformel sind positiv. Denn: Wir wissen nach Satz 26 gilt $b_i = \int_0^1 L_i(x)dx$ mit

$$L_i(c_j) = \begin{cases} 0, & \text{falls} \quad i \neq j \\ 1, & \text{falls} \quad i = j \end{cases}$$

und $\deg L_i = s-1$. Da die Ordnung der Gauß-Quadraturformel $p = 2s$ ist und $\deg L_i^2 = 2s-2 \leq 2s-1$, folgt

$$0 < \int_0^1 L_i(x)^2 dx = \sum_{j=1}^{s} b_j L_i(c_j)^2 = b_i.$$

(ii) Da die Nullstellen der Legendre-Polynome symmetrisch zum Punkt 0 im Intervall $[-1, 1]$ liegen, gilt dies auch für die Knoten bezogen auf das Intervall $[0, 1]$ und den Punkt $\frac{1}{2}$. Zudem gilt $b_i = b_{s+1-i}$. Denn:

$$\begin{aligned} L_{s+1-i}(x) &= \prod_{j=1, j\neq i}^{s} \frac{x - c_{s+1-j}}{c_{s+1-i} - c_{s+1-j}} \\ &\underset{c_i = 1 - c_{s+1-i}}{=} \prod_{j=1, j\neq i}^{s} \frac{1 - x - c_j}{c_i - c_j} = L_i(1-x) \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} b_{s+1-i} = \int_0^1 L_{s+1-i}(x)dx &= \int_0^1 L_i(1-x)dx \\ &= -\int_1^0 L_i(y)dy = b_i. \end{aligned}$$

Also sind die Gaußschen Quadraturformeln symmetrisch.

Beispiel 21. *Bezeichne P_i das Legendre-Polynom vom Grad i.*

s=1: *Es gilt $P_1(x) = x$ und somit $\gamma_1 = 0$. Wir erhalten also gemäß Satz 29 $c_1 = \frac{1}{2}$ und $b_1 = 1$. Dies ist genau die oben bereits eingeführte Mittelpunktregel mit Ordnung $p = 2$.*

s=2: *Es gilt $P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$ und somit $\gamma_{1,2} = \pm\frac{\sqrt{3}}{3}$. Wir erhalten wieder mit Satz 29 die Parameter*

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ c_2 &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \\ b_1 = b_2 &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

und somit die Quadraturformel

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{2}f\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\Big) + \frac{1}{2}f\Big(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\Big)$$

der Ordnung 4.

s=3: *Es gilt* $P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$ *und somit* $\gamma_2 = 0, \gamma_{1,3} = \pm\frac{\sqrt{15}}{5}$. *Für die Knoten finden wir gemäß Satz 29*

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} \\ c_2 &= 0 \\ c_3 &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}. \end{aligned}$$

Wegen der Symmetrie gilt $b_1 = b_3$. *Weiter gilt aufgrund Bedingung* (4.2) *für* $q = 1$

$$2b_1 + b_2 = 1$$

und gemäß Satz 26 auch

$$\begin{aligned} b_2 = \int_0^1 l_2(x)dx &= \int_0^1 \frac{(x - \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10})(x - \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10})}{-\frac{\sqrt{15}}{10}\frac{\sqrt{15}}{10}} dx \\ &= -\int_0^1 \frac{100}{15}\big((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{15}{100}\big)dx \\ &= -\frac{100}{15}\underbrace{\int_0^1 (x - \frac{1}{2})^2 dx}_{=\frac{1}{12}} + 1 = \frac{8}{18}. \end{aligned}$$

Für die Gewichte erhalten wir also insgesamt:

$$\begin{aligned} b_1 = b_3 &= \frac{5}{18} \\ b_2 &= \frac{4}{9}. \end{aligned}$$

Die Gaußsche Quadraturformel der Ordnung 6 lautet also

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{5}{18}f\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}\Big) + \frac{4}{9}f\Big(\frac{1}{2}\Big) + \frac{5}{18}f\Big(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}\Big).$$

