
Konvergenzbeschleunigung durch Extrapolation am Beispiel der Romberg-Integration

BACHELORARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science in Mathematik

vorgelegt von
Thomas Wick
aus Bad Laasphe

Fachbereich 6 - Mathematik

UNIVERSITÄT SIEGEN



**Gutachter: Prof. Dr. F.-J. Delvos
Dr. R. Siewer**

Alle Rechte vorbehalten, auch die der Speicherung in elektronischen Medien.

Zusammenfassung

Diese Arbeit thematisiert die Extrapolationsmethode nach Richardson am Beispiel der Romberg-Integration. Ziel des Verfahrens ist die Beschleunigung der Konvergenz der Quadraturformel gegen den wahren Wert des Integrals.

Als Grundlage der Arbeit dienen die Ausführungen des Buches *Vorlesungen über numerische Mathematik II, Analysis* von Gerhard Maess.

Nach den einleitenden Bemerkungen über die Anwendung und die Idee der numerischen Integration allgemein, werden die zugrundeliegenden Quadraturformeln, also summierte Sehnentrapez- und Mittelpunkregel, kurz dargestellt.

Im zweiten Teil der Arbeit wird - analog zu Gerhard Maess - die allgemeine Extrapolationsmethode hergeleitet. Diese beruht auf dem Prinzip der Polynominterpolation.

Voraussetzung des Verfahrens ist die Potenzreihenentwicklung der zu extrapolierenden Funktion, sprich die Potenzreihenentwicklungen von Sehnentrapez- und Mittelpunkregel. Die Grundzüge der Überlegungen sind ebenfalls dem Buch von Gerhard Maess entnommen. Als Ergebnis erhält man so die Summenformeln von Euler-MacLaurin. Im Falle einer einmal stetig differenzierbaren Funktion entsprechen diese den Quadraturformeln von Hermite und Hermite-Birkhoff. Diese werden zum Vergleich über ihre Interpolationspolynome explizit hergeleitet, wobei die interpolatorisch hergeleitete Mittelpunkregel fast ausschließlich auf eigenen Überlegungen beruht.

Das Kapitel 4 mit der Anwendung der Extrapolationsmethode auf die Summenformeln von Euler-MacLaurin basiert auf verschiedenen Literatur-Recherchen.

Die Extrapolation bewirkt eine beschleunigte Konvergenz der Quadraturformeln gegen den wahren Wert des Integrals. Der Fehler der numerischen Integration kann auf verschiedene Weisen angegangen werden. In dieser Arbeit wird lediglich der Fehler und die Konvergenz der Spalten des Extrapolationsschemas besprochen. Schwieriger ist die Betrachtung der Diagonalkonvergenz. Ausführungen dazu findet der Leser im Buch von R. Schaback und H. Werner, *Numerische Mathematik*.

Zum Abschluß der Arbeit werden zwei Abschnitte in Matlab implementiert. Zum einen die bei der Herleitung der Summenformeln von Euler-MacLaurin auftretenden Bernoulli-Zahlen. Zum anderen die Berechnung eines Integrals mit Romberg-Integration.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
1.1	Idee der numerischen Integration	9
1.2	Herleitung der Sehnentrapezregel	10
1.3	Die Mittelpunktregel	11
2	Grundlagen	13
2.1	Das Landau-Symbol \mathcal{O}	13
2.2	Polynominterpolation	13
2.2.1	Aitken-Neville Rekursion	13
2.2.2	Fehler der Polynominterpolation	16
2.3	Richardson-Extrapolation	17
2.3.1	Heuristische Herleitung für zwei Punkte	19
2.3.2	Herleitung der Vorschrift für k Punkte	21
2.3.3	Betrachtung des Fehlers	23
3	Euler-MacLaurin Entwicklungen	25
3.1	Herleitung der Trapezsumme	25
3.2	Hermite-Quadratur (Trapezsumme für $K=1$)	35
3.2.1	Intervallweise Hermite-Interpolation	36
3.2.2	Quadraturformel von Hermite	38
3.3	Asymptotische Entwicklung der Mittelpunktregel	40
3.4	Interpolatorische Herleitung der entw. MPR im Fall $K=1$	44
3.5	Zusammenfassung	48
4	Romberg-Integration: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR	49
4.1	Herleitung der Rekursionsvorschrift	49
4.2	Fehler	53
4.3	Herleitung der Simpson-Regel	55
5	Programmcode und Beispiele	57
5.1	Rekursion der Bernoullizahlen	57
5.2	Beispiel. Extrapolation mit STR und MPR	57

1 Einleitung

Die numerische Integration - auch numerische Quadratur genannt - ist eine der ältesten Aufgaben der Mathematik und gehört heute zu den klassischen Themen der angewandten Analysis.

