

Skript

Quadraturverfahren

Thomas Gerstner

Wintersemester 2011/12

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen	2
1.1 Integrale	2
1.2 Eigenschaften	3
1.3 Integration und Differentiation	4
1.4 Transformationen	4
1.5 Uneigentliche Integrale	6
1.6 Integrationsprobleme	7
1.7 Quadraturverfahren	8
2 Eindimensionale Quadraturformeln	10
2.1 Riemann-Summen	10
2.2 Approximationsformeln	11
2.3 Polynominterpolation	12
2.4 Gauß-Formeln	16
2.5 Zusammengesetzte Quadraturformeln	18
3 Mehrdimensionale Quadraturformeln	24
3.1 Konstruktionen	24
3.2 Produktregeln	25
3.3 Polynomiale Formeln	28
3.4 Dünne Gitter	34
4 Literatur	35

1 Grundlagen

1.1 Integrale

Wiederholung aus der Analysis:

- Riemann-Integrale \rightarrow konstruktiv
- Lebesgue-Integrale \rightarrow nicht konstruktiv

Eindimensionaler Fall

Für eine Funktion $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ wird das Integral

$$If = \int_a^b f(x) dx$$

über die Riemann-Summe

$$R_n := \sum_{i=1}^n (x_{i+1} - x_i) f(\xi_i),$$

definiert, wobei $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} = b$ eine Unterteilung von $[a, b]$ in n Teilintervalle ist und $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$ für $i = 1, 2, \dots, n$ ist. Falls alle Folgen $\{R_n\}$ mit

$$\Delta_n := \max\{x_2 - x_1, \dots, x_{n+1} - x_n\} \rightarrow 0 \text{ für } n \rightarrow \infty$$

gegen den gleichen Grenzwert R streben, dann ist f Riemann-integrierbar auf $[a, b]$ und

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

Bedingungen für Riemann-integrierbarkeit:

- f ist stetig auf $[a, b]$ oder
- f ist beschränkt auf $[a, b]$ und stetig bis auf an abzählbar vielen Punkten

Mehrdimensionaler Fall

Für eine Funktion $f: B \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ wird das Integral

$$If = \int_B f(x) dx \text{ mit } x = (x_1, \dots, x_N),$$

wobei das Gebiet $B = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_N, b_N] \subset \mathbb{R}^N$ der N -dimensionale Hyperwürfel sei, über die Riemann-Summe

$$R_n f := \sum_{C_{l_1, \dots, l_N} \in \mathcal{P}} \text{vol}(C_{l_1, \dots, l_N}) f(\xi_{l_1, \dots, l_N})$$

definiert. Hierbei sind $a_k = x_1^{(k)} < x_2^{(k)} < \dots < x_{n_k}^{(k)} < x_{n_k+1}^{(k)} = b_k$ für $k = 1, 2, \dots, N$ Unterteilungen der Intervalle $[a_k, b_k]$ in n_1, \dots, n_N in Teilintervalle, sowie

$$C_{l_1, \dots, l_N} = [x_{l_1}^{(1)}, x_{l_1+1}^{(1)}] \times \dots \times [x_{l_N}^{(N)}, x_{l_N+1}^{(N)}] \text{ mit } l_k = 1, 2, \dots, n_k \text{ für } k = 1, 2, \dots, N$$

eine Partition \mathcal{P} von B in $n = n_1 \cdot \dots \cdot n_N$ Teilwürfel und

$$\xi_{l_1, \dots, l_N} \in C_{l_1, \dots, l_N} \subset \mathbb{R}^N \text{ für } C_{l_1, \dots, l_N} \in \mathcal{P}$$

ist. Falls alle Folgen $\{R_n\}$ mit

$$\Delta_n := \max\{\text{diam}(C_{l_1, \dots, l_N}), C_{l_1, \dots, l_N} \in \mathcal{P}\} \rightarrow 0 \text{ für } n \rightarrow \infty$$

gegen den gleichen Grenzwert R streben, dann ist f Riemann-integrierbar auf B und

$$If = \int_B f(x) dx := R$$

Riemann-Integrale können auch für allgemeinere Gebiete definiert werden. Falls das Gebiet B beschränkt ist, dann gibt es einen Hyperwürfel

$$[a_1, b_1] \times \dots \times [a_N, b_N] \supseteq B$$

und das Riemann-Integral von f über B ist definiert als das Riemann-Integral der Funktion $c_B f$ mit der charakteristischen Funktion

$$c_B(x) = \begin{cases} 1 & x \in B \\ 0 & x \notin B \end{cases}.$$

Das Integral der konstanten Funktion

$$\int_B 1 dx = \text{vol}(B)$$

muss dabei existieren, d.h. B muss Jordan-messbar sein.

Bedingungen für Riemann-integrierbarkeit:

- f ist stetig auf B oder
- f ist beschränkt auf B und stetig bis auf an einer Teilmenge vom Maß 0

1.2 Eigenschaften

Es sei $R(B)$ die Menge der Riemann-integrierbaren Funktionen auf einer beschränkten, messbaren Menge $B \subset \mathbb{R}^N$, dann gilt für $R(B)$:

- **Vektorraum:** für alle $c \in \mathbb{R}$ und $f, g \in R(B)$ gilt $cf \in R(B)$ und $f + g \in R(B)$, das heißt $R(B)$ ist ein Vektorraum
- **Absolutstetigkeit:** für $f \in R(B)$ ist auch $|f| \in R(B)$, denn $|f|$ ist überall dort stetig, wo auch f stetig ist

Weiterhin besitzt das Riemann-Integral If die folgenden Eigenschaften:

- **Linearität:** die Abbildung $I: f \mapsto If$ ist ein lineares Funktional, d.h. $I(f + g) = If + Ig$ und $I(cf) = cIf$
- **Positivität:** ist $f(x) \geq 0$ für alle $x \in B$, dann ist $If \geq 0$
- **Additivität bzgl. Partitionierung:** wird B in paarweise disjunkte Teilgebiete B_1, \dots, B_l zerlegt, dann gilt

$$\int_B f(x) dx = \int_{B_1} f(x) dx + \dots + \int_{B_l} f(x) dx$$

Beispielsweise gilt

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx \quad \text{falls } a \leq c \leq b$$

Da diese Formel aber auch für alle c gültig ist, definiert man

$$\int_b^a f(x) dx = - \int_a^b f(x) dx,$$

sofern $f \in R([\min\{a, b, c\}, \max\{a, b, c\}])$ ist.

1.3 Integration und Differentiation

Sei f integrierbar auf $[a, b]$, dann ist für $c \in [a, b]$ die Funktion

$$t \mapsto \int_c^t f(x) dx$$

ein unbestimmtes Integral von f , das sich nur in der Wahl von c um eine Konstante von anderen unbestimmten Integralen unterscheidet. Falls f stetig an $t_0 \in [a, b]$ ist, dann ist jedes unbestimmte Integral von f differenzierbar an t_0 und es gilt

$$\left(\int_0^t f(x) dx \right)' (t_0) = f(t_0).$$

Falls f stetig auf ganz $[a, b]$ ist, d.h. $f \in C^0([a, b])$, dann ist jedes unbestimmte Integral von f differenzierbar auf $[a, b]$ und seine Ableitung gleich f .

Eine differenzierbare Funktion $F: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$F'(x) = f(x) \quad \text{für alle } x \in [a, b]$$

heißt Stammfunktion von f . Für beliebige zwei Stammfunktionen F, G , der gleichen Funktion f gibt es eine Konstante $c \in \mathbb{R}$ mit

$$F(x) = G(x) + c \quad \text{für alle } x \in [a, b].$$

Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung: Ist $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar und F eine Stammfunktion von f , dann gilt

$$\int_s^t f(x) dx = F(t) - F(s) \quad \text{für alle } s, t \in [a, b]$$

1.4 Transformationen

Partielle Integration

Sind f, g differenzierbar, sowie f, g' und $(fg)'$ integrierbar auf $[a, b]$, dann ist auf $f'g$ integrierbar und

$$\int_a^b f'(x)g(x) dx = f(b)g(b) - f(a)g(a) - \int_a^b f(x)g'(x) dx$$

Transformationssatz (eindimensional)

Sei $\psi: [\bar{a}, \bar{b}] \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion mit $\psi[\bar{a}, \bar{b}] = [a, b]$. Ist ψ' integrierbar auf $[\bar{a}, \bar{b}]$ und $\psi'(\bar{x}) \neq 0$ für $\bar{x} \in [\bar{a}, \bar{b}]$, dann ist $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ genau dann integrierbar, wenn $(f \circ \psi)\psi'$ integrierbar auf $[\bar{a}, \bar{b}]$ ist. Das Integral von f ist dann gegeben als

$$\int_{\psi(\bar{a})}^{\psi(\bar{b})} f(x) dx = \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} f(\psi(\bar{x}))\psi'(\bar{x}) d\bar{x}$$

Falls ψ' stetig auf $[\bar{a}, \bar{b}]$ ist und $\psi'(\bar{x}) \neq 0$ für alle $x \in [\bar{a}, \bar{b}]$, dann ist ψ' entweder strikt positiv oder strikt negativ auf $[\bar{a}, \bar{b}]$ und

$$\begin{aligned} \text{falls } \psi' > 0 \text{ dann ist } a &= \psi(\bar{a}) \text{ und } b = \psi(\bar{b}) \\ \text{falls } \psi' < 0 \text{ dann ist } a &= \psi(\bar{b}) \text{ und } b = \psi(\bar{a}) \end{aligned}$$

Damit ist

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} f(\psi(\bar{x})) |\psi'(\bar{x})| d\bar{x}$$

Transformationssatz (mehrdimensional)

Die Jacobi-Matrix einer differenzierbaren Funktion $\psi: \bar{B} \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ mit den N Komponenten $\psi_l: \bar{B} \rightarrow \mathbb{R}$ für $l = 1, \dots, N$ ist gegeben als

$$J(\bar{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1(\bar{x})}{\partial \bar{x}_1} & \cdots & \frac{\partial \psi_N(\bar{x})}{\partial \bar{x}_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \psi_1(\bar{x})}{\partial \bar{x}_N} & \cdots & \frac{\partial \psi_N(\bar{x})}{\partial \bar{x}_N} \end{pmatrix}.$$

Sei $\psi: \bar{B} \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ nun eine stetig differenzierbare, bijektive Abbildung von \bar{B} auf B mit nichtsingulärer Jacobi-Matrix, d.h.

$$\det(J(\bar{x})) \neq 0 \text{ für alle } \bar{x} \in \bar{B},$$

dann ist für jede integrierbare Funktion $f: B \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ die zusammengesetzte Abbildung

$$|\det(J)| \circ (f \circ \psi)$$

integrierbar auf \bar{B} und

$$If = \int_B f(x) dx = \int_{\bar{B}} |\det J(\bar{x})| f(\psi(\bar{x})) d\bar{x}.$$

Beispiel 1. (Linear affine Transformationen): Ist

$$\psi(\bar{x}) = A\bar{x} + b \text{ mit } A \in \mathbb{R}^{N \times N}, b \in \mathbb{R}^N,$$

dann ist $\det(J(\bar{x})) = \det(A)$ unabhängig von \bar{x} und damit

$$If = \int_B f(x) dx = |\det A| \int_{\bar{B}} f(A\bar{x} + b) d\bar{x}$$

Beispiel 2. (Sphärische Koordinaten): Ist

$$(r, \phi_1, \dots, \phi_{N-2}, \phi_{N-1}) \in \mathbb{R}_0^+ \times [0, \pi) \times \dots \times [0, \pi) \times [0, 2\pi]$$

mit

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \phi_1 \sin \phi_2 \dots \sin \phi_{N-3} \sin \phi_{N-2} \sin \phi_{N-1}, \\ x_2 &= r \sin \phi_1 \sin \phi_2 \dots \sin \phi_{N-3} \sin \phi_{N-2} \cos \phi_{N-1}, \\ x_3 &= r \sin \phi_1 \sin \phi_2 \dots \sin \phi_{N-3} \cos \phi_{N-2}, \\ &\vdots \\ x_{N-1} &= r \sin \phi_1 \cos \phi_2, \\ x_N &= r \cos \phi_1, \end{aligned}$$

dann ist

$$|\det J(r, \phi_1, \dots, \phi_{N-1})| = r^{N-1} (\sin \phi_1)^{N-2} (\sin \phi_2)^{N-3} \cdot \dots \cdot (\sin \phi_{N-3})^2 \sin \phi_{N-2}$$

Iterierte Integration

Sei $f: B \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar mit $N = N_1 + N_2$ ($\mathbb{R}^N = \mathbb{R}^{N_1} \times \mathbb{R}^{N_2}$) und die Gebiete B_1 und $B_2(x_1), x_1 \in B_1$ definiert als

$$B_1 = \{x_1 \in \mathbb{R}^{N_1} : (\{x_1\} \times \mathbb{R}^{N_2}) \cap B \neq \emptyset\} \text{ und} \\ B_2(x_1) = \{x_2 \in \mathbb{R}^{N_2} : (x_1, x_2) \in B\} \text{ f\u00fcr } x_1 \in B_1,$$

dann kann $\int f$ iteriert werden, das hei\u00dft

$$\int_B f(x) dx = \int_{B_1} \int_{B_2(x_1)} f(x_1, x_2) dx_2 dx_1,$$

sofern alle inneren Integrale

$$\int_{B_2(x_1)} f(x_1, x_2) dx_2$$

existieren. Die iterierte Integration kann auch wiederholt werden:

$$\int_B f(x) dx = \int_{B_1} \int_{B_2(x_1)} \int_{B_3(x_1, x_2)} \dots \int_{B_K(x_1, \dots, x_{K-1})} f(x_1, \dots, x_K) dx_K \dots dx_1$$

1.5 Uneigentliche Integrale

Bisher waren das Gebiet B und die Funktion f beschr\u00e4nkt, wodurch eigentliche Integrale definiert wurden. Uneigentliche Integrale entstehen als Grenzwert von Folgen eigentlicher Integrale.