4.1.2 Untersuchung des Quadraturfehlers

Der Fehler des näherungsweise berechneten Integrals ist

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx - (b-a)\sum_{i=1}^s b_i f(a + c_i(b-a)) &= (b-a)\int_0^1 f(a + t(b-a))dt - (b-a)\sum_{i=1}^s b_i f(a + c_i(b-a)) \\ &= (b-a)\Big[\int_0^1 g(\tau)d\tau - \sum_{i=1}^s b_i g(c_i)\Big] \qquad (4.5) \end{aligned}$$

mit $g(x) := f(a + x(b-a))$. Um den Fehler zu untersuchen, betrachten wir das lineare Funktional

$$R(g) = \int_0^1 g(\tau)d\tau - \sum_{i=1}^s b_i g(c_i), \qquad (4.6)$$

welches jeder Funktion $g : [0,1] \to \mathbb{R}$ den Quadraturfehler auf dem normierten Intervall $[0,1]$ zu ordnet. Das Funktional ist linear in g, da

$$R(\lambda g + \mu f) = \lambda R(g) + \mu R(f).$$

Allgemein kann R auf Vektorräumen von Funktionen operieren, für die das Integral $\int_0^1 g(\tau)d\tau$ definiert ist. Aber wie lässt sich $R(g)$ alternativ zu (4.6) bestimmen? Um diese Frage beantworten zu können beschränken wir uns auf p-mal stetig differenzierbare Funktionen, wobei p die Ordnung der Quadraturformel ist. Die folgende Integraldarstellung von $R(g)$ für $g \in C^p([0,1])$ geht auf Peano zurück.

Satz 30. *(Peano, 1913-1918) Die Quadraturformel habe die Ordnung p und $g : [0,1] \to \mathbb{R}$ sei p-mal stetig differenzierbar. Dann gilt*

$$R(g) = \int_0^1 K_p(t) g^{(p)}(t) dt,$$

wobei der so genannte Peano-Kern definiert ist durch

$$K_p(t) = \frac{1}{(p-1)!} R(x \mapsto (x-t)_+^{p-1}).$$

Klärung der Schreibweise:

a) Die Funktion $._+ : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{\geq 0}$ ist definiert durch

$$x_+ = \begin{cases} x, & \text{falls } x > 0, \\ 0, & \text{falls } x \leq 0 \end{cases}$$

und $(. - t)_+^n : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{\geq 0}$ ist definiert durch

$$(x-t)_+^n = \begin{cases} (x-t)^n, & \text{falls } x > t, \\ 0, & \text{falls } x \leq t. \end{cases}$$

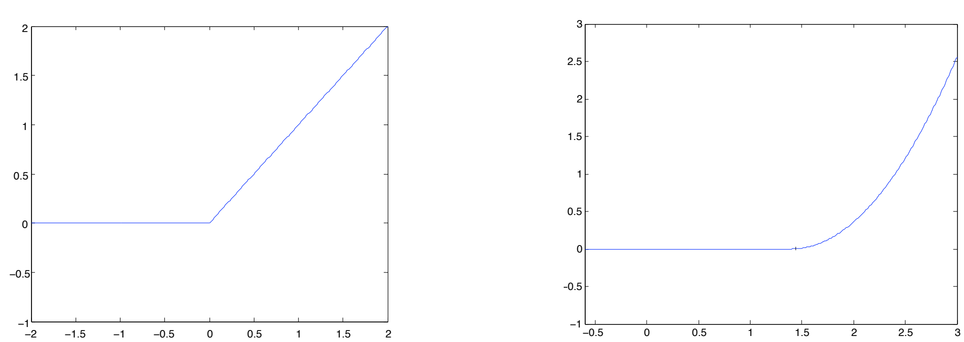


Abbildung 4.1: Graph der Funktionen $._+ : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{\geq 0}$ (links) und $(. - 1.4)_+^2 : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{\geq 0}$ (rechts).

b) Die Schreibweise $R(x \mapsto (x-t)_+^{p-1})$ bedeutet, dass wir das lineare Funktional R auf die von x abhängige Funktion $h(x) = (x-t)_+^{p-1}$ anwenden.