In der Praxis gibt es drei Ursachen dafür, dass das Integral numerisch gelöst wird:

1. Die Stammfunktion eines Integrals lässt sich nicht durch eine elementare Funktion ausdrücken.

Beispiele sind: $\int_0^\infty \exp(-x^2) dx$, $\int_0^\infty \frac{\sin(x)}{x} dx$

2. Eine Stammfunktion existiert in geschlossener (integralfreier) Form, aber die Bestimmung ist derart aufwendig, so dass numerische Methoden vorzuziehen sind.
3. Der Integrand ist nur an diskreten Stellen bekannt. Beispiele sind im Bereich der Physik zu finden, nämlich die Ergebnisse von Messungen.

1.1 Idee der numerischen Integration

Die numerische Approximation eines Integrals geschieht durch die Festlegung der Stützstellen $x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ und die Wahl der Gewichte $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$, so dass für

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \sum_{j=1}^n \alpha_j f(x_j), \quad f \text{ sei Riemann-int.}$$

der Fehler minimal wird.

Die Konstruktion von Quadraturformeln kann mit verschiedenen Methoden angegangen werden. Einmal mit der Approximation des Integrals durch Riemann-Summen, die das Verfahren zur Definition des *Riemann-Integrals* bilden. Zum anderen kann durch eine gewisse Anzahl von Punkten ein Interpolationspolynom gelegt werden und dieses wird dann integriert; Formeln von *Newton-Cotes*.

Die einfachsten Quadraturformeln sind die Mittelpunkregel, die ein konstantes IP-Polynom benutzt, und die Sehnentrapezregel, der ein lineares Polynom zugrunde liegt. Beide Formeln können aber auch über die Riemann-Summen hergeleitet werden.

Um die Konvergenz der Quadraturformeln gegen das Integral zu verbessern, gibt es wiederum verschiedene Möglichkeiten. Zumindest theoretisch lassen sich durch Interpolation Polynome hohen Grades erzeugen. Da der Fehler unmittelbar mit dem Polynomgrad verknüpft ist, ließe sich die Konvergenzordnung der Quadratur somit erhöhen. Allerdings treten ab der Wahl von 9 oder mehr Stützstellen negative Gewichte auf.

Kapitel 1: Einleitung

Diese führen zu Auslöschungen und beeinflussen die Stabilität, also die Konvergenz, erheblich. Daher sind Polynome hohen Grades zur Quadratur ungeeignet.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, das Integrationsintervall zu unterteilen, welches die zusammengesetzten Quadraturformeln liefert. Die beiden einfachsten, die oben angesprochenen Mittelpunkregel und Sehnentrapezregel, lassen sich interessanterweise in asymptotische Potenzreihen entwickeln. Das Ergebnis sind die *Summenformeln von Euler-MacLaurin*. Diese haben zwei große Vorteile.

Erstens zeigen Trapezregel und Mittelpunkregel ein sehr gutes Verhalten bei periodischen Funktionen, falls über eine Periode integriert wird und die höheren Ableitungen bekannt sind. Dann nimmt der Fehler exponentiell ab.

Der zweite wichtige Aspekt - Thema dieser Arbeit - ist die Anwendung der Extrapolation auf die asymptotischen Entwicklungen von Sehnentrapez-, und Mittelpunkregel, bekannt unter dem Namen *Romberg-Integration*. Hierdurch kann die Konvergenzordnung schnell erhöht werden.

1.2 Herleitung der Sehnentrapezregel

Für die summierte Formel wird das Intervall $[a, b]$ in gleich große Teilintervalle zerlegt. Die äquidistanten Stützstellen x_k haben jeweils den Abstand $h_N = \frac{b-a}{N}$. Dabei gibt N die Anzahl der Teilintervalle an. Somit gilt $x_j = a + j \cdot h_N$, $j = 0, \dots, N$, insbesondere ist $x_0 = a$ und $x_N = b$. Zwei aufeinanderfolgende Punkte $(x_{j-1}, f(x_{j-1}))$ und $(x_j, f(x_j))$ werden durch eine Gerade verbunden. Die trapezförmige Fläche liefert dann die Approximation des Integralwertes.

