Numerische Mathematik

Bernd Simeon

Skriptum zur Vorlesung im Sommersemester 2009

TU München, Zentrum Mathematik

1. Numerische Quadratur
2. Symmetrisches Eigenwertproblem
3. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen
4. Iterative Verfahren für große, dünnbesiedelte Matrizen

Literatur:

Deuflhard/Hohmann: Numerische Mathematik I,
4. Auflage; Walter de Gruyter, Berlin 2008
Deuflhard/Bornemann: Numerische Mathematik II,
3. Auflage; Walter de Gruyter, Berlin 2008
Freund/Hoppe: Stoer/Bulirsch, Numerische Mathematik 1,
10. Auflage, Springer 2007
Quarteroni/Sacco/Saleri: Numerische Mathematik II; Springer, Berlin 2002

Vorwort

Dieses Skriptum fasst den Stoff der Vorlesung *Numerische Mathematik* für Studierende des Bachelorstudiengangs Mathematik an der TU München zusammen. Es ist zum *aktiven Arbeiten* gedacht, d.h. es enthält bewußt immer wieder Lücken und Leerzeilen, die in der Vorlesung mit Inhalt und Skizzen gefüllt werden.

Bei der Stoffauswahl und -darstellung habe ich an vielen Stellen auf erprobte Standardwerke zurückgegriffen. Neben den bekannten Büchern von Stoer/Bulirsch und Deuflhard/Hohmann sowie Deuflhard/Bornemann ist hier vor allem auch das Skriptum Numerische Mathematik I/II von Ch. Reinsch als ausgezeichnete Referenz zu nennen.

München/Garching, im April 2009 Bernd Simeon

Kapitel 1

Numerische Quadratur

Unter numerischer Quadratur versteht man die Berechnung des bestimmten Integrals

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

Der Name stammt von der "Quadratur des Kreises", d.h. dem Versuch, die Zahl π über die Flächenberechnung eines Quadrats zu bestimmen. Falls keine geschlossene (analytische) Integration möglich ist, benötigt man numerische Verfahren.

Numerische Verfahren verlangen Integranden, die hinreichend oft differenzierbar ("glatt") sind, d.h. $f \in C^k[a,b]$ mit k möglichst groß. Bei Unstetigkeit in $x = \tau$:

$$\text{Zerlegung} \quad \int_a^b f\ dx = \int_a^\tau f\ dx + \int_\tau^b f\ dx\,.$$

Die Verfahren basieren auf *Quadraturformeln*

$$J(f) := \sum_{i=0}^{n} g_i f(x_i) \approx I(f)$$

mit *Gewichten* g_i und *Stützstellen* x_i.

Anforderungen an Quadraturformeln

Das Integral ist ein lineares, positives Funktional auf $C[a, b]$:

$I(\alpha f + \beta g) = \alpha I(f) + \beta I(g)$, und für $f \geq 0 \implies I(f) \geq 0$

Zusätzlich: I additiv bez. Zerlegung $[a, b] = [a, \tau] \cup [\tau, b]$ mit $a < \tau < b$.

Quadraturformel J soll analoge Eigenschaften haben!

- Forderung $g_i > 0$, d.h. positive Gewichte. Damit gilt:

  $f \geq 0 \implies J(f) \geq 0$

  Weiteres Argument: Fehlerverstärkung für negative g_i

  $$|\Delta f(x_i)| \leq \epsilon \implies \left|\Delta \sum g_i f(x_i)\right| \leq \epsilon \sum |g_i|$$

  g_i positiv: $\sum |g_i| = b - a$, d.h. minimal
  sonst: $\sum |g_i| > b - a$

- Forderung $\dfrac{1}{b-a} \sum g_i = 1$, d.h. konstante Integranden werden exakt integriert.