Insgesamt gilt also

$$\begin{aligned} K_p(t) &= \frac{1}{(p-1)!}\Big(\int_t^1 (\tau - t)^{p-1} d\tau - \sum_{i=1}^s b_i (c_i - t)_+^{p-1}\Big) \\ &= \frac{(1-t)^p}{p!} - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - t)_+^{p-1}}{(p-1)!}. \end{aligned}$$

Beweis: (von Satz 30) Taylorentwicklung von $g(x)$ in $x = 0$ mit Restglied in Integralform liefert

$$g(x) = \underbrace{g(0) + g'(0)x + \ldots + g^{p-1}(0)\frac{x^{p-1}}{(p-1)!}}_{=:q(x)} + \underbrace{\frac{1}{(p-1)!}\int_0^x g^p(t)(x-t)^{p-1} dt}_{=:r_{p-1}(x)}.$$

Mit der oben eingeführten Schreibweise lässt sich das Restglied auch schreiben als

$$r_{p-1}(x) = \frac{1}{(p-1)!}\int_0^1 g^{(p)}(t)(x-t)_+^{p-1} dt.$$

Da die Quadraturformel die Ordnung p besitzt gilt $R(q) = 0$ und somit wegen der Linearität von R auch

$$\begin{aligned} R(g) &= R(r_{p-1}) \\ &= \frac{1}{(p-1)!} R(x \mapsto \int_0^1 g^p(t)(x-t)_+^{p-1} dt) \\ &\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Sätze der Analysis} \\ \text{über die Vertausch-} \\ \text{barkeit von Grenz-} \\ \text{werten}}}{=} \frac{1}{(p-1)!}\int_0^1 g^{(p)}(t) R(x \mapsto (x-t)_+^{p-1}) dt. \end{aligned}$$

□

Bemerkung 21. *Satz 30 gilt natürlich auch, wenn die Ordnung der Quadraturformel tatsächlich größer als p ist.*

Beispiel 22.

(i) Mittelpunktregel (Ordnung 2, $c_1 = \frac{1}{2}$, $b_1 = 1$)

$$K_1(t) = 1 - t - (\frac{1}{2} - t)_+^0 = \begin{cases} -t, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ 1-t, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

$$K_2(t) = \frac{(1-t)^2}{2} - (\frac{1}{2} - t)_+ = \begin{cases} \frac{t^2}{2}, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ \frac{(1-t)^2}{2}, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

(ii) Trapezregel (Ordnung 2, $c_1 = 0, c_2 = 1$, $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$)

$$\begin{aligned} K_1(t) &= \frac{1}{2} - t \\ K_2(t) &= -(1-t)\frac{t}{2} \end{aligned}$$

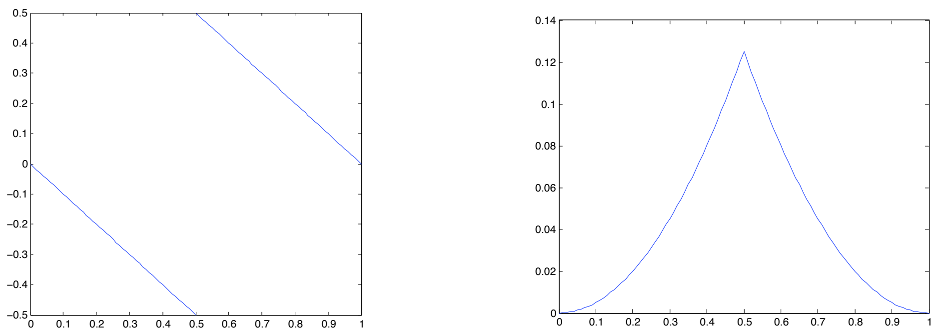


Abbildung 4.2: Graph von K_1 (links) und K_2 (rechts) der Mittelpunktregel.