Unbeschr\u00e4nkte Gebiete

Ist $f: [a, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar auf allen beschr\u00e4nkten Teilintervallen $[a, \beta]$, dann ist das uneigentliche Integral von f auf $[a, \infty)$ definiert als

$$\int_a^\infty f(x) dx := \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_a^\beta f(x) dx,$$

sofern der Grenzwert existiert. Das analoge Vorgehen ist auch f\u00fcr $(-\infty, b]$ m\u00f6glich und damit ist

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx := \int_{-\infty}^\gamma f(x) dx + \int_\gamma^\infty f(x) dx \text{ f\u00fcr } \gamma \in \mathbb{R},$$

sofern die beiden uneigentlichen Integrale existieren, und diese Definition ist dann unabh\u00e4ngig von γ .

Unbeschr\u00e4nkte Funktionen

Ist $f: [a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar auf allen Teilintervallen $[a, \beta] \subset [a, b)$ und f unbeschr\u00e4nkt an b , dann ist

$$\int_a^b f(x) dx := \lim_{\beta \rightarrow b^-} \int_a^\beta f(x) dx,$$

sofern der Grenzwert existiert. Das analoge Vorgehen ist nat\u00fcrlich auch bei a m\u00f6glich. Ist f unbeschr\u00e4nkt an einem inneren Punkt $c \in [a, b]$, aber integrierbar auf allen Teilgebieten $[a, \gamma^-] \subset [a, c)$ und $[\gamma^+, b] \subset (c, b]$, dann ist

$$\int_a^b f(x) dx := \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx,$$

sofern die beiden uneigentlichen Integrale existieren.

Mehrdimensionaler Fall

Sei S_f die Menge der Singularitäten von $f: B \subseteq \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, wobei f über jede messbare Teilmenge $B_S \subset B$, für die der Abschluss von B_S und S_f disjunkt sind, $(Cl B_S) \cap S_f = \emptyset$, integrierbar sei. Weiterhin seien B und/oder f unbeschränkt (also S_f sei nicht leer). Sei dann $B_1 \subset B_2 \subset \dots$ eine beliebige Folge messbarer Mengen, sodass

$$(Cl B_l) \cap S_f = \emptyset \quad \text{für } l = 1, 2, \dots$$

gilt und $B \setminus S_f = B_1 \cup B_2 \cup \dots$. Falls nun für jede solche Folge $\{B_l\}$ die Folge $\{R_l\}$ definiert als

$$R_l := \int_{B_l} f(x) dx$$

den gleichen Grenzwert R hat, dann ist f uneigentlich integrierbar über B und es ist

$$\int_B f(x) dx := R$$

Eigenschaften

Das uneigentliche Integral ist wie das eigentliche Integral linear und positiv. Auch die Transformationen sind genauso anwendbar. Als Ausnahme gilt lediglich: falls f uneigentlich integrierbar ist, dann ist nicht notwendigerweise $|f|$ uneigentlich integrierbar.

Verallgemeinerungen des Integralbegriffs sind:

- Cauchy-Hauptwerte
- Hypersinguläre Integrale (Hadamard-Integrale)
- Kurven- und Oberflächenintegrale

1.6 Integrationsprobleme

Problemstellung

Berechne für $f: B \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$

$$I f := \int_B f(x) dx$$

wobei die Integrale als eigentliche oder uneigentliche Riemann-Integrale existieren. In vielen Anwendungen betrachtet man gewichtete Integrale

$$I_w f := I(wf) = \int_B w(x)f(x) dx,$$

wobei $w(x)$ oft nichtnegativ ist, $w(x) \geq 0$ für alle $x \in B$, oder oszillierend ist. Oft ist (im Gegensatz zu f)

$$\int_B w(x) dx$$

bekannt. Eine Gewichtsfunktion heißt dabei zulässig, falls $I_w p$ für alle Polynome p existiert. Oft sind in Anwendungen viele Integrale bei variierenden f aber gleichem w zu lösen.

Standard-Integrationsgebiete

Gebiet	Notation	Definition
Ganzraum	\mathbb{R}^N	$x \in \mathbb{R}^N$
Einheitswürfel	C_N	$x \in \mathbb{R}^N : \ x\ _\infty \leq 1$
Einheitskugel	S_N	$x \in \mathbb{R}^N : \ x\ _2 \leq 1$
Einheitskreuzpolytop	G_N	$x \in \mathbb{R}^N : \ x\ _1 \leq 1$
Einheitssimplex	T_N	$x \in \mathbb{R}^N : \ x\ _1 \leq 1, x \geq 0$

Standard-Gewichtsfunktionen

Intervall	Gewichtsfunktion	Name
$[-1, 1]$	1	Legendre
$[-1, 1]$	$(1 - x^2)^{\pm 1/2}$	Tschebyscheff (1./2. Art)
$[0, \infty)$	$\exp(-x)$	Laguerre
$(-\infty, \infty]$	$\exp(-x^2)$	Hermite

Mehrdimensionale Gewichtsfunktionen für Produktgebiete $B = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_N, b_N]$ sind oft Produkte eindimensionaler Gewichtsfunktionen

$$w(x) = w_1(x) \cdot \dots \cdot w_N(x)$$

Beispiele hierfür sind

- für $\mathbb{R}_+^N : e^{-\|x\|_1}$
- für $\mathbb{R}^N : e^{-\|x\|_2^2}$

1.7 Quadraturverfahren

Eingabedaten

- Integrand f , Integrationsgebiet B
- Genauigkeit, Verlässlichkeit
- weitere Eigenschaften, z.B. Positivität, exakte Integrierbarkeit

Integrand

- Funktionswerte $f(x_1), \dots, f(x_n)$ sind nur für fest vorgegebene Punkte $x_i \in B, i = 1, \dots, n$ erhältlich (systematisch oder unregelmäßig)
- Die Funktion kann an beliebigen Punkten $x \in B$ ausgewertet werden (Unterprogramm, Orakel)
- explizite Darstellung von f bekannt (symbolische Manipulationen möglich)

Zusatzinformationen zum Integrand

- Glattheit von f (Differenzierbarkeit)
- Schranken von f , Schranken der Ableitungen
- Ableitungen explizit bekannt
- Informationen zu Punkten x , an denen sich f außergewöhnlich verhält (singulär, unstetig, reduzierte Differenzierbarkeit)

Integrationsgebiet

- Standardgebiet
- Iterierte Darstellung

$$If = \int_B f(x) dx = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2(x_1)}^{b_2(x_1)} \dots \int_{a_N(x_1, \dots, x_{N-1})}^{b_N(x_1, \dots, x_{N-1})} f(x_1, \dots, x_N) dx_N \dots dx_1$$

spezifiziert über die $2N$ Funktionen $a_k, b_k : \mathbb{R}^{k-1} \rightarrow \mathbb{R}, k = 1, \dots, N$

- Randdarstellung von B (explizit, implizit, parametrisiert)
- Orakel: $x \in B$

Genauigkeit und Verlässlichkeit

- Genauigkeit: Input: f, B Fehlertoleranz ε , Output: Qf mit $|Qf - If| \leq \varepsilon$
- Verlässlichkeit: Wahrscheinlichkeit, dass das berechnete Ergebnis die Genauigkeitsanforderungen erfüllt

Algorithmus

- Linearer Aufwand für Quadraturformeln $Q_n f = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$
- Maximaler Aufwand vorgegeben: Abbruch nach vorgegebener Rechenzeit

Vorverarbeitung

- Transformationen
- Zerlegungen
- Reihenfolge bei iterierter Darstellung

Software

- Bibliotheken: NAG, IMSL, Quadpack
- Pakete: Maple, Mathematika, Matlab

2 Eindimensionale Quadraturformeln

Ziel: berechne das Integral einer reellen Funktion

$$If = \int_a^b f(x) dx$$

mittels einer Quadraturformel

$$Q_n f = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$$

mit Stützstellen x_i und Gewichten $c_i, i = 1, \dots, n$.

Klassifikation

- symmetrisch: $x_1 < x_2 < \dots < x_n, x_i = (a+b) - x_{n-i+1}$ und $c_i = c_{n-i+1}$ für $i = 1, 2, \dots, \lfloor (n+1)/2 \rfloor$
- gleichgewichtig: $c_1 = c_2 = \dots = c_n$
- geschlossen: $x_1 = a, x_n = b$
- offen: $x_1 > a, x_n < b$

2.1 Riemann-Summen

Ansatz: zerlege das Intervall $[a, b]$ in n Teilintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ gleicher Länge mittels $x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n, h = \frac{b-a}{n}$ und wähle Stützstellen $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$, z.B.

- rechtsseitig: $R_n^r f := \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) f(x_i) = h \sum_{i=1}^n f(x_i)$ oder
- linksseitig: $R_n^l f := \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1}) = h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1})$

Diese Riemann-Summen sind gleichgewichtige Quadraturformeln und werden auch Rechteckregeln genannt. Man erhält Konvergenz $R_n^r f, R_n^l f \rightarrow If$ für $n \rightarrow \infty$.

Zur Bestimmung von Fehlerschranken definiert man für stetiges f den Stetigkeitsmodul

$$w(f; \delta) := \max\{|f(x_1) - f(x_2)| : x_1, x_2 \in [a, b], |x_1 - x_2| \leq \delta\}$$

Satz 1. Sei $f \in C[a, b]$, dann gilt

$$|R_n^r - If| \leq (b-a)w\left(f; \frac{b-a}{n}\right)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} |R_n^r - If| &= \left| h \sum_{i=1}^n f(x_i) - \int_a^b f(x) dx \right| = \\ &= \left| \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f(x_i) - f(x)) dx \right| \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} |f(x_i) - f(x)| dx \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} w(f; h) dx = nhw(f; h) = (b-a)w\left(f; \frac{b-a}{n}\right) \quad \square \end{aligned}$$

Analog erhält man die Fehlerschranke für R_n^l . Diese Fehler treten im schlechtesten Fall (worst case) auf.

2.2 Approximationsformeln

Ansatz: Wähle Polynome $g \approx f$ und berechne Ig statt If . Falls dann

$$\|g - f\|_\infty \leq \frac{\varepsilon}{b - a}$$

gilt, dann gilt für den Quadraturfehler

$$|Ig - If| = \left| \int_a^b g(x) dx - \int_a^b f(x) dx \right| \leq \int_a^b |g(x) - f(x)| dx \leq (b - a) \|g - f\|_\infty \leq \varepsilon$$

Wählt man eine Folge (g_m) , sodass $g_m \rightarrow f$ für $m \rightarrow \infty$ gilt, dann erhält man Konvergenz.

Beispiel 3. (Bernstein-Polynome) Für $f \in C[0, 1]$ konvergiert die Folge

$$B_d(f)(x) = \sum_{i=0}^d \binom{d}{i} f\left(\frac{i}{d}\right) x^i (1-x)^{d-i}$$

der Bernstein-Polynome $B_d(f)$ uniform gegen f und es gilt

$$\int_0^1 B_d(f)(x) dx = \sum_{i=0}^d \binom{d}{i} f\left(\frac{i}{d}\right) \int_0^1 x^i (1-x)^{d-i} dx = \frac{1}{d+1} \sum_{i=0}^d f\left(\frac{i}{d}\right)$$

Die resultierende Quadraturformel ist die Mittelpunkregel $x_i = \frac{i-1}{d}, c_i = \frac{1}{d+1}$, die jedoch keine Verbesserung über den Rechteckregeln bringt.