Übersicht zu Quadratformeln (hier nur sog. *interpolatorische Formeln*)

a) Stützstellen x_i äquidistant, $p(x)$ Polynom vom Grad n, das $f(x_i)$ für $i = 0, \ldots, n$ interpoliert.
   Ansatz $J(f) := \int\limits_a^b p(x)\, dx$ liefert Gewichte g_i.
   $\longrightarrow$ *Newton–Cotes–Formeln*, Abschnitt 1.1

   Skizze:

b) Wähle x_i, g_i für $i = 1, \ldots, n$, so dass

$$\int\limits_{-1}^{+1} p(x)\ dx = \sum_{i=1}^{n} g_i p(x_i)$$

für alle Polynome p *möglichst hohen Grades.*
$\longrightarrow$ *Gaußquadratur*, Abschnitt 1.2

c) x_i äquidistant, wende in jedem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$ elementare Quadraturformel an und summiere auf.
$\longrightarrow$ *Summenformeln*, Abschnitt 1.3, Basis für adaptive Verfahren

1.1 Newton–Cotes–Formeln

Ansatz mit Stützstellen x_i äquidistant, p Polynom interpoliert $f(x_i)$ (s.o.).

Trapezregel

$$J(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) \tag{1.1}$$

Also 2 Stützstellen $x_0 = a$, $x_1 = b$, Gewichte $g_0 = g_1 = (b-a)/2$, p linearer Interpolant zu $f(a), f(b)$.

Analyse des Fehlers $R(f) := I(f) - J(f)$ über Polynominterpolation:

$$\begin{aligned} R(f) &= \int\limits_a^b (f(x) - p(x))\ dx \ \text{ mit } \ f(x) - p(x) = \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi) \\ &= \frac{1}{2}\int\limits_a^b (x - x_0)(x - x_1)f''(\xi(x))\ dx \\ &= \frac{1}{2}\int\limits_0^h t(t-h)f''(\xi(t+a))\ dt \ \text{ für } \ t = x - a,\ h = b - a \end{aligned}$$

Da $t(t-h) \leq 0$ in $[0,h]$: Mittelwertsatz!

$$\Longrightarrow \quad R(f) = \frac{1}{2} f''(\xi^*) \int\limits_0^h t(t-h)\ dt = \frac{-1}{12} h^3 f''(\xi^*)$$

Also Fehler der Trapezregel $R(f) = I(f) - J(f) = \dfrac{-1}{12} h^3 f''(\xi^*)$.

Die Quadraturformel ist exakt für $\mathbb{P}_1$ (Polynome Grad ≤ 1).

Faßregel (nach Kepler)

$$J(f) = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \tag{1.2}$$

D.h. 3 Stützstellen $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$, $x_2 = b$;
p quadratischer Interpolant von $f(x_0),\ f(x_1),\ f(x_2)$.

Fehler $R(f) = -h^5 f^{(4)}(\xi) \cdot \frac{1}{2880}$, exakt für $\mathbb{P}_3$.

Die Verallgemeinerung führt auf die *Newton–Cotes–Formeln:*
p interpoliert $n+1$ äquidistante Stützstellen $a = x_0, x_1, \ldots, x_n = b$.

Aber: Ab $n = 8$ negative Gewichte, wenig empfehlenswert!

1.2 Gaußquadratur

Bei der Gaußquadratur wählt man x_i, g_i für $i = 1, \ldots, n$ so, dass

$$\int_{-1}^{+1} p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} g_i p(x_i) \tag{1.3}$$

für alle Polynome p *möglichst hohen Grades gilt.*

Beispiel 1.1: Wie sind x_1, x_2 und g_1, g_2 zu wählen, so dass

$$\int_{-1}^{+1} f(x)\, dx = g_1 f(x_1) + g_2 f(x_2)$$

für alle Polynome vom Grad kleiner gleich 3 gilt?

Lösung: Setze die Polynome 1, x, x^2 und x^3 ein, dann ergibt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} g_1 + g_2 &= \int_{-1}^{+1} 1\,dx = 2, & g_1 x_1 + g_2 x_2 &= \int_{-1}^{+1} x\,dx = 0, \\ g_1 x_1^2 + g_2 x_2^2 &= \int_{-1}^{+1} x^2\,dx = \frac{2}{3}, & g_1 x_1^3 + g_2 x_2^3 &= \int_{-1}^{+1} x^3\,dx = 0. \end{aligned}$$

Diese 4 Gleichungen mit 4 Unbekannten sind eindeutig lösbar: Multipliziere die Gleichung rechts oben mit x_1^2 und subtrahiere die Gleichung rechts unten:

$\Rightarrow \quad g_2 x_1^2 x_2 - g_2 x_2^3 = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1^2 = x_2^2$

$\Rightarrow \quad x_2 = -x_1$ (keine doppelte Stützstelle!) $\quad \Rightarrow \quad g_1 = g_2$

$$\Rightarrow \quad g_1 = g_2 = 1 \quad \Rightarrow \quad x_1 = -\sqrt{\frac{1}{3}},\ x_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}$$

Ergebnis: 2 Stützstellen x_1, x_2 und 2 Gewichte g_1, g_2 reichen aus!