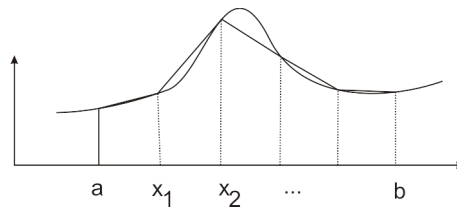


Abbildung 1.1: Geometrische Darstellung der summierten STR

Insgesamt ergibt sich für die summierte Sehnentrapezregel (STR)

$$T_N^S f := \sum_{j=0}^N \frac{b_j - a_j}{2} (f(a_j) + f(b_j)) = \frac{b-a}{N} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{f(b)}{2} \right)$$

Für eine Funktion $f \in C^2[a, b]$ gilt für den Fehler

$$R_N^S f := T_N^S f - I(f) = \frac{(b-a)^3}{12 N^2} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

1.3 Die Mittelpunkregel

Die Mittelpunkregel (MPR) verwendet den Intervallmittelpunkt um hier den Funktionswert zu berechnen. Hierdurch wird ein konstantes Polynom gelegt. Damit wird die Integration der Funktion durch ein Rechteck approximiert.

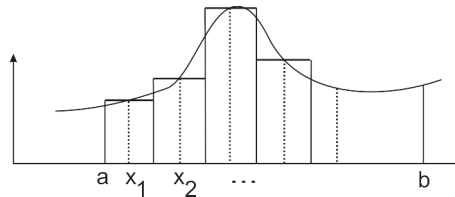


Abbildung 1.2: Geometrie der Mittelpunkregel

Für die summierte Formel gilt somit

$$T_N^M f := \frac{b-a}{N} \left(\sum_{j=1}^N f\left(a + \left(j - \frac{1}{2}\right) \cdot h_N\right) \right), \quad h_N = \frac{b-a}{N}$$

Für den Quadraturfehler einer Funktion $f \in C^2[a, b]$ gilt

$$R_N^M f := -\frac{(b-a)^3}{24 N^2} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

Für $N \rightarrow \infty$ nimmt der Fehler wie $\frac{1}{N^2}$ ab.

Die Mittelpunkregel entspricht gewissermaßen der Tangententrapezregel (TTR). Bei dieser wird im Intervallmittelpunkt die Tangente an die Funktion gelegt, unter der Voraussetzung, dass die erste Ableitung bekannt ist. Es entsteht, ähnlich wie bei der STR, ein Trapez. Dieses liefert aber den gleichen Flächeninhalt wie die MPR. Daher können bei der reinen Flächenbetrachtung MPR und TTR synonym verwendet werden.

Geometrisch lässt sich mit STR und TTR veranschaulichen, dass das Integral über f durch beide Quadraturformeln für hinreichend großes N eingeschlossen wird. Siehe

Kapitel 1: Einleitung

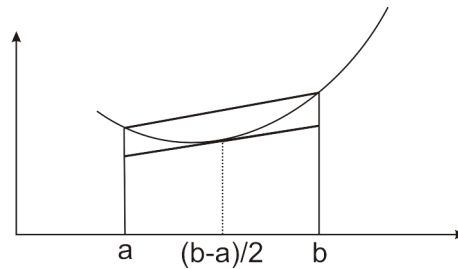


Abbildung 1.3: Einschließung der Funktion f durch STR und TTR

dazu Abb. 1.3 für den einfachsten Fall, einer konvexen bzw. konkaven Funktion im Intervall $[a, b]$. Dann gilt die Einschließung schon für $N = 1$.

Rechnerisch wird die Eigenschaft der Einschließung durch die unterschiedlichen Vorzeichen der Fehlerterme begründet.

Im weiteren Verlauf der Arbeit spielt die TTR keine Rolle mehr. Die Herleitungen der Euler-MacLaurinschen Summenformeln basieren auf STR und MPR.

2 Grundlagen

2.1 Das Landau-Symbol \mathcal{O}

Funktionen die sich in der Nähe eines kritischen Punktes (Singularität, etc.) ähnlich verhalten, werden von derselben Ordnung genannt. Dies wird mit \mathcal{O} bezeichnet.

Definition 2.1.1 Seien zwei Funktionen $f(t)$ und $g(t)$ in einer Umgebung von t_0 definiert und es gilt mit einer Konstanten c

$$|f(t)| \leq c \cdot |g(t)|$$

Dann schreibt man

$$f(t) = \mathcal{O}(g(t)) \quad \text{für } t \rightarrow t_0$$

2.2 Polynominterpolation

Der Vektorraum der Polynome wird mit π_n , mit $n \in \mathbb{N}_0$, bezeichnet. Die Polynome haben die Form

$$p(t) = \sum_{j=0}^n d_j t^j$$

mit den Koeffizienten $d_j \in \mathbb{C}$ und der reellwertigen (auch komplexwertigen) Variablen t . Ein Polynom $p \in \pi_n$ wird vom Grad n genannt, falls $d_n \neq 0$. Insbesondere ist dann das Polynom $(n + 1)$ -mal differenzierbar.