Beispiel 4. (Taylor-Reihe) Betrachtet man die Taylor-Entwicklung von f um den Punkt 0

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2}x^2 + \dots + \frac{f^{(d)}(0)}{d!}x^d + \dots$$

dann gilt

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx I(T_d(f; 0)) = 2 \left(f(0) + \frac{f''(0)}{3!} + \frac{f^{(4)}(0)}{5!} + \dots + \frac{f^{(2[d/2])}(0)}{(2[d/2] + 1)!} \right)$$

mit dem Taylor-Polynom T_d und für $f \in C^{d+1}[-1, 1]$ gilt

$$|f(x) - T_d(f; 0)(x)| \leq \frac{M_{d+1}}{(d+1)!} |x|^{d+1} \quad \text{für } x \in [-1, 1]$$

und damit

$$|If - IT_d(f; 0)| \leq \frac{M_{d+1}}{(d+1)!}$$

Gewichtete Integration

Bei gewichteten Integralen wählt man wiederum $g \approx f$ und berechnet

$$I_w f = \int_a^b w(x) f(x) dx \approx \int_a^b w(x) g(x) dx = I_w g.$$

Für den Quadraturfehler gilt dann

$$|I_w g - I_w f| = \left| \int_a^b w(x) g(x) dx - \int_a^b w(x) f(x) dx \right| \leq \int_a^b |w(x)| \cdot |g(x) - f(x)| dx \leq \|w\|_1 \|g - f\|_\infty$$

2.3 Polynominterpolation

Ansatz: Wähle ein Interpolationspolynom $P_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$, sodass

$$P_{n-1}(x_i) = f(x_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

ist. Die Lagrange-Darstellung des Interpolationspolynoms ist dann

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) L_{n-1,i}(x) \quad \text{mit } L_{n-1,i}(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

Mit

$$I_w P_{n-1} = \int_a^b w(x) P_{n-1}(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_a^b w(x) L_{n-1,i}(x) dx$$

folgt für die Gewichte der Quadraturformel $Q_n f := I_w P_{n-1}$

$$c_i = \int_a^b w(x) L_{n-1,i}(x) dx \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

Als andere Herleitung kann man die Gewichte c_1, \dots, c_n so wählen, dass $Q_n f$ die Basisfunktionen $\{b_0, \dots, b_{n-1}\}$ des Polynomraums exakt integriert. Für die Monombasis $\{1, x, x^2, \dots, x^{n-1}\}$ folgt dann das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 + \dots + c_n &= \int_a^b w(x) dx \\ c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n &= \int_a^b w(x) x dx \\ &\vdots \\ c_1 x_1^{n-1} + c_2 x_2^{n-1} + \dots + c_n x_n^{n-1} &= \int_a^b w(x) x^{n-1} dx \end{aligned}$$

das Momentengleichungen genannt wird. Die entstehende Matrix ist die Vandermonde-Matrix $V(x_1, \dots, x_n)$, mit Determinante

$$\det V(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=2}^n \prod_{j=1}^{i-1} (x_i - x_j).$$

Falls die Stützstellen x_1, \dots, x_n disjunkt sind, dann ist V nichtsingulär und die Gewichte c_1, \dots, c_n genügen den Momentengleichungen. Die Quadraturformel $Q_n f$ integriert damit die Monome bis zum Grad $n - 1$ exakt.

Interpolatorische Quadraturformeln

Eine Quadraturformel heißt interpolatorisch falls

- entweder die Gewichte als Integrale der Lagrange-Polynome gegeben sind
- oder die Gewichte die Momentengleichungen erfüllen

Eine interpolatorische Quadraturformel berechnet damit das exakte Integral des Interpolationspolynoms durch die gegebenen Stützstellen. Für den Quadraturfehler gilt dann

$$|Q_n f - I_w f| = |I_w P_{n-1} - I_w f| \leq \|w\|_1 \|P_{n-1} - f\|_\infty$$

und für $f \in C^n[a, b]$ gilt

$$\|P_{n-1} - f\|_\infty \leq \frac{M_n}{n!} \|w_n\|_\infty \quad \text{mit } M_n = \|f^{(n)}\|_\infty \quad \text{und } w(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n).$$

Affine Transformationen

Ein Punkt $\bar{x} \in [\bar{a}, \bar{b}]$ kann auf $x \in [a, b]$ durch

$$x = \gamma \bar{x} + \beta \quad \text{bzw.} \quad \bar{x} = \frac{1}{\gamma}(x - \beta) \quad \text{mit } \gamma = \frac{b - a}{\bar{b} - \bar{a}}, \beta = \frac{a\bar{b} - \bar{a}b}{\bar{b} - \bar{a}}$$

abgebildet werden. Damit gilt dann

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = \gamma \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} \bar{w}(\bar{x}) \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x}$$

mit $\bar{w}(\bar{x}) = w(\gamma \bar{x} + \beta)$ und $\bar{f}(\bar{x}) = f(\gamma \bar{x} + \beta)$. Die Quadraturformeln sind dann im transformierten und untransformierten Fall

$$\begin{aligned} \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} \bar{w}(\bar{x}) \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x} &= \sum_{i=1}^n \bar{c}_i \bar{f}(\bar{x}_i) + \bar{E}(\bar{f}) \\ \int_a^b w(x) f(x) dx &= \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) + E(f) \end{aligned}$$

mit $x_i = \gamma \bar{x}_i + \beta, c_i = \gamma \bar{c}_i$ für $i = 1, \dots, n$ und $E(f) = \gamma \bar{E}(\bar{f})$.

Einfache interpolatorische Quadraturformeln

Stützstellen	Klasse
äquidistant	Newton-Cotes-Formeln
mit Endpunkten	offene
ohne Endpunkte	geschlossene
Nullstellen orthogonaler Polynome	Gauß-Formeln
Legendre	Gauß-Legendre
Laguerre	Gauß-Laguerre
Hermite	Gauß-Hermite
Nullstellen von	
$P_{n-1}(x) + P_n(x)$	Radau-Formeln
$(x^2 - 1)P'_{n-1}(x)$	Lobatto-Formeln
Tschebyscheff-Polynome	Clenshaw-Curtis-Formeln
Extrema	praktisch
Nullstellen	klassisch

Eine Quadraturformel hat den Exaktheitsgrad D , falls gilt

$$Q_n x^k = I_w x^k \quad \text{für } k = 0, \dots, D \quad \text{und} \quad Q_n x^{D+1} \neq I_w x^{D+1}.$$

Satz 2. Jede n -Punkt Quadraturformel Q_n mit Exaktheitsgrad $D \geq n - 1$ ist interpolatorisch

Beweis. Ist der Exaktheitsgrad $D \geq n - 1$, so sind die Momentengleichungen erfüllt. □

Satz 3. Jede Quadraturformel Q_n mit Exaktheitsgrad $D \geq 0$ erfüllt

$$|Q_n f - I_w f| \leq (\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |c_i|) \cdot e_D^*(f)$$

mit

$$e_D^*(f) := \inf \{ \|P_D - f\|_\infty : P_D \in \mathbb{P}_D \}$$

Falls alle Gewichte nichtnegativ sind, dann gilt

$$|Q_n f - I_w f| \leq (\|w\|_1 + I_w) \cdot e_D^*(f)$$

Beweis. Für alle Polynome $P_D \in \mathbb{P}_D$ gilt $Q_n P_D = I_w P_D$ und damit ist

$$\begin{aligned} |Q_n f - I_w f| &= |Q_n f - Q_n P_D + Q_n P_D - I_w P_D + I_w P_D - I_w f| \leq \\ &\leq |Q_n f - Q_n P_D| + |I_w P_D - I_w f| = |Q_n(P_D - f)| + |I_w(P_D - f)| \end{aligned}$$

Für diese beiden Terme gilt

$$\begin{aligned} |Q_n(P_D - f)| &= \left| \sum_{i=1}^n c_i (P_D(x_i) - f(x_i)) \right| \leq \sum_{i=1}^n |c_i| |P_D(x_i) - f(x_i)| \leq \|P_D - f\|_\infty \sum_{i=1}^n |c_i| \\ |I_w(P_D - f)| &= \left| \int_a^b w(x) (P_D(x) - f(x)) dx \right| \leq \int_a^b |w(x)| \|P_D - f\|_\infty dx = \|w\|_1 \|P_D - f\|_\infty \end{aligned}$$

und damit insgesamt

$$|Q_n f - I_w f| \leq \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |c_i| \right) \|P_D - f\|_\infty.$$

Die schärfste Fehlerschranke erhält man mit dem besten Approximationspolynom $P_D^* \in \mathbb{P}_D$ bezüglich der L_∞ -Norm:

$$\|P_D^* - f\|_\infty =: e_D^*(f).$$

Falls die Gewichte $c_i \geq 0$ sind, dann ist

$$\sum_{i=1}^n |c_i| = \sum_{i=1}^n c_i = \int_a^b w(x) dx = I_w,$$

da die Quadraturformel Q_n nach Voraussetzung für das konstante Polynom $P_0 \equiv 1$ exakt ist. \square

Konvergenz

Falls die Gewichte alle positiv sind, $c_i \geq 0$ dann konvergiert $Q_n f \rightarrow I_f$ für $n \rightarrow \infty$ für alle Integranden $f \in C[a, b]$, da nach dem Satz von Weierstrass $e_D^*(f) \rightarrow 0$ für $D \rightarrow \infty$ gilt. Es gilt sogar Konvergenz für alle Riemann-integrierbaren Funktionen $f \in R[a, b]$.

Weiterhin gilt

$$e_D^*(f) \leq e_{D-1}^*(f) \text{ für alle } D \in \mathbb{N},$$

das heißt der Fehler fällt mit wachsendem D . Den maximalen Exaktheitsgrad bei positiven Gewichten erreichen die Gauß-Formeln.

Satz 4. Falls $D \geq 2n - 1$, dann gilt $c_i > 0$ für $i = 1, \dots, n$.

Beweis. Da die Quadraturformel Q_n exakt für \mathbb{P}_{n-2} ist, ist sie auch exakt für die Lagrange-Polynome

$$L_{n-1,j}^2 \in \mathbb{P}_{2n-2} \quad \text{für } j = 1, \dots, n$$

Damit gilt

$$0 < \int_a^b w(x) L_{n-1,j}^2(x) = \sum_{i=1}^n c_i L_{n-1,j}^2(x_i) = c_j \quad \text{für } j = 1, \dots, n$$

□

Konvergenzrate

Es gelten die folgenden Abschätzungen:

$$e_D^*(f) \leq C_1 w \left(f; \frac{b-a}{2D} \right) \quad \text{für alle } f \in C[a, b]$$

$$e_D^*(f) \leq C_2 \frac{b-a}{D} \quad \text{für alle Lipschitz-stetigen } f$$

$$e_D^*(f) \leq C_3 \frac{M^k (b-a)^k}{D^k} \quad \text{für alle } f \in C^{(k)}[a, b], k \in \mathbb{N}, \text{ mit } |f^{(k)}| \leq M_k$$

wobei die Konstanten C_1, C_2, C_3 unabhängig von f sind.

Hat man keinerlei Information über die Glattheit der Funktion, dann existiert, selbst wenn $Q_n f \rightarrow I f$ für $n \rightarrow \infty$ gilt, für jede (beliebig langsam) konvergierende Folge $(\lambda_n), \lambda_n \in \mathbb{R}, \lambda_n \geq 0, \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = 0$ eine Funktion $f \in C[a, b]$, sodass

$$|Q_n f - I f| \geq \lambda_n \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}$$

noch langsamer konvergiert.

Newton-Cotes-Formeln

Die geschlossenen Newton-Cotes-Formeln $Q_n, n = 2, 3, \dots$ verwenden äquidistante Stützstellen $x_i = a + (i-1) \frac{b-a}{n-1}$. Für Q_9 und Q_n mit $n > 11$ treten negative Gewichte auf. Es gilt sogar

$$\sum_{i=1}^n |c_i^{(n)}| \rightarrow \infty \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

Die Newton-Cotes-Formeln sind damit instabil und man erhält keine Konvergenz für analytische Funktionen. Die offenen Newton-Cotes-Formeln $Q_n, n = 1, 2, \dots$ verwenden als Stützstellen $x_i = a + i \frac{b-a}{n+1}$

Clenshaw-Curtis-Formeln

Die Clenshaw-Curtis-Formeln verwenden als Stützstellen die Nullstellen

$$x_i = \cos \frac{(2i-1)\pi}{2n} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

oder die Extrema

$$x_i = \cos \frac{(i-1)\pi}{n-1} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

der Tschebyscheff-Polynome. Für die Legendre-Gewichtsfunktion $w = 1$ erhält man immer positive Gewichte und somit Konvergenz für alle stetigen Funktionen. Für $w \in L_p[a, b]$ mit $p > 1$ erhält man sogar Konvergenz für alle Riemann-integrierbaren Funktionen. Der Exaktheitsgrad der Clenshaw-Curtis-Formeln ist $D = n - 1$. Für die Extrema der Tschebyscheff-Polynome sind die Clenshaw-Curtis-Formeln geschachtelt, das heißt beim Übergang von $n \rightarrow 2n - 1$ müssen nur $n - 1$ neue Funktionswerte berechnet werden.