Die Faßregel zum Vergleich ist auch exakt für $p \in \mathbb{P}_3$, benötigt aber 3 Stützstellen. Die eben hergeleitete Quadraturformel heißt *2-Punkt Gauß-Legendre-Regel.*

Die Betrachtung von $\int_{-1}^{+1} f(x)\,dx$ ist keine Beschränkung der Allgemeinheit, da

$$\int_a^b f(t)\,dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{+1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x\right)\,dx$$

(mit Transformation $t = \phi(x) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$)

Herleitung der n-Punkt Gauß-Legendre-Regel

Vorüberlegung: Die Quadraturformel (1.3) kann nicht exakt sein für alle Polynome $p \in \mathbb{P}_{2n}$ vom Grad $2n$, denn dafür ist $p(x) = (x - x_1)^2 \cdot (x - x_2)^2 \cdot \ldots \cdot (x - x_n)^2$ ein Gegenbeispiel:

$$\sum_{i=1}^{n} g_i p(x_i) = 0, \quad \text{aber} \quad \int_{-1}^{+1} p(x)\,dx > 0\ !$$

Also fordert man:

$$\int_{-1}^{+1} p(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} g_i p(x_i) \qquad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}. \tag{1.4}$$

Existieren Stützstellen und Gewichte, die diese Forderung erfüllen? Falls ja, dann ergibt sich aus (1.4) eine *notwendige Bedingung* für das Polynom $q(x) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n) \in \mathbb{P}_{2n-1}$ mit beliebigem $q \in \mathbb{P}_{n-1}$. Es muß gelten

$$\int_{-1}^{+1} q(x) \cdot \underbrace{(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)}_{=:L_n(x)}\,dx = 0 \qquad \forall q \in \mathbb{P}_{n-1}. \tag{1.5}$$

Interpretation der Formel (1.5): Definiere in $\mathbb{P}_n[-1,1]$ das *Skalarprodukt*

$$\langle q, r \rangle := \int_{-1}^{+1} q(x) \cdot r(x)\,dx$$

(vergleiche den *Hilbertraum* $L_2(-1,1)$), dann bedeutet (1.5), daß $L_n(x)$ bzgl. $\langle\,,\,\rangle$ *orthogonal* zu allen Polynomen $q \in \mathbb{P}_{n-1} \subset \mathbb{P}_n$ ist, $\langle q, L_n \rangle = 0$.