2.2.1 Aitken-Neville Rekursion

Ist die Polynominterpolation in einem einzigen Punkt durchzuführen, eignet sich die Rekursionsformel von *Aitken-Neville* besonders gut. Sie lässt sich aus den dividierten Differenzen und der Newton-Darstellung eines Polynoms herleiten und hat den Vorteil nicht alle Polynome explizit berechnen zu müssen. Da die Richardson-Extrapolation später nur an der Stelle Null geführt wird, bildet die Aitken-Neville Formel die Grundlage der Extrapolation.

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

Satz 2.2.1 Gegeben seien n paarweise verschiedene Stützstellen t_1, \dots, t_n und die zugehörigen Werte y_1, \dots, y_n . Die eindeutig bestimmten Interpolationspolynome $p_{[t_i, \dots, t_{i+(k-1)}]} \in \pi_{k-1}$, $k = 1, 2, \dots, n$ und $i = 1, \dots, n - (k - 1)$ mit der Interpolationsbedingung

$$p_{[t_i, \dots, t_{i+(k-1)}]}(t_j) = y_j, \quad j = i, \dots, i + (k - 1) \quad (2.1)$$

genügt der Rekursion

$$\begin{aligned} p_{[t_i]}(t) &= y_i, \quad k = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{Erste Spalte}) \\ p_{[t_i, \dots, t_{i+(k-1)}]}(t) &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t)p_{[t_i, \dots, t_{i+(k-2)}]}(t) + (t - t_i)p_{[t_{i+1}, \dots, t_{i+(k-1)}]}(t)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \end{aligned} \quad (2.2)$$

für $k = 2, 3, \dots, n$ und $i = 1, \dots, n - (k - 1)$.

Zur vereinfachten Darstellung wird von nun an die folgende Schreibweise verwendet

$$p_{[i, \dots, i+(k-1)]} := p_{[t_i, \dots, t_{i+(k-1)}]}$$

Führt man die Rekursionen nach der Vorschrift (2.2) durch, so entsteht das folgende Tableau.

AITKEN-NEVILLE TABLEAU

$$\begin{array}{cccccccc} t_1 & y_1 = p_{[1]}(t) & & & & & & \\ t_2 & y_2 = p_{[2]}(t) & p_{[1,2]}(t) & & & & & \\ t_3 & y_3 = p_{[3]}(t) & p_{[2,3]}(t) & p_{[1,2,3]}(t) & & & & \\ t_4 & y_4 = p_{[4]}(t) & p_{[3,4]}(t) & p_{[2,3,4]}(t) & p_{[1, \dots, 5]}(t) & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ t_n & y_{[n]} = p_{[n]}(t) & p_{[n-1, n]}(t) & p_{[n-2, n-1, n]}(t) & p_{[n-3, \dots, n]}(t) & \dots & p_{[1, \dots, n]}(t) & \end{array} \quad (2.3)$$

Beweis.

Induktion über k .

Induktionsanfang $k = 2$:

$$\begin{aligned} p_{[i, i+1]}(t) &= \frac{(t_{i+1} - t)p_{[i]}(t) + (t - t_i)p_{[i+1]}(t)}{t_{i+1} - t_i} \\ &= \frac{(t_{i+1} - t)y_i + (t - t_i)y_{i+1}}{t_{i+1} - t_i} \end{aligned}$$

2.2 Polynominterpolation

Also ist $p_{[i,i+1]}(t) \in \pi_1$. Einsetzen von t_j zeigt

$$\begin{aligned} p_{[i,i+1]}(t_j) &= \frac{(t_{i+1} - t_j)p_{[i]}(t_j) + (t_j - t_i)p_{[i+1]}(t_j)}{t_{i+1} - t_i} \\ &\stackrel{(2.1)}{=} \frac{(t_{i+1} - t_j)y_j + (t_j - t_i)y_j}{t_{i+1} - t_i} \\ &= y_j, \quad j = i, i + 1 \end{aligned}$$

Damit wurde gezeigt $p_{[i,i+1]}(t_j) = y_j$ wie in der Interpolationsbedingung gefordert.