2.4 Gauß-Formeln

Alle interpolatorischen Quadraturformeln Q_n besitzen einen Exaktheitsgrad $D \geq n - 1$. Die Gewichte werden dabei für gegebene Stützstellen so gewählt, dass alle Polynome bis zum Grad $n - 1$ exakt integriert werden. Nun wählt man die Stützstellen und Gewichte gemeinsam und erhält so einen Exaktheitsgrad von $D = 2n - 1$, die Quadraturformeln sind also wieder interpolatorisch. Die Gewichte werden dabei wie bisher über die Momentengleichungen bestimmt.

Bestimmung der Stützstellen

Die Wahl der Stützstellen ist jedoch nicht ganz leicht. Sei $P_{2n-1} \in \mathbb{P}_{2n-1}$. Mit dem Euklidischen Algorithmus kann P_{2n-1} dann aufgeteilt werden in

$$P_{2n-1} = r(x)w_n(x) + s(x)$$

mit $r, s \in \mathbb{P}_{n-1}$ und

$$w_n(x) := (x - x_1) \cdot (x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$$

mit noch unbekanntenen Stützstellen x_1, \dots, x_n . Daraus folgt dann für das Integral über P_{2n-1}

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x)P_{2n-1}(x) dx &= \int_a^b w(x)r(x)w_n(x) dx + \int_a^b w(x)s(x) dx = \\ &= \sum_{i=1}^n c_i r(x_i)w_n(x_i) + \sum_{i=1}^n c_i s(x_i) + E(P_{2n-1}) = \sum_{i=1}^n c_i s(x_i) + E(P_{2n-1}), \end{aligned}$$

da $w_n(x_i) = 0$ für $i = 1, \dots, n$ ist. Falls die Stützstellen so gewählt werden, dass für alle $r \in \mathbb{P}_{n-1}$

$$\int_a^b w(x)r(x)w_n(x) dx = 0 \quad (*)$$

gilt, dann führt die Wahl der Gewichte nach dem Interpolationsprinzip zu

$$\int_a^b w(x)s(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i s(x_i)$$

also zu $E(P_{2n-1}) = 0$ für alle $P_{2n-1} \in \mathbb{P}_{2n-1}$. Die Frage ist nun: können die Stützstellen so gewählt werden, dass (*) erfüllt ist?

Orthogonale Polynome

Das gewichtete L_2 -Skalarprodukt auf Funktionen ist gegeben als

$$(P, Q)_w := I_w(PQ) = \int_a^b w(x)P(x)Q(x) dx$$

für alle $P, Q \in \mathbb{P}$. Die von dem Skalarprodukt abgeleitete Norm ist dann

$$\|P\|_w := \sqrt{(P, P)_w}$$

Zwei Funktionen P, Q sind damit w-orthogonal, falls gilt

$$I_w(PQ) = \int_a^b w(x)P(x)Q(x) dx = 0$$

und w-orthonormal, falls $\|P\|_w = \|Q\|_w = 1$. Die Menge der w-orthogonalen Polynome sei

$$\{\mathbb{P}^w := P_d^w, d = 1, 2, \dots\} \quad \text{mit} \quad \deg P_d^w = d.$$

Für orthogonale Polynome gilt die Rekurrenzformel

$$P_{d+1}^w = (a_d x - b_d) P_d^w - c_d P_{d-1}^w \quad \text{für } d = 0, 1, 2, \dots$$

mit

$$\begin{aligned} a_d &\neq 0 \\ b_d &= \frac{(x P_d^w, P_d^w)_w}{\|P_d^w\|_w^2} \quad \text{für } d = 0, 1, 2, \dots \\ c_d &= \frac{a_d}{a_{d-1}} \frac{\|P_d^w\|_w^2}{\|P_{d-1}^w\|_w^2} \quad \text{für } d = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Für $a_d = 1$ sind die Polynome normalisiert (haben als höchsten Koeffizienten Eins), die Koeffizienten c_d sind positiv und die Tridiagonalmatrix

$$J_n^w := \begin{pmatrix} b_0 & \sqrt{c_1} & & & \\ \sqrt{c_1} & b_1 & \sqrt{c_2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \sqrt{c_{n-1}} \\ & & & \sqrt{c_{n-1}} & b_{n-1} \end{pmatrix}$$

ist die Jacobi-Matrix n -ter Ordnung für w . Die Nullstellen orthogonaler Polynome sind einfach, reell und im Inneren von $[a, b]$. Sie sind die Eigenwerte der Jacobi-Matrix J_n^w . Die Gewichte sind $c_i = x_{i+1}^2$, $i = 1, 2, \dots, n$, wobei (x_{i1}, \dots, x_{in}) der i -te Eigenvektor von J_n^w ist.

Eigenschaften

Die Gauß-Formeln

$$G_n^w = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$$

- sind die eindeutigen interpolatorischen Quadraturformeln mit n Punkten, die als Stützstellen die Nullstellen der w -orthogonalen Polynome P_n^w verwenden
- werden nach der Gewichtsfunktion benannt: Gauß-Legendre (auch einfach nur Gauß), Gauß-Laguerre, Gauß-Hermite, ...
- sind nicht exakt für $(P_n^w)^2 \in \mathbb{P}_{2n}$, da die Stützstellen von G_n^w die Nullstellen von P_n^w sind und damit

$$G_n^w((P_n^w)^2) = 0 \quad \text{ist, jedoch} \quad I_w((P_n^w)^2) \neq 0$$

- erreichen den maximalen Exaktheitsgrad $D = 2n - 1$ für n -Punkt Quadraturformeln, sofern die Gewichtsfunktion w zulässig ist
- konvergieren gegen das exakte Integral, $G_n^w f \rightarrow I_w f$ für $n \rightarrow \infty$ für alle Funktionen $f \in C[a, b]$

Erweiterungen

- Gauß-Formeln für nicht-positive Gewichtsfunktionen (kein Skalarprodukt)
- Gauß-Formeln mit vorgeschriebenen Punkten:
 - Radau: $x_1 = a$ oder $x_1 = b \Rightarrow 2n - 1$ übrige Parameter $\Rightarrow D = 2n - 2$
 - Lobatto: $x_1 = a$ und $x_2 = b \Rightarrow 2n - 2$ übrige Parameter $\Rightarrow D = 2n - 3$
 Sind für alle zulässigen Gewichtsfunktionen konstruierbar

- Geschachtelte Gauß-Formeln: die Gauß-Formeln sind i.a. außer evtl. am Nullpunkt nicht geschachtelt. Gauß-Kronrod-Formeln: schreibe die n Stützstellen von G_n vor und berechne $n + 1$ Punkte, sodass der Exaktheitsgrad maximal wird ($n + 1 + 2n + 1 = 3n + 2$). Die neuen Stützstellen liegen dann in $(a, x_1), (x_1, x_2), \dots, (x_n, b)$, sie existieren aber nicht für alle Gewichtsfunktionen.
- die Gauß-Patterson-Formeln sind die rekursive Erweiterung der Gauß-Kronrod-Formeln, sie existieren aber nur in wenigen Fällen, z.B. für das Legendre-Gewicht und die Folge an Punkten $1, 3, 7, 15, 31, \dots$. Die Gauß-Patterson-Formeln sind geschachtelte Quadraturformeln mit maximalem Exaktheitsgrad

Gauß-Formeln mit vorgeschriebenen Punkten

Allgemeiner Ansatz: fixiere x_1, \dots, x_n und finde x_{n+1}, \dots, x_{n+m} und c_1, \dots, c_{n+m} , sodass

$$Q_{n+m}f = \sum_{i=1}^{n+m} c_i f(x_i) \approx I_w f$$

exakt für $D \geq n + 2m - 1$ ist. Die Bedingung hierfür ist

$$\int_a^b w(x)v(x)w_m(x)P_{m-1}(x) dx = 0 \text{ für alle } P_{m-1} \in \mathbb{P}_{m-1}$$

mit

$$v(x) = (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n) \text{ und} \\ w_m(x) = (x - x_{n+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_{n+m}),$$

damit Q_{n+m} exakt für alle $P_{n+2m-1} \in \mathbb{P}_{n+2m-1}$ ist.

Die neuen Stützstellen müssen die Nullstellen des „orthogonalen“ Polynoms $w_m(x)$ mit Grad m bezüglich der Gewichtsfunktion $w \cdot v$ sind. Die Funktion wv ist jedoch im allgemeinen nicht zulässig, da v das Vorzeichen wechselt, falls mindestens ein x_i innerhalb von $[a, b]$ liegt. Orthogonale Polynome $w_m(x)$ mit einfachen, reellen Nullstellen existieren somit im Allgemeinen nicht (bei den Kronrod-Formeln z.B. nur falls $w(x) \equiv 1$). Bei den Radau- und Lobatto-Formeln liegen die vorgeschriebenen Stützstellen jedoch am Rand, somit wechselt v das Vorzeichen nicht in $[a, b]$ und die entsprechenden Quadraturformeln existieren uneingeschränkt.

2.5 Zusammengesetzte Quadraturformeln

Ansatz: integriere statt ein Interpolationspolynom, stückweise Interpolationspolynome:

- zerlege das Intervall $[a, b]$ in Teilintervalle und verwende einfache Quadraturformeln für jedes Teilintervall
- bestimme $k + 1$ Partitionspunkte, um k gleich große Teilintervalle zu erhalten

$$a = \bar{x}_0 < \bar{x}_1 < \dots < \bar{x}_k = b \text{ mit } \bar{x}_j = a + j \frac{b-a}{k}, j = 0, 1, \dots, k$$

- verwende eine n -Punkt Quadraturformel in jedem Teilintervall $[\bar{x}_0, \bar{x}_1], \dots, [\bar{x}_{k-1}, \bar{x}_k]$ und erhalte so die zusammengesetzte Quadraturformel $k \times Q_n$

Eigenschaften

- Ist Q_n geschlossen, dann ist die Zahl der Punkte der zusammengesetzten Formel $k(n - 1) + 1$ (die Partitionspunkte werden nur einmal gezählt)

- Ist

$$Q_n f = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad \text{mit } x_i \in [-1, 1], i = 1, \dots, n$$

eine einfache Quadraturformel, dann ist die transformierte Formel für $[\bar{x}_{j-1}, \bar{x}_j]$ gegeben durch

$$\int_{\bar{x}_{j-1}}^{\bar{x}_j} f(x) dx \approx \frac{b-a}{2k} \sum_{i=1}^n c_i f(x_{ij}) \quad \text{für } j = 1, 2, \dots, k$$

mit

$$x_{ij} := \bar{x}_{j+1} + \frac{b-a}{2k}(1+x_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad \text{und } j = 1, \dots, k$$

und damit ist

$$(k \times Q_n) f = \sum_{j=1}^k \frac{b-a}{2k} \sum_{i=1}^n c_i f(x_{ij}) = \frac{b-a}{2k} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n c_i f(x_{ij})$$

Konvergenz

Satz 5. Sei Q_n eine n -Punkt Quadraturformel mit Exaktheitsgrad $D \geq 0$, dann gilt für alle Riemann-integrierbaren Funktionen

$$(k \times Q_n) f \rightarrow I f \quad \text{für } k \rightarrow \infty$$

Beweis. Ändert man die Summationsreihenfolge zu

$$(k \times Q_n) f = \frac{b-a}{2k} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n c_i f(x_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n c_i \frac{b-a}{k} \sum_{j=1}^k f(x_{ij}),$$

dann ist für jedes $k = 1, 2, \dots$ und $i = 1, 2, \dots, n$

$$\frac{b-a}{k} \sum_{j=1}^k f(x_{ij}) \quad (*)$$

eine Riemann-Summe, da $x_{ij} \in [\bar{x}_{j-1}, \bar{x}_j]$ und $\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1} = (b-a)/k$ für $j = 1, \dots, k$ ist und $(*) \rightarrow \infty$ für $k \rightarrow \infty$. Nachdem $f \equiv 1$ exakt integriert wird, gilt

$$\sum_{i=1}^n c_i = 2$$

woraus folgt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (k \times Q_n) f = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n c_i \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{b-a}{k} \sum_{j=1}^k f(x_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n c_i I f = I f \quad \square$$

Konvergenzordnung

Satz 6. Ist für $f \in C^p[a, b]$ der Quadraturfehler von Q_n gegeben durch

$$E_n f = Q_n f - \int_a^b f(x) dx = C(b-a)^{p+1} f^{(p)}(\xi) \quad \text{mit } \xi \in [a, b],$$

wobei C unabhängig von a, b , und f ist, dann ist der Fehler von $k \times Q_n$

$$E_{k \times Q_n} f = (k \times Q_n) f - \int_a^b f(x) dx$$

gegeben durch

$$\lim_{k \rightarrow \infty} k^p E_{k \times Q_n} f = C(b-a)^p \left(f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a) \right),$$

das heißt die Konvergenzordnung für $k \rightarrow \infty$ ist mindestens p .