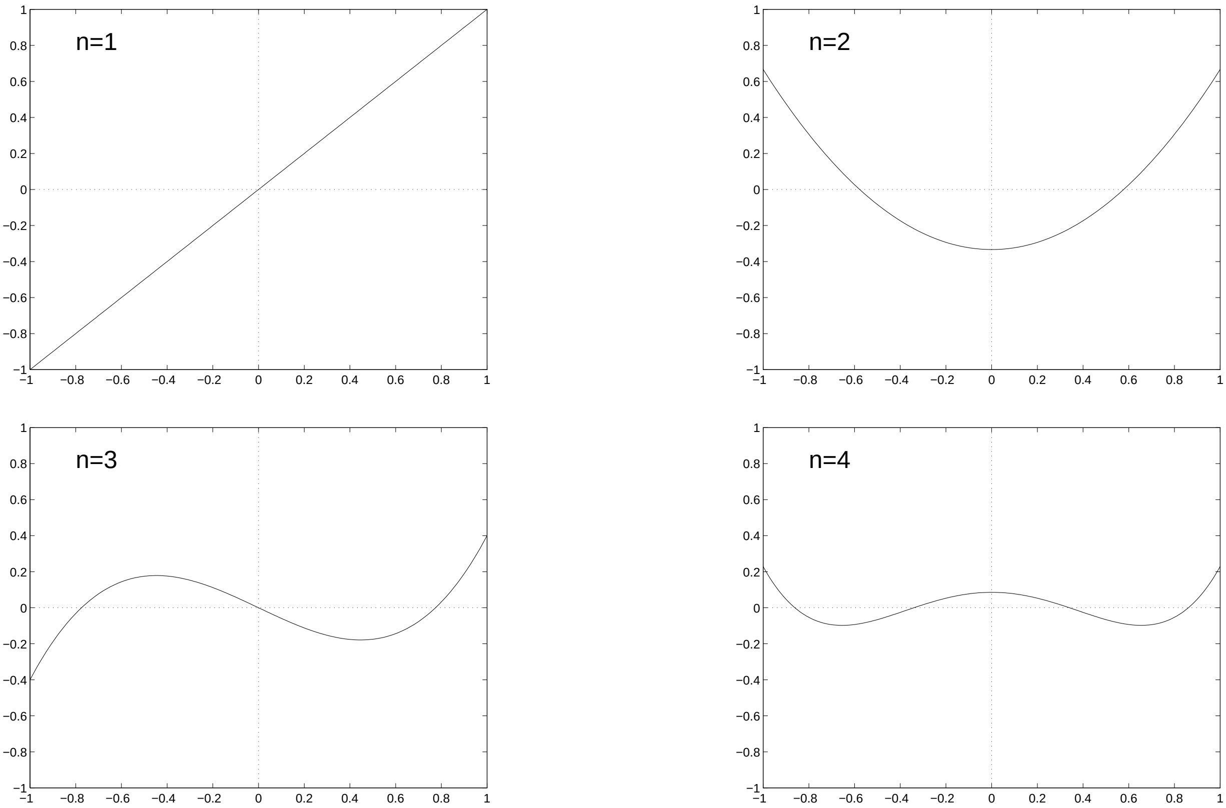
Das gesuchte L_n ist eindeutig gegeben (bis auf Normierungsfaktor) in Form des *Legendre-Polynoms* vom Grad n

$$L_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} D^n \left((x^2 - 1)^n \right) \tag{1.6}$$

Skizze der ersten Legendre-Polynome

$n = 1:\ L_1(x) = x,$ $\qquad n = 2:\ L_2(x) = x^2 - \frac{1}{3},$

$n = 3:\ L_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x,$ $\qquad n = 4:\ L_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$



Beweis der Orthogonalität:

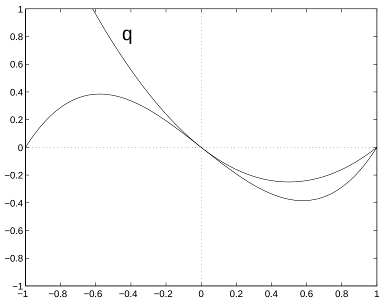
$$
\begin{aligned}
&\int_{-1}^{+1} q(x) D^n (x^2-1)^n \, dx \\
=\ & \underbrace{q(x) D^{n-1}(x^2-1)^n \Big|_{-1}^{1}}_{=0} - \int_{-1}^{+1} q'(x) D^{n-1}(x^2-1)^n \, dx = \ldots = \\
=\ & \underbrace{(-1)^{n-1}\, q^{(n-1)}(x)(x^2-1)^n \Big|_{-1}^{1}}_{=0} + (-1)^n \int_{-1}^{+1} \underbrace{q^{(n)}}_{\equiv 0}(x)(x^2-1)^n \, dx \\
=\ & 0,
\end{aligned}
$$

da $(x^2-1)^n = (x+1)^n(x-1)^n$ n-fache Nullstellen bei $x = \pm 1$ hat und damit $D^k(x^2-1)^n$ $n-k$-fache Nullstellen.

Charakterisierung der Stützstellen x_i: Die x_i als Nullstellen von L_n liegen alle im Inneren von $[-1,1]$ und sind einfach. L_n wechselt mindestens

n mal das Vorzeichen in $(-1,1)$, denn andernfalls gäbe es ein $q \in \mathbb{P}_{n-1}$, das überall das gleiche Vorzeichen wie L_n hat, so daß $\int_{-1}^{+1} q(x) \cdot L_n(x)\, dx > 0$ im Widerspruch zu (1.5).