Es wird nun angenommen, dass die Rekursion für Polynome vom Grad $k - 2$ für $k \geq 3$ bewiesen sei. Dann definiert die rechte Seite von (2.2) ein Polynom $p_{[i,\dots,i+(k-1)]} \in \pi_{k-1}$. Mit der Induktionsvoraussetzung (2.2) gilt

$$\begin{aligned} p_{[i,\dots,i+(k-1)]}(t_j) &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t_j)p_{[i,\dots,i+(k-2)]}(t_j) + (t_j - t_i)p_{[i+1,\dots,i+(k-1)]}(t_j)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &\stackrel{(2.1)}{=} \frac{(t_{i+(k-1)} - t_j)y_j + (t_j - t_i)y_j}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &= y_j, \quad j = i + 1, \dots, i + (k - 2) \end{aligned}$$

Insbesondere ist

$$\begin{aligned} p_{[i,\dots,i+(k-1)]}(t_i) &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t_i)p_{[i,\dots,i+(k-2)]}(t_i) + (t_i - t_i)p_{[i+1,\dots,i+(k-1)]}(t_i)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t_i)y_i}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &= y_i \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} p_{[i,\dots,i+(k-1)]}(t_{i+(k-1)}) &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t_{i+(k-1)})p_{[i,\dots,i+(k-2)]}(t_{i+(k-1)})}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &\quad + \frac{(t_{i+(k-1)} - t_i)p_{[i+1,\dots,i+(k-1)]}(t_{i+(k-1)})}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &= \frac{(t_{i+(k-1)} - t_i)y_{i+(k-1)}}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ &= y_{i+(k-1)} \end{aligned}$$

Somit ist der vollständige Beweis geführt. □

Führt man die Rekursionen bis $k = n$ weiter fort, so erhält man das Interpolationspolynom

$$p_{[1,\dots,n]} \in \pi_{n-1}$$

welches durch alle n Knoten des Interpolationsintervalls läuft. Dieses Polynom steht an der „Spitze“ im obigen Tableau.

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

2.2.2 Fehler der Polynominterpolation

Satz 2.2.2 Gegeben sei eine Funktion $g \in C^n[a, b]$. Für ein durch Polynominterpolation durch n Punkte erzeugtes Polynom $p_{[1, \dots, n]} \in \pi_{n-1}$ mit den Interpolationsbedingungen

$$p_{[1, \dots, n]}(t_j) = g(t_j), \quad j = 1, \dots, n$$

ist der Fehler definiert durch

$$r_{[1, \dots, n]}(t) := g(t) - p_{[1, \dots, n]}(t)$$

und hat die Darstellung

$$r_{[1, \dots, n]}(t) = \frac{g^{(n)}(\xi)}{n!} (t - t_1)(t - t_2) \cdots (t - t_n), \quad \xi \in [a, b] \quad (2.4)$$

Beweis.

Zur besseren Übersicht im Beweis wird

$$p(t) := p_{[1, \dots, n]}(t)$$

gesetzt.

1) Falls t mit einer der Stützstellen t_1, \dots, t_n zusammenfällt, dann ist der Fehler selbstverständlich Null. Sieht man durch Einsetzen in (2.4) sofort.

2) Sei $t^* \in [a, b]$ und $t^* \neq t_j$ ($j = 1, \dots, n$). Man definiere

$$q_n(t) := \prod_{j=1}^n (t - t_j)$$

Für festes t^* wird nun die folgende Hilfsfunktion $h : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ gebildet

$$h(t) := g(t) - p(t) - q_n(t) \cdot \frac{g(t^*) - p(t^*)}{q_n(t^*)} \quad (2.5)$$

Nach Konstruktion ist h (ebenso wie g) n -mal stetig differenzierbar. An der Stelle $t = t^*$ gilt $h(t^*) = 0$, denn

$$h(t^*) = g(t^*) - p(t^*) - q_n(t^*) \cdot \frac{g(t^*) - p(t^*)}{q_n(t^*)} = g(t^*) - p(t^*) - g(t^*) + p(t^*) = 0$$

Wegen $q_n(t_j) = 0$ und der Interpolationsbedingung $p(t_j) = g(t_j)$ hat die Hilfsfunktion h die $n + 1$ Nullstellen t^*, t_1, \dots, t_n .