Beweis. Der Fehler $E_{k \times Q_n} f$ ist die Summe der Fehler in jedem Teilintervall

$$E_{k \times Q_n} f = \sum_{j=1}^k C \left(\frac{b-a}{k} \right)^{p+1} f^{(p)}(\xi_j) = C \left(\frac{b-a}{k} \right)^{p+1} \sum_{j=1}^k f^{(p)}(\xi_j) \quad \text{mit } x_j \in [x_{j-1}, x_j]$$

und mit Grenzwert

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{b-a}{k} \sum_{j=1}^k f^{(p)}(\xi_j) = \int_a^b f^{(p)}(x) dx = f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a) \quad \square$$

Solche Fehlerschranken existieren beispielsweise für die Newton-Cotes-, Gauß- und Clenshaw-Curtis-Formeln. Da Q_n mindestens Exaktheitsgrad $D = p - 1$ besitzt, gilt für den Quadraturfehler

$$E_{k \times Q_n}(f) = O(k^{-D-1})$$

Zusammengesetzte Trapezregel

Wendet man l -mal die Trapezregel an ergibt sich

$$T_l = l \times T \Rightarrow T_l f = h \left(\frac{1}{2} f(a) + f(a+h) + \dots + f(a+(l-1)h) + \frac{1}{2} f(b) \right)$$

mit Maschenweite $\frac{b-a}{l}$ und Quadraturfehler

$$T_l f - I f \approx \frac{h^2}{12} (f'(b) - f'(a))$$

Satz 7. (Euler-MacLaurin) Ist $f \in C^{2k+1}[a, b]$, dann ist

$$\begin{aligned} T_l f - I f &= \frac{B_2}{2!} h^2 (f'(b) - f'(a)) + \frac{B_4}{4!} h^4 (f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)) + \dots + \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} (f^{(2k+1)}(b) - f^{(2k+1)}(a)) + \\ &+ h^{2k+1} \int_a^b \bar{P}_{2k+1} \left(l \frac{x-a}{b-a} \right) f^{(2k+1)}(x) dx \end{aligned}$$

mit den Bernoulli-Zahlen

$$B_{2j} = (-1)^{j-1} (2j)! \sum_{i=1}^{\infty} 2(2i\pi)^{-2j} \quad \text{für } j = 1, 2, \dots$$

($B_2 = \frac{1}{2}, B_4 = -\frac{1}{30}, B_6 = \frac{1}{32}, B_8 = -\frac{1}{30}, \dots$) und der Funktion

$$\bar{P}_{2k+1}(x) = (-1)^{k-1} \sum_{i=1}^{\infty} 2(2i\pi)^{-2k-1} \sin(2\pi i x)$$

Beweis. Betrachte

$$\frac{1}{2} (f(k) + f(k+1)) = \int_k^{k+1} f(x) dx + \int_k^{k+1} \left(x - [x] - \frac{1}{2} \right) f'(x) dx$$

Setze $P_1(x) = x - [x] - \frac{1}{2}$ als stückweise periodische Funktion mit Periode 1. Für $k = 0, 1, \dots, n-1$ und zusammensetzen ergibt sich

$$\frac{1}{2}f(0) + f(1) + \dots + f(n-1) + \frac{1}{2}f(n) = \int_0^n f(x) dx + \int_0^n P_1(x)f'(x) dx$$

Die Funktion P_1 besitzt die Fourier-Reihe

$$P_1(x) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin 2\pi nx}{\pi n}.$$

Integrieren führt zu

$$P_2(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos 2\pi nx}{(2\pi n)^2}. \quad \text{und} \quad P_3(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \sin 2\pi nx}{(2\pi n)^3} \quad \text{usw.}$$

und allgemein

$$P_{2j}(x) = (-1)^{j-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \cos 2\pi nx}{(2\pi n)^{2j}} \quad \text{und} \quad P_{2j+1}(x) = (-1)^{j-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \sin 2\pi nx}{(2\pi n)^{2j+1}}$$

Die Funktion P_n ist ein stückweises Polynom vom Grad n und periodisch mit Periode 1. Weiterhin gilt

$$\begin{aligned} P'_{n+1}(x) &= P_n(x) \\ P_{2j+1}(0) &= P_{2j+1}(1) = 0 \quad \text{für } j = 1, 2, \dots \\ P_{2j}(0) &= P_{2j}(1) = (-1)^{j-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{(2n\pi)^{2j}} = \frac{B_{2j}}{(2j)!} \quad \text{für } j = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Weitere partielle Integration ergibt

$$\int_0^n P_1 f'(x) dx = P_2(x)f'(x)|_0^n - \int_0^n P_2(x)f''(x) dx = \frac{B_2}{2!} [f'(n) - f'(0)] - \int_0^n P_2(x)f''(x) dx$$

und

$$\int_0^n P_2 f''(x) dx = P_3(x)f''(x)|_0^n - \int_0^n P_3(x)f'''(x) dx = - \int_0^n P_3(x)f'''(x) dx$$

und weiter wiederholt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}f(0) + f(1) + \dots + f(n-1) + \frac{1}{2}f(n) &= \int_0^n f(x) dx + \frac{B_2}{2!} [f'(n) - f'(0)] + \frac{B_4}{4!} [f'''(n) - f'''(0)] + \dots + \\ &+ \frac{B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(n) - f^{(2k-1)}(0)] + \int_0^n P_{2k+1}(x)f^{(2k+1)}(x) dx \end{aligned}$$

Die Aussage folgt dann durch Anwendung auf $f(a+hx)$. □

Anmerkungen:

- die zusammengesetzte Trapezregel ergibt außerordentlich gute Resultate für glatte Integranden, deren ungerade Ableitungen an den Intervallgrenzen gleich sind (beispielsweise $(b-a)$ -periodische Funktionen. Ist $f^{(j)}(a) = f^{(j)}(b)$ für $j = 1, \dots, 2k-1$ und $|f^{(2k+1)}(x)| \leq M_{2k+1}$ für $x \in [a, b]$, dann gilt

$$|T_l f - I f| \leq C \cdot h^{2k+1} \quad \text{mit} \quad h = \frac{b-a}{l}$$

- Die Euler-MacLaurin-Formel lässt sich weiter verallgemeinern: ist Q_n eine Quadraturformel mit Exaktheitsgrad D und gleichen Gewichten an a und b (wobei auch offene Formeln zugelassen sind), dann ist der Fehler der zusammengesetzten Formel $k \times Q_n$ für $f \in C^{p+1}[a, b]$ gegeben als

$$(k \times Q_n)f - If = \sum_{q=1}^{p-D} a_q k^{-D-q} + O(k^{-p-1}),$$

wobei die Koeffizienten a_1, \dots, a_{p-D} von Q_n und f , aber nicht von k abhängen.

Periodisierende Transformationen

Periodisierende Transformationen sind monotone Funktionen $\psi: [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ mit $x = \psi(\bar{x})$ und

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 f(\psi(\bar{x}))\psi'(\bar{x}) d\bar{x}$$

- Polynomiale Transformationen:

$$\psi(\bar{x}) = D_\alpha \int_0^{\bar{x}} (t(1-t))^{\alpha-1} dt \quad \text{für } \alpha = 2, 3, 4, \dots$$

mit Skalierungsfaktor

$$D_\alpha := \left(\int_0^1 (t(1-t))^{\alpha-1} dt \right)^{-1}$$

Damit gilt $\psi^{(k)}(0) = \psi^{(k)}(1) = 0$ für $k = 1, 2, \dots, \alpha - 1$. Ist $f \in C^{\alpha-2}[0, 1]$, dann ist $(f \circ \psi)\psi'$ ebenfalls $\in C^{\alpha-2}[0, 1]$ und alle Ableitungen bis zum Grad $\alpha - 2$ verschwinden am Rand. Zudem hat $(f \circ \psi)\psi'$ eine glatte periodische Fortsetzung. Falls f genügend glatt ist, gilt

$$T_l(f \circ \psi)\psi' - If = O(l^{-\alpha})$$

- Sinus-Transformationen:

$$\psi(\bar{x}) = D_\alpha \int_0^{\bar{x}} (\sin \pi t)^{\alpha-1} dt \quad \text{für } \alpha = 2, 3, 4, \dots$$

mit Skalierungsfaktor

$$D_\alpha := \left(\int_0^1 (\sin \pi t)^{\alpha-1} dt \right)^{-1}$$

- IMT-Transformationen (nach Iri, Moriguti, Takasawa)

$$\psi(\bar{x}) = D_\alpha \int_0^{\bar{x}} \exp\left(-\frac{c}{t(1-t)}\right) dt \quad \text{mit } c \in \mathbb{R}$$

und Skalierungsfaktor

$$D_c = \left(\int_0^1 \exp\left(-\frac{c}{t(1-t)}\right) dt \right)^{-1}.$$

Mit dieser Transformation verschwinden alle Ableitungen am Rand $\psi^{(k)}(0) = \psi^{(k)}(1) = 0$. Ist $f \in C^\infty[0, 1]$, dann ist $(f \circ \psi)\psi'$ ebenfalls $\in C^\infty[0, 1]$ und alle Ableitungen verschwinden am Rand und $(f \circ \psi)\psi'$ hat eine glatte periodische Fortsetzung.

Diese Transformationen können auch direkt auf die Quadraturformel $Q_n, n = l - 1$ angewandt werden:

$$x_i = \psi\left(\frac{i}{l}\right) \quad \text{und} \quad c_i = \frac{\psi'\left(\frac{i}{n+1}\right)}{n+1} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

Die resultierenden Quadraturformeln sind keine zusammengesetzten Formeln mehr, aber die Folge Q_1, Q_3, Q_5, \dots ist geschachtelt (sogenannte IMT-Formeln). Sie sind gut bei Randsingularitäten einsetzbar, da $(f \circ \psi)\psi'$ am Rand stetig differenzierbar ist. Sie führen jedoch zu numerischen Instabilitäten, da ψ' sehr klein werden kann (underflow).

Romberg-Quadratur

Durch die Euler-MacLaurin-Entwicklung sieht man die Fehlerentwicklung

$$T_l - If = C_2 h^2 + C_4 h^4 + C_6 h^6 + \dots,$$

wobei die Konstanten C_2, C_4, \dots nur von f , aber nicht von $h = h_l = \frac{b-a}{l}$ abhängen. Man kann nun Richardson-Extrapolation verwenden, um die Konvergenz zu beschleunigen. Wähle hier zu $l_m := 2^{m-1}, m = 1, 2, \dots$ und setze

$$\begin{aligned} T_m^0 &= T_{2^{m-1}} f \\ T_m^j &= \frac{4^j T_{2^{m-j}}^{j-1} - T_m^{j-1}}{4^j - 1} \quad \text{für } m, j = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Die Werte T_m^j können dann rekursiv mit einem Dreiecksschema berechnet werden. Die Formeln T_m^j besitzen dabei die gleichen Stützstellen, wie $T_{2^{m+j-1}}$ und heißen Romberg-Formeln.

Eigenschaften

- der Exaktheitsgrad ist $D = 2j - 1$
- jede Romberg-Formel ist eine Riemann-Summe
- da $D = 2j - 1 < 2^j$ für $j \geq 1$ sind T_m^3, T_m^4, \dots nicht interpolatorisch; trotzdem konvergieren die Folgen $T_1^j f, T_2^j f, \dots$ und $T_m^0 f, T_m^1 f, \dots$ für alle Riemann-integrierbaren Funktionen
- die Romberg-Formeln sind besonders gut für glatte Funktionen geeignet

3 Mehrdimensionale Quadraturformeln

Ziel: berechne das multivariate Integral

$$I_2 f = \int_B w(x) f(x) dx$$

mit $f: B \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$. Während eindimensionale Quadraturformeln meist auf Polynominterpolation basieren, beruhen mehrdimensionale Quadraturformeln meist auf zahlentheoretischen Folgen.