Skizze zu $n = 3$: L_3 hat drei Vorzeichenwechsel in $(-1,1)$, s. obiges Bild. Für ein $\tilde{L}_3$, das in diesem Intervall nur einen Vorzeichenwechsel hat, ist rechts ein $q \in \mathbb{P}_2$ eingezeichnet, für das $\int q \cdot \tilde{L}_3 > 0$ ist.



Bestimmung der Gewichte g_i: Die g_i lassen sich über die *Lagrange-Polynome* (vergl. Polynominterpolation) vom Grad $n-1$,

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \qquad \text{für } j = 1, \ldots, n,$$

bestimmen, da

$$\int_{-1}^{1} l_j(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} g_i l_j(x_i) = g_j \qquad \text{für } j = 1, \ldots, n. \tag{1.7}$$

Der folgende Satz zeigt, daß diese Wahl der x_i und g_i tatsächlich die Forderung (1.4) erfüllt (bisher wurden nur notwendige, nicht hinreichende Bedingungen betrachtet):

Satz 1.1: *Seien die Stützstellen x_i, $i = 1, \ldots, n$, die Nullstellen des Legendre-Polynoms L_n aus (1.6) und die Gewichte g_i, $i = 1, \ldots, n$, nach (1.7) bestimmt. Dann gilt*

$$\int_{-1}^{1} p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} g_i p(x_i) \qquad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1},$$

und für $f \in C^{2n}[-1,1]$ gilt die Fehlerformel

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \sum_{i=1}^{n} g_i f(x_i) = D^{2n} f(\xi)\, \underbrace{\frac{1}{(2n)!} \int_{-1}^{1} L_n(x)^2\, dx}_{c_n}.$$

Beweis: Sei $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$ beliebig. Dann gilt

$$p(x) - \sum_{j=1}^{n} p(x_j) l_j(x) = q(x) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)$$

für ein $q \in \mathbb{P}_{n-1}$, da die linke Seite $x_1, \ldots, x_n$ als Nullstellen hat. Integration ergibt

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} p(x)\, dx &= \sum_{j=1}^{n} p(x_j) \int_{-1}^{1} l_j(x)\, dx + \underbrace{\int_{-1}^{1} q(x) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)\, dx}_{=0 \text{ nach } (1.5)} \\ &= \sum_{j=1}^{n} p(x_j) \cdot g_j, \end{aligned}$$

also ist die Quadraturformel exakt für alle $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$.

Zur Fehlerformel: Sei $f \in C^{2n}[-1, 1]$. $P \in \mathbb{P}_{2n-1}$ sei sein Interpolant zu den *doppelten* Nullstellen $x_1, \ldots, x_n$ (*Hermite-Interpolation* in $x_1, \ldots, x_n$). Dann ist

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \sum_{i=1}^{n} g_i f(x_i) &= \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \sum_{i=1}^{n} g_i P(x_i) \\ &= \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \int_{-1}^{1} P(x)\, dx, \quad \text{da } P \in \mathbb{P}_{2n-1}. \end{aligned}$$

Restgliedformel für Interpolation:

$$f(x) - P(x) = (x - x_1)^2 \cdot \ldots \cdot (x - x_n)^2 D^{2n} f(\xi) \frac{1}{(2n)!} = D^{2n} f(\xi) \frac{1}{(2n)!} L_n(x)^2$$

Mit Integration folgt die Aussage. □

Bemerkungen

- Teil 2 des Beweises zeigt, daß die Gaußquadratur auch als Interpolationsquadratur interpretiert werden kann, und zwar mit einem Hermiteansatz: p interpoliert f und f' in den Stützstellen x_i.
- Werte der Konstanten c_n:

n	1	2	3
c_n	$\frac{1}{3}$	0.0074	$6 \cdot 10^{-5}$

- *Aufgabe*: Zeige, daß die Gewichte g_i immer positiv sind!