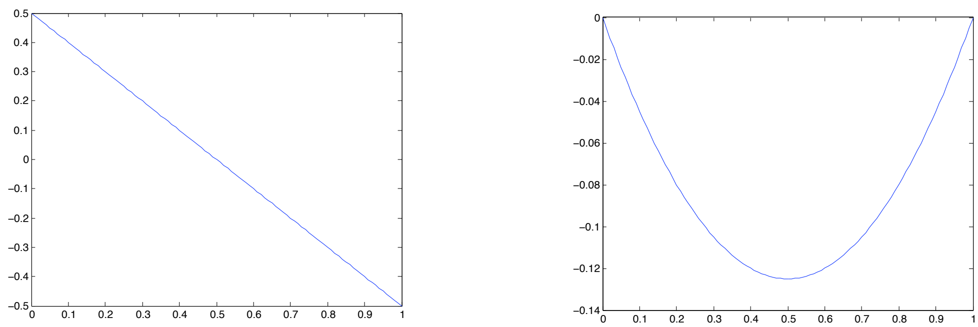


Abbildung 4.3: Graph von K_1 (links) und K_2 (rechts) der Trapezregel.

(iii) Simpson-Regel (Ordnung 4, $c_1 = 0, c_2 = \frac{1}{2}, c_3 = 1,\ b_1 = b_3 = \frac{1}{6}, b_2 = \frac{2}{3}$*)*

$$K_1(t) = 1 - t - \frac{2}{3}(\frac{1}{2} - t)_+^0 - \frac{1}{6} \ = \begin{cases} \frac{1}{6} - t, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ \frac{5}{6} - t, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

$$K_2(t) = \frac{(1-t)^2}{2} - \frac{2}{3}(\frac{1}{2} - t)_+ - \frac{1}{6}(1-t) \ = \begin{cases} \frac{t^2}{2} - \frac{t}{6}, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ \frac{t^2}{2} - \frac{5}{6}t + \frac{1}{3}, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

$$K_3(t) = \frac{(1-t)^3}{6} - \frac{2}{6}(\frac{1}{2} - t)_+^2 - \frac{1}{12}(1-t)^2 \ = \begin{cases} \frac{t^3}{6} + \frac{t^2}{12}, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ -\frac{t^3}{6} + \frac{5}{12}t^2 - \frac{t}{3} + \frac{1}{12}, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

$$K_4(t) = \begin{cases} \frac{t^4}{24} - \frac{t^3}{36}, & \text{falls } 0 \le t \le \frac{1}{2} \\ \frac{t^4}{24} - \frac{5}{36}t^3 + \frac{t^2}{6} - \frac{t}{12} + \frac{1}{72}, & \text{falls } \frac{1}{2} < t \le 1 \end{cases}$$

Besitzt der Peano-Kern $K_p(t)$ wie in den Beispiel oben ein konstantes Vorzeichen auf $[0,1]$, so findet man

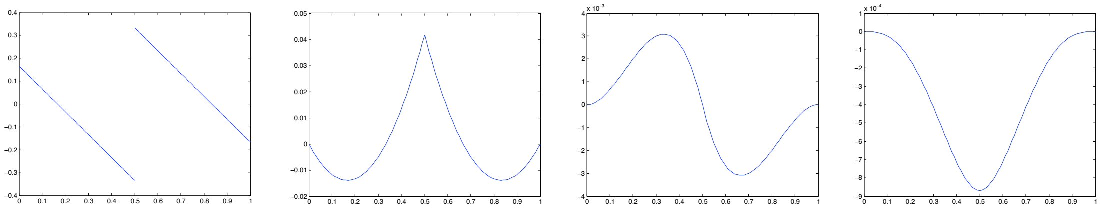


Abbildung 4.4: Graph von K_1, K_2, K_3 und K_4 der Simpson-Regel (von links nach rechts).

mit dem Mittelwertsatz der Integralrechnung die Darstellung

$$R(g) = g^{(p)}(\xi) \int_0^1 K_p(t)dt \tag{4.7}$$

für ein $\xi \in (0,1)$.