3.1 Konstruktionen

Riemann-Summen

Die multivariate Riemann-Summe ist gegeben als

$$R_n f := \sum_{C_{l_1, \dots, l_N} \in \mathcal{P}} \text{vol}(C_{l_1, \dots, l_N}) f(\xi_{l_1, \dots, l_N})$$

wobei \mathcal{P} eine Partition von B in $n = n_1 \cdot \dots \cdot n_N$ Teilwürfel C_{l_1, \dots, l_N} und $\xi_{l_1, \dots, l_N} \in C_{l_1, \dots, l_N}$ ist. Ist B ein N -dimensionaler Hyperwürfel und f stetig, so gilt für den Fehler

$$|I f - R_n f| \leq \text{vol}(B) \cdot w \left(f; \frac{\text{vol}(B)}{n} \right)$$

mit dem mehrdimensionalen Stetigkeitsmodul

$$w(f; \delta) := \max\{|f(x_1) - f(x_2)| : x_1, x_2 \in B, \|x_1 - x_2\| \leq \delta\},$$

wobei $\|\cdot\|$ irgendeine Norm auf \mathbb{R}^N ist. Ist B kein Hyperwürfel, dann ist $c_B f$ auf B' , wobei B' ein Hyperwürfel ist, der B enthält, im Allgemeinen unstetig am Rand ∂B von B . Der Diskretisierungsfehler kann dabei nicht durch den Stetigkeitsmodul beschränkt werden (die Regularität von ∂B spielt eine wichtige Rolle). Die Konvergenz der Riemann-Summe ist in der Regel sehr langsam.

Approximationen

Analog zum eindimensionalen Fall ersetzt man f durch g und berechnet $I_w g$ statt $I_w f$. Für den Quadraturfehler gilt dann mit der Hölder-Ungleichung

$$|I_w g - I_w f| \leq \|w\|_1 \|g - f\|_\infty$$

unabhängig von der Dimension N . Man approximiert nun f durch g in der L_∞ -Norm, beispielsweise durch multivariate Polynome.

Beispiel 5. (Taylor-Reihe) Die multivariate Taylor-Reihe von f im Nullpunkt ist definiert als

$$f(x) = f(0) + \sum_{i_1=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_{i_1}}(0) x_{i_1} + \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_{i_1} \partial x_{i_2}}(0) x_{i_1} x_{i_2} + \dots + \sum_{i_1=1}^N \dots \sum_{i_s=1}^N \frac{1}{s!} \frac{\partial^s f}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_s}}(0) x_{i_1} \dots x_{i_s} + \dots$$

Durch Integration ergibt sich dann

$$\int_{C_N} f(x) dx \approx f(0) + \sum_{i_1=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_{i_1}}(0) \int_{C_N} x_{i_1} dx + \dots,$$

wobei die Monome x_{i_1}, \dots, x_{i_s} exakt integriert werden können.

3.2 Produktregeln

Zwei Faktoren

Sei $B = B_1 \times B_2$ mit $B_1 \subseteq \mathbb{R}^{n_1}$ und $B_2 \subseteq \mathbb{R}^{n_2}$ und seien

$$Q_{n_1}^{(1)} f_1 := \sum_{i_1=1}^{n_1} c_{i_1}^{(1)} f_1(x_{i_1}^{(1)}) \quad \text{und} \quad Q_{n_2}^{(2)} f_2 := \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_2}^{(2)} f_2(x_{i_2}^{(2)})$$

Approximationen von

$$I_1 f_1 := \int_{B_1} f_1(x^{(1)}) dx^{(1)} \quad \text{und} \quad I_2 f_2 := \int_{B_2} f_2(x^{(2)}) dx^{(2)}$$

dann ist die Produktregel $Q_{n_1}^{(1)} \times Q_{n_2}^{(2)}$ gegeben als

$$(Q_{n_1}^{(1)} \times Q_{n_2}^{(2)}) f := \sum_{i_1=1}^{n_1} \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_1}^{(1)} c_{i_2}^{(2)} f(x_{i_1}^{(1)}, x_{i_2}^{(2)})$$

Satz 8. *Integriert $Q_{n_1}^{(1)}$ die Funktion f_1 exakt über B_1 und $Q_{n_2}^{(2)}$ die Funktion f_2 exakt über B_2 , dann integriert $(Q_{n_1}^{(1)} \times Q_{n_2}^{(2)})$ das Produkt*

$$f(x_{i_1}^{(1)}, x_{i_2}^{(2)}) = f(x_{i_1}^{(1)}) f(x_{i_2}^{(2)}) \quad \text{mit} \quad x^{(1)} \in B_1 \quad \text{und} \quad x^{(2)} \in B_2$$

exakt über $B = B_1 \times B_2$.

Beweis.

$$\begin{aligned} If &= \int_{B_1 \times B_2} f(x_{i_1}^{(1)}, x_{i_2}^{(2)}) dx^{(1)} dx^{(2)} = \int_{B_1} \int_{B_2} f(x_{i_1}^{(1)}) f(x_{i_2}^{(2)}) dx^{(1)} dx^{(2)} = \\ &= \int_{B_1} f(x_{i_1}^{(1)}) dx^{(1)} \int_{B_2} f(x_{i_2}^{(2)}) dx^{(2)} = \sum_{i_1=1}^{n_1} c_{i_1}^{(1)} f(x_{i_1}^{(1)}) \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_2}^{(2)} f(x_{i_2}^{(2)}) = \\ &= \sum_{i_1=1}^{n_1} \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_1}^{(1)} c_{i_2}^{(2)} f(x_{i_1}^{(1)}, x_{i_2}^{(2)}) = (Q_{n_1}^{(1)} \times Q_{n_2}^{(2)}) f \quad \square \end{aligned}$$

Beispiel 6. *Sei $B = C_2 = [-1, 1] \times [-1, 1]$, $Q_{n_1}^{(1)}, Q_{n_2}^{(2)}$ die Gauß-Legendre-Formeln G_{n_1}, G_{n_2} mit Exaktheitsgrad $d_1 = 2n_1 - 1$ und $d_2 = 2n_2 - 1$, dann ist $G_{n_1} \times G_{n_2}$ exakt für alle Polynome*

$$P \in \text{span}\{x_1^{k_1} x_2^{k_2} : k_1 \leq 2n_1 - 1, k_2 \leq 2n_2 - 1\}$$

also insbesondere für alle Polynome $P \in \mathbb{P}^2$ mit totalem Grad $d \leq 2 \min\{n_1, n_2\} - 1$.

Allgemeinfall

Sei $B = B_1 \times \dots \times B_k$ und seien Quadraturformeln

$$Q_{n_k}^{(k)} = \sum_{i_k=1}^{n_k} c_{i_k}^{(k)} f_k(x_{i_k}^{(k)}) \quad \text{für} \quad k = 1, 2, \dots, K$$

für die Integranden

$$I_k f_k = \int_{B_k} f_k(x^{(k)}) dx^{(k)} \quad \text{für} \quad k = 1, 2, \dots, K$$

dann ist die allgemeine Produktformel

$$(Q_{n_1}^{(1)} \times \dots \times Q_{n_k}^{(k)})f := \sum_{i_1=1}^{n_1} \dots \sum_{i_k=1}^{n_k} c_{i_1}^{(1)} \dots c_{i_k}^{(k)} f(x_{i_1}^{(1)}, \dots, x_{i_k}^{(k)})$$

exakt für

$$f(x_{i_1}^{(1)}, \dots, x_{i_k}^{(k)}) = f(x_{i_1}^{(1)}) \dots f(x_{i_k}^{(k)}) \quad \text{mit } x^{(k)} \in B_k \text{ für } k = 1, \dots, K$$

falls $Q_{n_k}^{(k)}$ exakt ist für f_k über $B_k, k = 1, \dots, K$.

Die Zahl der Stützstellen $n = n_1 \cdot \dots \cdot n_k$ wächst sehr schnell an, falls $N = K$ und $Q_{n_k}^{(k)}$ eindimensionale Quadraturformeln sind (Fluch der Dimension).

Beispiel 7. Dimension $N = 30$, Zahl der Stützstellen in einer Dimension $n_k = 10 \Rightarrow$ Gesamtzahl der Stützstellen $n = 10^{30}$. Erhöht sich die Dimension um Eins, wächst die Zahl der Stützstellen um einen Faktor 10 an.

Iterierte Integrale

Sei

$$If = \int_B f(x) dx = \int_{B_1} \int_{B_2(x^{(1)})} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(2)} dx^{(1)} = \int_{B_1} f_1(x^{(1)}) dx^{(1)},$$

wobei

$$f_1(x^{(1)}) := \int_{B_2(x^{(1)})} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(2)}$$

Sei weiterhin $\psi_{x^{(1)}}$ für jedes $x^{(1)} \in B_1$ eine stetig differenzierbare, bijektive Transformation von \bar{B}_2 auf $B_2(x^{(1)})$, für die die Jacobi-Matrix $J_{x^{(1)}}$ regulär auf \bar{B}_2 ist. Dann ist

$$Q_{n_1}^{(1)} f_1 = \sum_{i_1=1}^{n_1} c_{i_1}^{(1)} f_1(x_{i_1}^{(1)})$$

eine Quadraturformel für

$$I_1 f_1 = \int_{B_1} f_1(x^{(1)}) dx^{(1)}.$$

Damit kann If approximiert werden durch

$$If \approx \sum_{i_1=1}^{n_1} c_{i_1}^{(1)} f_1(x_{i_1}^{(1)}) = \sum_{i_1=1}^{n_1} c_{i_1}^{(1)} \int_{B_2(x^{(1)})} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(2)}.$$

Ist weiterhin

$$Q_{n_2}^{(2)} f_2 = \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_2}^{(2)} f_2(x_{i_2}^{(2)})$$

eine Quadraturformel für

$$I_2 f_2 = \int_{\bar{B}_2} f_2(x^{(2)}) dx^{(2)},$$

dann kann jedes der n_1 Integrale

$$\int_{B_2(x^{(1)})} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(2)} \quad \text{für } i_1 = 1, \dots, n_1$$

durch die Quadraturformel $Q_{n_2}^{(2)}$ transformiert auf $B_2(x_{i_1}^{(1)})$ approximiert werden

$$\int_{B_2(x^{(1)})} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(2)} \approx \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_2}^{(2)} \left| \det J\psi_{x_{i_1}^{(1)}}(x_{i_2}^{(2)}) \right| f\left(x_{i_1}^{(1)}, \psi_{x_{i_1}^{(1)}}(x_{i_2}^{(2)})\right)$$

und damit ist

$$If \approx \sum_{i_1=1}^{n_1} \sum_{i_2=1}^{n_2} c_{i_1}^{(1)} c_{i_2}^{(2)} \left| \det J\psi_{x_{i_1}^{(1)}}(x_{i_2}^{(2)}) \right| f\left(x_{i_1}^{(1)}, \psi_{x_{i_1}^{(1)}}(x_{i_2}^{(2)})\right)$$

Beispiel 8. (Integration über ein Dreieck)

$$If = \int_0^1 \int_{-x^{(1)}}^{x^{(1)}} f(x^{(1)}, x^{(2)}) dx^{(1)} dx^{(2)}$$

Wähle $Q_n^{(1)}$ und $Q_n^{(2)}$ als zusammengesetzte Mittelpunktsregel $n \times M$ auf $[0, 1]$

$$(n \times M)f = \frac{1}{n} f\left(\frac{i - \frac{1}{2}}{n}\right)$$

Transformiere $[-x^{(1)}, x^{(1)}]$ durch eine affine Transformation

$$\psi x^{(1)} : \bar{x}^{(2)} \rightarrow x^{(1)}(2\bar{x}^{(2)} - 1).$$

Somit ist $\psi x^{(1)}(\bar{x}^{(2)}) = 2x^{(1)} \bar{x}^{(2)} - x^{(1)}$ unabhängig von $\bar{x}^{(2)}$ und

$$Q_{n^2} f = \frac{2}{n^3} \sum_{i_1=1}^n \left(i_1 - \frac{1}{2}\right) \sum_{i_2=1}^n f\left(\frac{i_1 - \frac{1}{2}}{n}, \frac{i_1 - \frac{1}{2}}{n} \frac{2i_2 - 1}{n}\right)$$

Gebietszerlegung

Zerlege $B = B_1 \cup \dots \cup B_L$ in disjunkte Teilgebiete. Sind

$$Q_{n_l}^{(l)} f = \sum_{i_l=1}^{n_l} c_{i_l}^{(l)} f(x_{i_l}^{(l)}) \quad \text{für } l = 1, \dots, L$$

Quadraturformeln für die Integrale

$$\int_{B_l} f(x) dx = Q_{n_l}^{(l)} f + E^{(l)}(f)$$

dann ist die zusammengesetzte Quadraturformel

$$(Q_{n_1}^{(1)} + \dots + Q_{n_L}^{(L)})f = \sum_{l=1}^L \sum_{i_l=1}^{n_l} c_{i_l}^{(l)} f(x_{i_l}^{(l)})$$

und der Fehler ist

$$(Q_{n_1}^{(1)} + \dots + Q_{n_L}^{(L)})f - If = E^{(1)}f + \dots + E_{(L)}f$$

Eine asymptotische Fehlerentwicklung und Konvergenzbeschleunigung ist nur möglich, wenn B und B_l sehr regulär sind (C_N, T_N) und immer die gleiche Quadraturformel angewandt wird.