2.3 Richardson-Extrapolation

Für die weitere Beweisführung wird der *Satz von Rolle* gebraucht. Demnach liegt zwischen je zwei Nullstellen einer differenzierbaren Funktion mindestens eine Nullstelle der ersten Ableitung. Folglich hat h' mind. n Nullstellen. Da h nach Konstruktion n -mal differenzierbar ist, lässt sich die Argumentation weiter führen. Also hat h'' mind. $n - 1$ Nullstellen, $h^{(3)}$ mind. $n - 2$ Nullstellen, usw. Letztendlich hat $h^{(n)}$ mind. eine Nullstelle, bezeichnet als ξ . Somit gilt

$$h^{(n)}(\xi) = 0$$

Aus (2.5) folgt außerdem für die n -te Ableitung von h

$$\begin{aligned} h^{(n)}(t) &= g^{(n)}(t) - n! \cdot \frac{g(t^*) - p(t^*)}{q_n(t^*)} \\ &= g^{(n)}(t) - n! \cdot \frac{r_{[1, \dots, n]}(t^*)}{q_n(t^*)} \end{aligned} \quad (2.6)$$

In (2.6) ist das Polynom $p(t)$ verschwunden, weil $p(t)$ den Grad $n - 1$ hat, und deshalb die n -te Ableitung gleich Null ist.

Bei $t = \xi$ folgt

$$0 = g^{(n)}(\xi) - n! \cdot \frac{r_{[1, \dots, n]}(t^*)}{q_n(t^*)}$$

Umstellung nach $r_{[1, \dots, n]}(t^*)$ liefert

$$r_{[1, \dots, n]}(t^*) = \frac{g^{(n)}(\xi)}{n!} \cdot q_n(t^*)$$

Da t^* am Anfang beliebig gewählt worden ist, gilt die Fehlergleichung für beliebiges $t \in [a, b]$.

□

2.3 Richardson-Extrapolation

Ist eine Funktion auf einem Intervall bekannt, dann kann diese auf verschiedene Arten außerhalb des Intervalls fortgesetzt werden. Liegt beispielsweise das Interpolationspolynom für das Intervall vor, so können durch Einsetzen Funktionswerte berechnet werden, die außerhalb des Interpolationsintervalls liegen. Dieses Verfahren wird *Richardson-Extrapolation*, im folgenden einfach Extrapolation, genannt.

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

Die Methode der Extrapolation ist nicht nur in der Integralrechnung, sondern auch in Differentialrechnung anwendbar. Man kann daher zur Herleitung einer Rekursionsvorschrift den folgenden allgemeinen Ansatz machen, indem irgendeine konvergente Zahlenfolge $(g_m)_{m \in \mathbb{N}}$ gegeben sei, die den Grenzwert

$$\lim_{m \rightarrow \infty} g_m = I \quad (2.7)$$

besitzt.

Sei zweitens die sog. Romberg-Folge, also eine positive monoton fallende Nullfolge $(t_m)_{m \in \mathbb{N}}$ gegeben

$$t_m := \frac{1}{2^{m-1}} = \frac{t_{m-1}}{2}, \quad t_1 = 1, \quad m = 2, 3, \dots$$

Mit diesen beiden Vorgaben wird eine Funktion $g(t)$ gebildet, die durch die Punkte

$$(t_1, g_1), (t_2, g_2), \dots$$

festgelegt ist. Da die Folge (g_m) nach Voraussetzung konvergent ist, existiert folglich auch der Grenzwert der Funktion $g(t)$, wegen $\lim_{m \rightarrow \infty} t_m = 0$ und (2.7) gilt nämlich

$$\lim_{t \rightarrow 0} g(t) = g(0) = I$$

Die gestellte Aufgabe, den Grenzwert $g(0)$ näherungsweise zu ermitteln, wird im nächsten Lemma zusammengefasst:

Lemma 2.3.1 *Es sei $g(t)$ ein numerisches Verfahren zur Bestimmung des Wertes I , d.h. es gilt*

$$\lim_{t \rightarrow 0} g(t) = g(0) = I$$

Weiter sei

$$g(t) = g(0) + d_1 t + d_2 t^2 + \dots + d_n t^n + \mathcal{O}(t^{n+1}) \quad (2.8)$$

eine asymptotische Entwicklung des Verfahrens in Potenzen von t . Diese asymptotische Entwicklung ist die Grundlage der Extrapolation. Die Reihe (2.8) wird an den Stellen t_1, \dots, t_n ausgewertet und man erhält die Punkte

$$\begin{array}{ll} t_1 & g(t_1) \\ t_2 & g(t_2) \\ t_3 & g(t_3) \\ t_4 & g(t_4) \\ \vdots & \vdots \\ t_n & g(t_n) \end{array} \quad (2.9)$$

zu denen die Interpolationspolynome

$$p_{[i, \dots, i+(k-1)]}(t), \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad i = 1, \dots, n - (k - 1)$$

durch k aufeinanderfolgende Punkte

$$(t_i, g_i), (t_{i+1}, g_{i+1}), \dots, (t_{i+(k-1)}, g_{i+(k-1)})$$

konstruiert werden, so dass das Tableau (2.3) aufgestellt wird und anschließend die Polynome an der Stelle $t = 0$ ausgewertet werden, welche dann Näherungswerte für den gesuchten Wert $g(0)$ liefern.