Gaußquadratur mit Gewichtsfunktionen

Die oben gezeigte Herleitung der n-Punkt Gauß-Legendre-Regel läßt sich verallgemeinern auf Integrale

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

wobei $\omega \in C[a,b]$ eine positive *Gewichtsfunktion* ist. Wieder ist eine Quadraturformel

$$J(f) := \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

gesucht, die für Polynome möglichst hohen Grades exakt sein soll. Folgende Aussagen gelten (hier ohne Beweis, siehe dazu Stoer):

1. Es gibt eindeutig bestimmte normierte Polynome p_n, $n = 1, 2, \ldots,$ (mit $p_0 = 1$), die bezüglich des auf $C[a,b]$ definierten Skalarproduktes

   $$\langle f, g \rangle := \int_a^b \omega(x) f(x) g(x)\, dx$$

   orthogonal sind:

   $$\langle p_i, p_j \rangle = 0 \qquad \text{für } i \neq j.$$

   (Zum Gewicht $\omega(x) = 1$ sind dies die oben eingeführten Legendre-Polynome, zu $\omega(x) = e^{-x}$ die Laguerre-Polynome, etc.)

2. Die Nullstellen x_i, $i = 1, \ldots, n$, von p_n sind alle reell, einfach und im Inneren von $[a,b]$.

3. Die Gewichte w_i ergeben sich aus dem linearen Gleichungssystem

$$\underbrace{\begin{pmatrix} p_0(x_1) & \cdots & p_0(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n-1}(x_1) & \cdots & p_{n-1}(x_n) \end{pmatrix}}_{\text{invertierbar !}} \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle p_0, p_0 \rangle \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

denn

$$\sum_{i=1}^{n} w_i p_k(x_i) = \int_a^b \omega(x) p_k(x)\,dx = \langle p_k, p_0 \rangle \qquad \text{für } k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

4. Die so bestimmte Quadraturformel ist exakt für alle $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, Exaktheit für $\mathbb{P}_{2n}$ ist nicht erreichbar!

5. Fehlerformel für $f \in C^{2n}[a, b]$:

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\,dx - \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = D^{2n} f(\xi) \frac{1}{(2n)!} \langle p_n, p_n \rangle$$

Vor- und Nachteile der Gaußquadratur

+ sehr effizient (für n Funktionsauswertungen das genaueste Ergebnis)

− aber nicht adaptiv (Fehlerkontrolle?)

Modifikation: Gauß-Kronrod, bis Ordnung 512!

In der Praxis ist die Gaußquadratur vor allem bei 2- und 3-dimensionalen Integralen wichtig, z.B. in der *Methode der finiten Elemente.*

Der Peano-Kern-Satz

An dieser Stelle noch ein Satz, der eine sehr allgemeine Form der Restglied- oder Fehlerdarstellung ermöglicht, sowohl für die numerische Quadratur als auch für die Interpolation.

Gegeben sei ein lineares Funktional L auf $C^{m+1}[a,b]$,

$$Lf := \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=0}^{k} a_{ij} f^{(j)}(x_{ij}) + \sum_{j=0}^{k}\int_a^b \omega_j(x) f^{(j)}(x)\,dx, \qquad k \le m.$$

Satz 1.2 *Peano-Kern*
Seien die Stützstellen und Gewichte x_{ij}, $a_{ij} \in \mathbb{R}$ und die Gewichtsfunktionen $\omega_j \in C[a,b]$ so gewählt, daß $Lp = 0$ für alle Polynome $p \in \mathbb{P}_m$. Dann kann Lf für $f \in C^{m+1}[a,b]$ in der Form

$$Lf = \int_a^b f^{(m+1)}(t) K_m(t)\,dt$$

mit dem Peano-Kern

$$K_m(t) := \frac{1}{m!} L_x (x-t)_+^m$$

und den abgeschnittenen Potenzfunktionen

$$(x-t)_+^m := \begin{cases} 0 & \text{für } x < t \\ (x-t)^m & \text{für } x \ge t \end{cases}$$

dargestellt werden.