3.3 Polynomiale Formeln

Mehrdimensionale Interpolation mit Polynomen

Der Polynomraum \mathbb{P}^N sei die Menge aller multivariaten Polynome mit N Variablen und reellen Koeffizienten. \mathcal{P}^n ist ein linearer Vektorraum über \mathbb{R} unendlicher Dimension.

Die multivariaten Monome sind die Funktionen $x_1^{d_1} \cdot x_2^{d_2} \cdot \dots \cdot x_N^{d_N}$ und werden geschrieben als

$$\mathbf{x}^{\mathbf{d}} \text{ mit } \mathbf{d} = (d_1, \dots, d_N) \in \mathbb{N}_0^N$$

Die Menge aller N -dimensionalen Monome

$$\{\mathbf{x}^{\mathbf{d}} : \mathbf{d} \in \mathbb{N}_0^N\}$$

ist eine Basis für \mathbb{P}^N , es gilt also für ein multivariates Polynom P

$$P = \sum_{j=1}^J a_j \mathbf{x}^{\mathbf{d}_j} \text{ mit } a_j \neq 0, j = 1, \dots, J$$

Der Grad eines Monoms $\mathbf{x}^{\mathbf{d}}$ ist

$$\deg \mathbf{x}^{\mathbf{d}} := \|\mathbf{d}\|_1 = d_1 + \dots + d_N$$

Der Grad eines allgemeinen Polynoms P ist dann

$$\deg P := \max\{\|\mathbf{d}_1\|_1, \dots, \|\mathbf{d}_J\|_1\}$$

und die Menge der Polynome vom maximalen Grad d

$$\mathbb{P}_d^N := \{P \in \mathbb{P}^N : \deg P \leq d\}$$

ist ein endlichdimensionaler linearer Unterraum von \mathbb{P}^N , da

$$\mathbb{P}_d^N = \text{span}\{\mathbf{x}^{\mathbf{d}} : \mathbf{d} \in \mathbb{N}_0^N, \|\mathbf{d}\|_1 \leq d\}$$

und

$$\dim \mathbb{P}_d^N = |\{\mathbf{x}^{\mathbf{d}}, |d| \leq d\}| = \binom{N+d}{N} =: \dim(d, N)$$

Beispiel 9. Für $\dim(d, N)$ gilt

	$d=1$	$d=5$	$d=10$	$d=15$
$N=1$	2	6	11	16
$N=2$	3	21	66	136
$N=5$	6	252	3003	15504
$N=10$	11	3003	184756	3268760

Polynominterpolation

Ziel: interpoliere eine gegebene Funktion f an n Punkten $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^N$ mit einem Interpolationspolynom $P \in \mathbb{P}^N$, sodass

$$P(\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i) \text{ für } i = 1, \dots, n$$

Ein solches Interpolationspolynom existiert genau dann, wenn die linearen Funktionale

$$\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \dots, \mathbf{x}_n^* : M \subset \mathbb{P}^N \rightarrow \mathbb{R} \text{ mit } \mathbf{x}_i^*(P) = P(\mathbf{x}_i) \text{ für } i = 1, \dots, n$$

linear unabhängig über dem Polynomraum M sind. Eindeutigkeit gilt wenn $\dim M = n$ ist. Nach dem Satz von Weierstraß lässt sich eine Funktion beliebig genau approximieren, wenn der Polynomgrad hoch genug ist. Mit Hilfe von Jackson-Ungleichungen lässt sich zeigen, dass auch niedrige Grade möglich sind, wenn f glatt ist.

In einer Dimension ist die natürliche Wahl $M = \mathbb{P}_{n-1}^1$ und es gilt immer Existenz und Eindeutigkeit für alle $n \in \mathbb{N}$. In N Dimensionen gilt für die Wahl von $M = \mathbb{P}_d^N$ Existenz nur für $n \in \{\dim(d, N) : d \in \mathbb{N}_0\}$ und Eindeutigkeit nur, falls $\mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_n^*$ nicht linear abhängig über \mathbb{P}_d^N sind.

Beispiel 10. Sei $x_1 = (0, 0), x_2 = (1/2, 1/2)$ und $x_3 = (1, 1)$ sowie $M = \mathbb{P}_1^2 = \text{span}\{1, x_1, x_2\}$. Das Interpolationsproblem ist im allgemeinen nicht eindeutig lösbar, denn alle Polynome der Form $P + \lambda(x_1 - x_2) \in \mathbb{P}_1^2, \lambda \in \mathbb{R}$ erfüllen die Interpolationsbedingungen.

Aus diesem Grund ist der Interpolationsansatz in höheren Dimensionen nicht praktikabel.

Interpolatorische Formeln

Die Fehlerschranke

$$|Q_n f - I_w f| \leq \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |c_i| \right) e_D^*(f)$$

gilt für $D \geq n - 1$ auch wenn die Quadraturformel Q_n nicht die Interpolationsbedingungen erfüllt. Der Exaktheitsgrad einer N -dimensionalen Quadraturformel ist dabei D , falls

- $Q_n x^d = I_w x^d$ für alle $d \in \mathbb{N}_0^N$ mit $\|d\|_1 \leq D$ und
- $Q_n x^d \neq I_w x^d$ für mindestens ein $d \in \mathbb{N}_0^N$ mit $\|d\|_1 = D + 1$

Momentengleichungen

Für gegebene n Stützstellen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ bedeutet ein Exaktheitsgrad $d = D$, dass die Gewichte c_1, \dots, c_n in der Quadraturformel $Q_n f = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$ so gewählt werden, dass

$$Q_n P_d = I_w P_d \text{ für alle } P_d \in \mathbb{P}_d^N$$

Da I_w und Q_n lineare Funktionale sind und P_d^N endlichdimensional, reicht es aus zu zeigen

$$Q_n b_j = I_w b_j \text{ für } j = 1, 2, \dots, \dim(d, N)$$

für eine Basis $\{b_1, \dots, b_{\dim(d, N)}\}$ von \mathbb{P}_d^N . Die Momentengleichungen sind dann

$$\sum_{i=1}^n c_i b_j(\mathbf{x}_i) = I_w b_j \text{ für } j = 1, 2, \dots, \dim(d, N)$$

und eine Quadraturformel heißt interpolatorisch, falls die Gewichte die (eindeutige) Lösung der Momentengleichungen sind.

Beispiel 11. Wir betrachten das Integral

$$I f = \int_{T_2} f(x_1, x_2) d_{x_1} d_{x_2}$$

wobei T_2 das Einheitsdreieck bestehend aus den Punkten $v_1 = (0, 0), v_2 = (0, 1)$ und $v_3 = (1, 0)$ ist. Wir verwenden nun eine 1-Punkt Quadraturformel mit $\mathbf{x}_1 = (1/3, 1/3)$ und als Basis $\{b_1, b_2, b_3\}$ von \mathbb{P}_1^2 die Monome

$$b_1(x_1, x_2) = 1, b_2(x_1, x_2) = x_1 \text{ und } b_3(x_1, x_2) = x_2.$$

Dann gilt

$$Ib_1 = 1/2 \text{ und } Ib_2 = Ib_3 = 1/6$$

sowie

$$b_1(\mathbf{x}_1) = 1 \text{ und } b_2(\mathbf{x}_1) = b_3(\mathbf{x}_1) = 1/3.$$

Die eindeutige Lösung der Momentengleichungen

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3}c_1 &= \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3}c_1 &= \frac{1}{6} \end{aligned}$$

ist dann $c_1 = 1/2$ und die Quadraturformel

$$Q_1 f = \frac{1}{2} f(1/3, 1/3)$$

ist interpolatorisch.

Eindeutigkeit

Sind $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \dots, \mathbf{x}_n^* : \mathbb{P}_d^N \rightarrow \mathbb{R}$ lineare Funktionale mit $\mathbf{x}_i^*(P) = P(\mathbf{x}_i)$ für $i = 1, \dots, n$, dann sind die Momentengleichungen

$$\sum_{i=1}^n c_i x_i^*(b_j) = I_w b_j \text{ für } j = 1, 2, \dots, \dim(d, N)$$

nur dann eindeutig lösbar, falls $I_w \in \text{span}\{x_1^*, \dots, x_n^*\}$ und dann gilt

$$I_w = \sum_{i=1}^n c_i x_i^* \text{ über } \mathbb{P}_d^N$$

Die Gewichte c_1, \dots, c_n sind über die Stützstellen x_1, \dots, x_n genau dann eindeutig bestimmt, wenn die linearen Funktionale x_1^*, \dots, x_n^* linear unabhängig über \mathbb{P}_d^N sind. Falls x_1^*, \dots, x_n^* linear abhängig sind, dann gilt zum Beispiel

$$x_n^* = \sum_{i=1}^{n-1} d_i x_i^* \text{ über } \mathbb{P}_d^N$$

und damit

$$I_w = \sum_{i=1}^{n-1} c_i x_i^* + c_n \sum_{i=1}^{n-1} d_i x_i^* = \sum_{i=1}^{n-1} (c_i + c_n d_i) x_i^* \text{ über } \mathbb{P}_d^N$$

Falls Q_n nicht interpolatorisch ist, dann existiert also eine Quadraturformel Q_{n-1} mit $n-1$ Stützstellen, die die gleichen Momentengleichungen erfüllt. Falls Q_{n-1} ebenfalls nicht interpolatorisch ist, existiert ein Q_{n-2} usw. Aus Effizienzgründen wählt man daher immer eine interpolatorische Formel $Q_{n'}$ mit $n' < n$.

Existenz

Ziele:

- n sollte so klein wie möglich sein (und maximal so groß wie \mathbb{P}_d^N)

- die Stützstellen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ sollen innerhalb des Integrationsgebiets liegen
- die Gewichte c_1, \dots, c_n sollen nichtnegativ sein (wenn die Gewichtsfunktion w zulässig ist)

Satz 9. (Tschackaloff) Sei w eine zulässige Gewichtsfunktion und das Gebiet $B \subseteq \mathbb{R}^N$ beschränkt und abgeschlossen, dann existieren für jedes $D \geq 0$ $n = \dim \mathbb{P}_d^N$ Stützstellen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in B$ und positive Gewichte c_1, \dots, c_n , sodass die zugehörige Quadraturformel Q_n für das Integral I_w vom Grad D ist.

Der Beweis zu diesem Theorem ist außer für $w \equiv 1$ nicht konstruktiv und Konstruktionen verwenden in der Praxis diesen Satz nicht.

Satz 10. Ist w eine zulässige Gewichtsfunktion und das Gebiet $B \subseteq \mathbb{R}^N$, dann erfüllt die Zahl n der Stützstellen jeder interpolatorischen Quadraturformel Q_n für das Integral I_w mit Exaktheitsgrad $D \geq 0$

$$\dim \mathbb{P}_{\lfloor D/2 \rfloor}^N \leq n \leq \dim \mathbb{P}_D^N.$$

Der Beweis geht wieder über das Quadrat von Polynomen.

Satz 11. Jede interpolatorische Quadraturformel mit Exaktheitsgrad $D \geq 0$ erfüllt

$$|Q_n f - I_w f| \leq \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |c_i| \right) e_D^*(f)$$

mit

$$|e_D^*(f)| = \inf \{ \|P_d - f\|_\infty, P_d \in \mathbb{P}_D^N \}$$

und, falls alle Gewichte nichtnegativ sind,

$$|Q_n f - I_w f| \leq (\|w\|_1 + I_w) e_D^*(f)$$

Der Beweis funktioniert wie im eindimensionalen Fall. Damit gilt $Q_{n_D} f \rightarrow I_w f$ und $e_D^*(f) \rightarrow 0$ für $D \rightarrow \infty$ für alle stetigen Funktionen $f \in C(B)$ auf einem kompakten Gebiet B . Weiterhin ist $e_D^*(f) \leq e_{D-1}^*(f)$ für $D \in \mathbb{N}$.