2.3.1 Heuristische Herleitung für zwei Punkte

Zur Einführung wird durch zwei Punkte $(t_1, g(t_1))$ und $(t_2, g(t_2))$ linear interpoliert. Für zwei verschiedene Stützstellen t_1 und t_2 mit der Beziehung

$$0 < t_2 < t_1$$

folgt mit (2.8)

$$g_{11} := g(t_1) = g(0) + d_1 t_1 + d_2 t_1^2 + d_3 t_1^3 + \dots \quad (2.10)$$

$$= g(0) + \mathcal{O}(t_1) \quad (2.11)$$

$$g_{21} := g(t_2) = g(0) + d_1 t_2 + d_2 t_2^2 + d_3 t_2^3 + \dots \quad (2.12)$$

Subtraktion der ersten Gleichung von der zweiten ergibt

$$\begin{aligned} g_{21} - g_{11} &= d_1(t_2 - t_1) + d_2(t_2^2 - t_1^2) + d_3(t_2^3 - t_1^3) + \dots \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} d_j(t_2^j - t_1^j) \end{aligned}$$

Division mit $(t_2 - t_1)$ und anschließende Multiplikation mit t_2 zeigt

$$\begin{aligned} \frac{g_{21} - g_{11}}{t_2 - t_1} \cdot t_2 &= \sum_{j=1}^n d_j \frac{t_2^j - t_1^j}{t_2 - t_1} \cdot t_2 \\ &= d_1 t_2 + d_2(t_2 + t_1) \cdot t_2 + d_3(t_2^2 + t_2 t_1 + t_1^2) \cdot t_2 + \dots \end{aligned} \quad (2.13)$$

Weiter folgt aus (2.13) mit Umstellung nach $d_1 t_2$

$$d_1 t_2 = \frac{g_{21} - g_{11}}{t_2 - t_1} \cdot t_2 - d_2(t_2 + t_1)t_2 - d_3(t_2^2 + t_2 t_1 + t_1^2)t_2 - \dots \quad (2.14)$$

Mit (2.14) wird die Gleichung (2.12) der Variablen t_2 korrigiert

$$\begin{aligned} g_{21} = g(t_2) &= g(0) - \left(\frac{g_{21} - g_{11}}{t_1 - t_2} \cdot t_2 + d_2(t_2 + t_1)t_2 + d_3(t_2^2 + t_2 t_1 + t_1^2)t_2 + \dots \right) \\ &\quad + d_2 t_2^2 + d_3 t_2^3 + \dots \end{aligned}$$

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

Die hinteren Terme werden zusammengefasst

$$g_{21} = g(0) - (g_{21} - g_{11}) \frac{t_2}{t_1 - t_2} - d_2 t_1 t_2 - d_3 (t_2 t_1 + t_1^2) t_2 - \dots$$

Wegen $0 < t_2 < t_1$ werden die höheren Terme mit den Koeffizienten

$$d_2, d_3, \dots, d_n, \dots$$

mit $\mathcal{O}(t_1^2)$ abgeschätzt. Denn

$$\begin{aligned} & |d_2| t_1 t_2 + |d_3| (t_2 t_1 + t_1^2) t_2 + \dots \\ & \leq |d_2| t_1^2 + |d_3| (t_1^3 + t_1^3) + \dots \\ & = \mathcal{O}(t_1^2) \end{aligned}$$

Dann ist

$$g_{21} + (g_{21} - g_{11}) \frac{t_2}{t_1 - t_2} = g(0) + \mathcal{O}(t_1^2) \quad (2.15)$$

Mit der Benennung

$$g_{22} := g_{21} + (g_{21} - g_{11}) \frac{t_2}{t_1 - t_2}$$

folgt das Ergebnis

$$g_{22} = g(0) + \mathcal{O}(t_1^2) \quad (2.16)$$

Dieses Resultat wird mit den Berechnungen der Fehlergleichung (2.22) verglichen. Speziell werden Berechnungen zur Variablen t_2 mit höheren Termen von t_1 abgeschätzt.