Beweis: Taylorformel mit Restglied für f:

$$\begin{aligned} f(x) &= \underbrace{f(a) + f'(a)(x-a) + \ldots + \frac{1}{m!} f^{(m)}(a)(x-a)^m}_{\text{Polynom vom Grad } m} \\ &\quad + \frac{1}{m!}\int_a^x f^{(m+1)}(t)(x-t)^m\,dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow\ Lf &= \frac{1}{m!} L\left(\int_a^x f^{(m+1)}(t)(x-t)^m\,dt\right) \\
&= \frac{1}{m!} L\left(\int_a^b f^{(m+1)}(t)(x-t)_+^m\,dt\right) \qquad \text{da } (x-t)_+^m = 0 \text{ für } t > x \\
&= \frac{1}{m!} \int_a^b f^{(m+1)}(t) L_x (x-t)_+^m\,dt
\end{aligned}$$

Hierbei steht L_x für die Anwendung von L in Bezug auf die Variable x (und nicht t).
Warum darf man L und das Integral vertauschen? $\square$

Anwendung des Satzes: Fehlerdarstellung bei Quadraturformeln, auch falls f nicht genügend glatt für klassische Restglieddarstellung ist.

1.3 Summenformeln

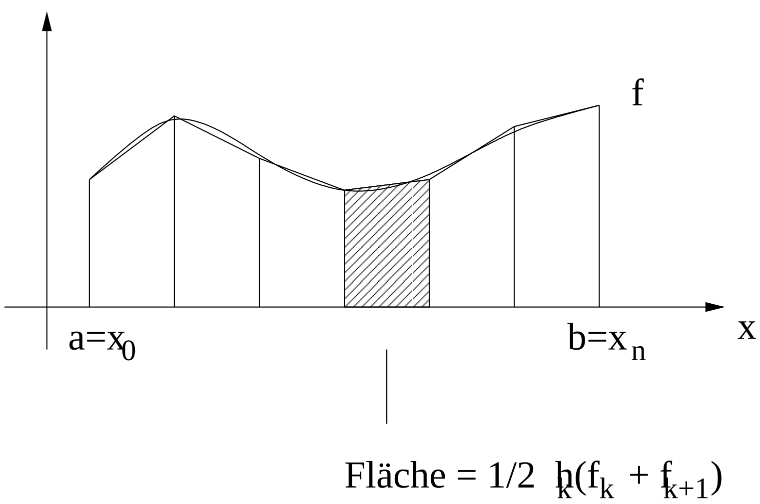
Zerlegung des Intervalls $[a, b]$ in n Intervalle der Länge $h = (b-a)/n$.

Setze $x_k := a + k \cdot h$, $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, \ldots, n$.

In jedem Teilintervall $[x_k, x_{k+1}]$ wende elementare Quadraturformel an und summiere auf.

a) Trapezsumme $\quad J(f) = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right)$

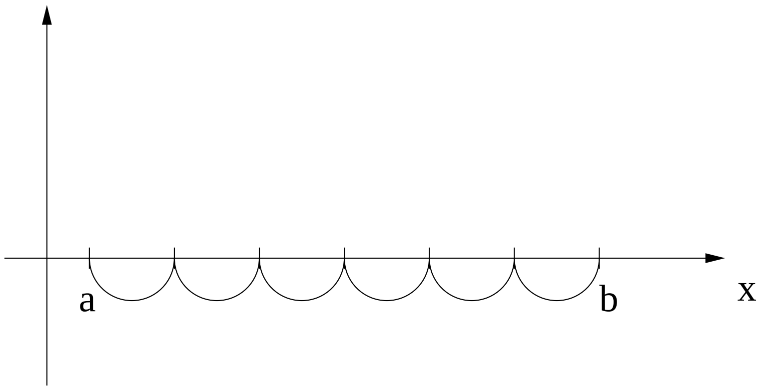
aus Anwendung Trapezregel $\frac{1}{2}h(f_k + f_{k+1})$ und Aufsummation.