Konstruktionen

Die Momentengleichungen

$$\sum_{i=1}^n c_i b_j(\mathbf{x}_i) = I_w b_j \text{ für } j = 1, 2, \dots, \dim(d, N)$$

müssen also nach $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ und c_1, \dots, c_n gelöst werden. Es handelt sich dabei um $\dim(d, N)$ nichtlineare Gleichungen mit $n(N+1)$ Unbekannten.

Beispiel 12. Es gibt für

- $N = 5, D = 5, n = 10$: $\dim(5, 5) = \binom{10}{5} = 252$ Gleichungen mit 60 Unbekannten
- $N = 10, D = 5, n = 100$: $\dim(5, 10) = \binom{15}{10} = 3003$ Gleichungen mit 1100 Unbekannten

Die Gleichungen sind in der Praxis für höhere Dimensionen und Exaktheitsgrade zu komplex zu lösen. Sie können aber durch Nutzen von Symmetrie vereinfacht werden. Die Integrationsgebiete in höheren Dimensionen (Würfel C_N , Kugel S_N , Simplex T_N , ...) weisen in der Regel einen hohen Grad an Symmetrie auf.

Beispiel 13. Das Intervall $[-1, 1]$ ist symmetrisch bezüglich der 0. Die Stützstellen aller Quadraturformeln für $w \equiv 1$ sind damit ebenfalls symmetrisch: für $x_i \in Q_n$ ist auch $x_j = -x_i \in Q_n$ und die Gewichte c_i und c_j sind gleich.

Symmetrie bedeutet hierbei, dass das Gebiet B invariant bezüglich bijektiver linearer Transformationen G auf \mathbb{R}^N ist, also

$$G(B) = B$$

Ist B invariant bezüglich zweier Transformationen G_1, G_2 , dann ist

$$G_2(G_1(B)) = B,$$

B ist also invariant bezüglich $G_2 \circ G_1$. Ist B invariant bezüglich G , dann auch bezüglich G^{-1} . Die Menge \mathcal{G} aller Symmetrie-Transformationen eines Gebiets G bildet eine Gruppe bezüglich der Hintereinanderausführung \circ . Eine Funktion g auf B heißt dabei \mathcal{G} -invariant, falls

$$g \circ G^{-1} = g \text{ für alle } G \in \mathcal{G}$$

Ein Integraloperator I_w ist \mathcal{G} -invariant, falls B und w invariant bezüglich \mathcal{G} sind.

Beispiel 14.

- Das Einheitsintervall $[-1, 1]$ ist invariant bezüglich der Gruppe \mathcal{Z}_2 bestehend aus $G_1: x \mapsto x$ und $G_2: x \mapsto -x$. Die Legendre- und Tschebyscheff-Gewichtsfunktionen sind \mathcal{Z}_2 -invariant auf $[-1, 1]$.
- Der Würfel $C_N = [-1, 1]^N$ ist invariant bezüglich

$$G: (x_1, \dots, x_N) \mapsto (s_1 x_{\pi(1)}, s_2 x_{\pi(2)}, \dots, s_N x_{\pi(N)}),$$

wobei π eine Permutation von $\{1, \dots, N\}$ ist und $(s_1, \dots, s_N) \in \{-1, 1\}^N$. Für $N = 2$ ist $\mathcal{G} = \mathcal{D}_4$ die dihedrale Gruppe. In allgemeinen Dimensionen besteht \mathcal{G} aus $N! \cdot 2^N$ Transformationen. Ein Integraloperator $I_w f = \int_{C_N} w(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$ ist \mathcal{G} -invariant, falls die Gewichtsfunktion die Darstellung

$$w(x_1, \dots, x_N) = \bar{w}(x_1) \cdot \dots \cdot \bar{w}(x_N),$$

besitzt, wobei \bar{w} eine \mathcal{Z}_2 -invariante Gewichtsfunktion ist.

Orbits und Generatoren

Eine Quadraturformel ist invariant bezüglich \mathcal{G} , falls

1. die Menge der Stützstellen $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ \mathcal{G} -invariant ist, also

$$G(\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}) = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \text{ für alle } G \in \mathcal{G}$$

2. alle Paare von Stützstellen \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j , die durch eine Transformation $G \in \mathcal{G}$ aufeinander abgebildet werden, also $\mathbf{x}_i = G(\mathbf{x}_j)$, das gleiche Gewicht $c_i = c_j$ haben

Die Menge

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}_i) := \{G(\mathbf{x}_i) : G \in \mathcal{G}\}$$

heißt \mathcal{G} -Orbit von \mathbf{x}_i . Alle Stützstellen im gleichen Orbit haben die gleichen Gewichte. Es ist

$$\mathcal{G}(x_i) \subseteq \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \text{ für alle } i = 1, \dots, n.$$

Eine Teilmenge $\{\mathbf{x}_{i_1}, \dots, \mathbf{x}_{i_k}\} \subset \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ heißt Generatormenge für Q_n genau dann wenn

$$\mathcal{G}(x_{i_j}) \cap \mathcal{G}(x_{i_l}) = \emptyset \text{ für } j \neq l \text{ und } \mathcal{G}(x_{i_1}) \cup \dots \cup \mathcal{G}(x_{i_k}) = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}.$$

Dann existiert für jede Stützstelle $\mathbf{x}_i \in \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ ein eindeutiger Generator $\mathbf{x}_{i_l} \in \{\mathbf{x}_{i_1}, \dots, \mathbf{x}_{i_k}\}$ und eine (nicht notwendigerweise eindeutige) Transformation $G \in \mathcal{G}$, sodass $\mathbf{x}_i = G(\mathbf{x}_{i_l})$.
 Falls $\{\mathbf{x}_{i_1}, \dots, \mathbf{x}_{i_k}\}$ eine Generatormenge ist, dann gilt

$$Q_n f = \sum_{i=1}^n c_i f(\mathbf{x}_i) = \sum_{l=1}^k c_{i_l} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathcal{G}(\mathbf{x}_{i_l})} f(\mathbf{x}_j)$$

Satz 12. (Sobolev) Ist ein Integraloperator I_w invariant bezüglich einer Menge von Transformationen \mathcal{G} und eine Quadraturformel Q_n für I_w ebenfalls invariant bezüglich \mathcal{G} , dann ist

$$Q_n P_d = I P_d \text{ für alle } P_d \in \mathbb{P}_d^N$$

genau dann wenn

$$Q_n P_d = I P_d \text{ für alle } P_d \in \mathbb{P}_d^N(\mathcal{G}),$$

wobei $\mathbb{P}_d^N(\mathcal{G})$ der Raum der \mathcal{G} -invarianten Polynome von Maximalgrad d ist.

Damit können die Momentengleichungen reduziert werden auf

$$\sum_{i=1}^n c_i b_j = I_w b_j \text{ für } j = 1, 2, \dots, \dim \mathbb{P}_d^N(\mathcal{G}),$$

wobei $\{b_j, j = 1, \dots, \dim \mathbb{P}_d^N(\mathcal{G})\}$ eine Basis für $\mathbb{P}_d^N(\mathcal{G})$ ist.

Beispiel 15.

- Die \mathcal{Z}_2 -invarianten Polynome in $[-1, 1]$ können als Polynome in x^2 ausgedrückt werden. Damit ist $\{1, x^2, x^4, \dots, x^{2\lfloor d/2 \rfloor}\}$ eine Basis für $\mathbb{P}_d^1(\mathcal{Z}_2)$
- Die Menge der \mathcal{D}_4 -invarianten Polynome über C_2 besteht aus allen Polynomen mit geraden Exponenten, die symmetrisch in x_1 und x_2 sind, beispielsweise $x_1^2 + x_2^2$ oder $x_1^2 x_2^2$. Man kann zeigen, dass ein Polynom genau dann \mathcal{D}_4 -invariant ist, wenn es sich als Polynom in $x_1^2 + x_2^2$ oder $x_1^2 x_2^2$ darstellen lässt. Der Raum $\mathbb{P}_d^2(\mathcal{D}_4)$ hat damit als Basis in

- $d = 0, 1 : \{1\}$
- $d = 2, 3 : \{1, x_1^2 + x_2^2\}$
- $d = 4, 5 : \{1, x_1^2 + x_2^2, x_1^2 x_2^2, (x_1^2 + x_2^2)^2\}$
- usw.

Konsistenzbedingungen

Die Momentengleichungen können mit der Orbitdarstellung auch geschrieben werden als

$$Q_n b_j = \sum_{l=1}^k |\mathcal{G}(x_{i_l})| c_{i_l} b_j(\mathbf{x}_{i_l}) = I b_j \text{ für } j = 1, \dots, \dim \mathbb{P}_d^N(\mathcal{G})$$

wobei k die Zahl der Generatoren in Q_n und $|\mathcal{G}(x_{i_l})|$ die Zahl der Punkte im Orbit $\mathcal{G}(x_{i_l})$ von \mathbf{x}_{i_l} sind. Damit führt jeder Orbit das Gewicht c_{i_l} und, abhängig vom Generator, eine Reihe von Parametern für \mathbf{x}_{i_l} ein.

Beispiel 16.

- $B = [-1, 1]$, \mathcal{Z}_2 -invariante Quadraturformel:

Typ	Generator	$ \mathcal{G}(x_{i_l}) $	# Unbekannte	Unbekannte
1	0	1	1	c
2	$a, a > 0$	2	2	c, a

- $B = C_2, \mathcal{D}_4$ -invariante Quadraturformel:

Typ	Generator	$ \mathcal{G}(x_{i_i}) $	# Unbekannte	Unbekannte
1	(0, 0)	1	1	c
2	(a, 0)	4	2	c, a
3	(a, a)	4	2	c, a
4	(a, b)	8	3	c, a, b

Die Typen von Generatoren können durch $m \in \{1, 2, \dots, M\}$ indiziert werden, wobei M von \mathcal{G} abhängt. Es sei K_m die Zahl an Generatoren vom Typ m , dann heißt der Vektor

$$K = (K_1, \dots, K_M)$$

Struktur von Q_n .

Beispiel 17.

- $B = [-1, 1], \mathcal{G} = \mathcal{Z}_2$: eine symmetrische Quadraturformel mit 7 Punkten hat die Struktur $K = (1, 3)$.
- $B = C_2, \mathcal{G} = \mathcal{D}_4$: eine Produktquadraturformel mit 3 Punkten pro Richtung hat die Struktur $K = (1, 1, 1, 0)$.

Die Konsistenzbedingungen sind Ungleichungsbedingungen an K_1, \dots, K_M , sodass die Momentengleichungen lösbar sind.

Beispiel 18. Sei $B = [-1, 1]$ und $\mathcal{G} = \mathcal{Z}_2$: eine Basis von $\mathbb{P}_d^1(\mathcal{Z}_2)$ ist $\{1, x^2, \dots, x^{2\lfloor d/2 \rfloor}\}$. Damit erhält man $\lfloor d/2 \rfloor + 1$ Momentengleichungen. Die Zahl der Unbekannten in einer Quadraturformel mit Struktur (K_1, K_2) ist $K_1 + 2K_2$. Die Konsistenzbedingungen sind damit

$$\begin{aligned} K_1 &\leq 1 \\ K_1 + 2K_2 &\geq \lfloor d/2 \rfloor + 1 \end{aligned}$$

Der Ansatz ist nun: finde für ein gegebenes Gebiet und gegebenen Exaktheitsgrad die Struktur K , die die Konsistenzbedingungen erfüllt, sodass die Zahl der Stützstellen minimal ist \Rightarrow ganzzahliges Optimierungsproblem

Beispiel 19. Sei $B = [-1, 1], \mathcal{G} = \mathcal{Z}_2$ und Grad $D = 5$. Die Struktur ist wieder (K_1, K_2) und die Zahl der Stützstellen $n = K_1 + 2K_2$. Es erfüllt bereits $K = (1, 1)$ die Konsistenzbedingungen und $n = 3$ ist somit minimal. Die Momentengleichungen lauten nun

$$\begin{aligned} c_1 + 2c_2 &= 2 \\ 2c_2a^2 &= 2/3 \\ 2c_2a^4 &= 2/5 \end{aligned}$$

und somit ist $a^2 = 3/5$ und damit $a = \sqrt{3/5}$, sowie $c_1 = 8/9$ und $c_2 = 5/9$. Man erhält die bekannte Gauß-Quadraturformel

$$Q_3f = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{3/5}\right)$$

3.4 Dünne Gitter

4 Literatur

1. Davis, Rabinowitz: Methods for Numerical Integration, 2nd ed, Dover Publications, 2007
2. Krylov, Stroud: Approximate Calculation of Integrals, Dover Publications, 2006
3. Krommer, Ueberhuber: Numerical Integration on Advanced Computer Systems, Springer, 1994
4. Evans: Practical Numerical Integration, J. Wiley & Sons, 1993
5. Krommer, Ueberhuber: Computational Integration, SIAM, 1987