Lemma 6. *Es gilt:*

$$\int_0^1 K_p(t) = \frac{1}{p!}\Big[\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p\Big].$$

Beweis: Wir wissen

$$K_p(t) = \frac{(1-t)^p}{p!} - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - t)_+^{p-1}}{(p-1)!}.$$

Integrieren liefert somit das Resultat:

$$\begin{aligned}\int_0^1 K_p(t)dt &= \frac{1}{p!}\underbrace{\int_0^1 (1-t)^p dt}_{=\frac{1}{p+1}} - \sum_{i=1}^s \frac{b_i}{(p-1)!}\int_0^1 (c_i - t)_+^{p-1} dt \\ &= \frac{1}{(p+1)!} - \sum_{i=1}^s \frac{b_i}{(p-1)!}\underbrace{\int_0^{c_i} (c_i - t)^{p-1} dt}_{\frac{c_i^p}{p}}\end{aligned}$$

□

Beispiel 23.
(i) Mittelpunktregel:

$$\int_0^1 K_2(t)dt = \frac{1}{24}$$

(ii) Trapezregel:

$$\int_0^1 K_2(t)dt = -\frac{1}{12}$$

(iii) Simpson-Regel:

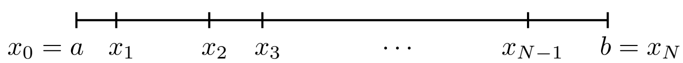
$$\int_0^1 K_4(t)dt = -\frac{1}{2880}$$

Mit (4.5) und Darstellung (4.7) finden wir insgesamt

$$\int_a^b f(x)dx - (b-a)\sum_{i=1}^s b_i f(a + c_i(b-a)) = (b-a)^{p+1} f^{(p)}(\xi) \int_0^1 K_p(t)dt$$

für ein $\xi \in (a,b)$. Beachte: $g^{(p)}(x) = (b-a)^p f^{(p)}(a + x(b-a))$. Der Fehler ist somit klein für Intervalle $[a,b]$ mit kleiner Intervalllänge $b - a << 1$.

Idee: Unterteile das Intervall $[a,b]$ in kleine Teilintervalle $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 0, \dots, N-1$, wobei für die Intervalllängen $x_{j+1} - x_j =: h_j << 1$ gilt:



Wende die Quadraturformel auf die Teilintervalle an. Wir finden dann für $(p+1)$-mal stetig differenzierbares f für den Fehler auf den Teilintervallen $[x_j, x_{j+1}]$ die Darstellung:

$$\begin{aligned}\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j) &= h_j^{p+1} \int_0^1 K_p(t) f^{(p)}(x_j + c_i h_j) dt \\ &= \underbrace{h_j^{p+1} f^{(p)}(x_j) \int_0^1 K_p(t)dt}_{\text{führender / dominierender Fehlerterm}} + \mathcal{O}(h_j^{p+2})\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}\Big| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j) \Big| &\le h_j^{p+1} \max_{x \in [x_j, x_{j+1}]} |f^{(p)}(x)| \int_0^1 |K_p(t)|dt \;+\; \mathcal{O}(h_j^{p+2}) \\ &=: h_j \cdot err_j.\end{aligned}$$

Der Fehler auf dem Gesamtintervall kann somit folgendermaßen abgeschätz werden:

$$\begin{aligned}\Big| \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^{N-1} h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j) \Big| &\le \sum_{j=0}^{N-1} \Big| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j) \Big| \\ &\le (b-a) \max_{j=0,\dots,N-1} err_j.\end{aligned}$$

Bemerkung 22.

(i) Es gilt $\max_j err_j = \mathcal{O}((\max_j h_j)^p)$.

(ii) Ziel: Wähle die Unterteilung von $[a,b]$ *so, dass alle* err_j *möglichst gleich groß sind.*