Fehler:

$$
\begin{aligned}
R(f) &= I(f) - J(f) = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \underbrace{(x-x_k)(x-x_{k+1})}_{r(x)} f''(\xi_k(x))\, dx \\
&= -\frac{1}{12} h^3 \sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k) \\
&= -\frac{1}{12}(b-a)h^2 \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{n} f''(\xi_k) = -\frac{1}{12}(b-a)h^2 f''(\xi)
\end{aligned}
$$

Skizze Gewichtsfunktion r:



$r(x)$ "girlandenförmig"

b) Simpsonsumme: Analoger Ansatz mit Fassregel statt Trapezregel:
Skizze:

$$J(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

Fehler $R(f) = (b-a)h^4 f^{(4)}(\xi)/180$

(Einsetzen $n = 2$ und $h = (b-a)/2$) liefert den Fehler der Fassregel.)

Adaptiver Simpson

Adaptivität ist eine wichtige Eigenschaft numerischer Verfahren. Man will eine Berechnung nur bis zu einer gewissen Genauigkeitsforderung wie etwa "5 Stellen" durchführen und dann abbrechen, um nicht unnötig viel Rechenaufwand zu investieren.

Ein äquidistantes Gitter verlangt einen unverhältnismäßig hohen Aufwand, um solch eine Genauigkeitsforderung zu erfüllen, wenn der Integrand einen lokal sehr unterschiedlichen Verlauf hat:

Von einem guten adaptiven Verfahren wird man erwarten, dass es dort ein verfeinertes Gitter einsetzt, wo der Integrand f starke Nichtlinearitäten aufweist.

Ein Beispiel für ein robustes und effizientes adaptives Quadraturverfahren ist der *adaptive Simpson*, der auf der Fassregel basiert.

Idee: Sei $[a, b]$ das aktuelle Intervall. Berechne $I(f)$ über die Fassregel und schätze den Fehler. Falls der Fehler klein genug ist, breche ab. Andernfalls unterteile $[a, b]$ in zwei Hälften $[a, (a + b)/2]$ und $[(a + b)/2, b]$ und fahre rekursiv fort.

Zur Durchführung eines adaptiven Algorithmus braucht man einen *Fehlerschätzer*. In unserem Fall eignet sich dazu die Information, die aus Fassregel und Simpsonsumme folgt.

Fassregel: $J(f)[a,b] = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$

Simpsonsumme (2-fache Anwendung der Fassregel, Aufsummation):

$$\hat{J}(f)[a,b] = J(f)[a,(a+b)/2] + J(f)[(a+b)/2,b]$$

Fehler der Fassregel ($h = (b-a)/2$): $J(f) = I(f) + (b-a)h^4 f^{(4)}(\xi)/180$

Fehler der Simpsonsumme: $\hat{J}(f) = I(f) + (b-a)(h/2)^4 f^{(4)}(\xi^*)/180$

Daraus gewinnt man mit der Annahme $f^{(4)}(\xi) \doteq f^{(4)}(\xi^*)$ den Fehlerschätzer:

Algorithmus 1.1: *Adaptiver Simpson*

Gegeben `TOL`*;*

Berechne $J := J(f)[a,b]$, $\hat{J} := \hat{J}(f)[a,b]$*;*

$$I(f)[a,b] := \begin{cases} \hat{J} & \text{falls } |J - \hat{J}| < 15 \cdot \mathtt{TOL} \\ I(f)[a,\frac{a+b}{2}] + I(f)[\frac{a+b}{2},b] & \text{sonst} \end{cases}$$

Bemerkungen

- Das Abbruchkriterium kann man mit der aktuellen Intervalllänge skalieren: Forderung $|J - \hat{J}| < 15 \cdot \mathtt{TOL} \cdot (b - a)$.
- In der Praxis wird man zusätzliche *Heuristiken* einführen, um den Algorithmus robust zu machen.
- Statt $\hat{J}$ kann man auch die bessere Approximation $\widetilde{J} = (16\hat{J} - J)/15$, den sogenannten *extrapolierten Wert*, als Lösung hernehmen. Der Fehlerschätzer bezieht sich aber auf $\hat{J}$ und nicht auf $\widetilde{J}$.
- Das gleichzeitige Unterteilen nach links und rechts bezeichnet man auch als *Randwertmethode*, im Gegensatz zur *Anfangswertmethode*, bei der man bei a startet und sich sukzessive bis nach b vorarbeitet. Die Namensgebung stammt von den Aufgabenstellungen bei der numerischen Simulation von Differentialgleichungen.