Somit stellt der extrapolierte Wert g_{22} eine Konvergenzverbesserung dar. Offensichtlich wurde die Konvergenzordnung im Vergleich zu

$$g_{11} = g(0) + d_1 t_1 + \mathcal{O}(t_1^2)$$

um mind. Eins erhöht, da der lineare Term $d_1 t_1$ in (2.16) eliminiert wurde.

Der Wert $g_{22} := g_{22}(0)$ zeichnet den Schnittpunkt der Geraden durch $(t_1, g(t_1))$ und $(t_2, g(t_2))$ mit der g -Achse.

Verfährt man nun für je zwei aufeinanderfolgende Punkte so weiter, dann folgt allgemein für zwei beliebige Punkte $(t_{m-1}, g(t_{m-1}))$, $(t_m, g(t_m))$ der Funktion $g(t)$

$$g_{m2} := g_{m1} + (g_{m1} - g_{m-1,1}) \cdot \frac{t_m}{t_{m-1} - t_m} \quad \text{mit } t_m < t_{m-1}$$

2.3.2 Herleitung der Vorschrift für k Punkte

Man wird bestrebt sein, die Konvergenz gegen $g(0)$ noch weiter zu verbessern. Dazu sei die Funktion $g(t)$ hinreichend glatt. Weiter seien im Intervall $(0, t_1]$ insgesamt n Stellen

$$t_1, \dots, t_n$$

vorgelegt, die den Folgengliedern t_m der Romberg-Folge entsprechen.

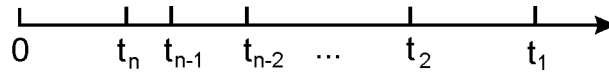


Abbildung 2.1: Anordnung der Stützstellen t_j

Durch k aufeinanderfolgende Punkte

$$(t_j, g(t_j)), \quad j = i, \dots, i + (k - 1)$$

mit $k = 1, 2, \dots, n$ und $i = 1, \dots, n - (k - 1)$

wird ein Polynom $p_{[i, \dots, i+(k-1)]} \in \pi_{k-1}$ festgelegt, welches eindeutig bestimmt ist. Die Interpolationsbedingung lautet

$$p_{[i, \dots, i+(k-1)]}(t_j) = g(t_j), \quad j = i, \dots, i + (k - 1)$$

Das zugehörige Tableau (2.3) wurde bereits oben aufgestellt.

Die Näherungswerte für den Grenzwert $g(0)$ ergeben sich, indem man die Polynome jeweils an der Stelle $t = 0$ auswertet, also $p_{[i, \dots, i+(k-1)]}(0)$ berechnet. Um eine vereinfachte Rekursionsformel zu erhalten wird die Aitken-Neville Vorschrift (2.2) umgeformt. Es folgt

$$\begin{aligned} & p_{[i, \dots, i+(k-1)]}(t) \\ = & \frac{(t_{i+(k-1)} - t)p_{[i, \dots, i+(k-2)]}(t) + (t - t_i)p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ = & \frac{(t_{i+(k-1)} - t)p_{[i, \dots, i+(k-2)]}(t) + (t - t_{i+(k-1)} + t_{i+(k-1)} - t_i)p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ = & \frac{(t_{i+(k-1)} - t)p_{[i, \dots, i+(k-2)]}(t) + (t - t_{i+(k-1)})p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t)}{t_{i+(k-1)} - t_i} \\ & + \frac{t_{i+(k-1)} - t_i}{t_{i+(k-1)} - t_i} p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t) \\ = & p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t) + \frac{t_{i+(k-1)} - t}{t_{i+(k-1)} - t_i} (p_{[i, \dots, i+(k-2)]}(t) - p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(t)) \end{aligned}$$

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

An der Stelle $t = 0$ folgt

$$p_{[i, \dots, i+(k-1)]}(0) = p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(0) + \frac{t_{i+(k-1)}}{t_{i+(k-1)} - t_i} (p_{[i, \dots, i+(k-2)]}(0) - p_{[i+1, \dots, i+(k-1)]}(0))$$

Mit der neuen Indizierung $m = i + (k - 1)$ erhält man

$$p_{[m-(k-1), \dots, m]}(0) = p_{[m-(k-2), \dots, m]}(0) + \frac{t_m}{t_m - t_{m-(k-1)}} (p_{[m-(k-1), \dots, m-1]}(0) - p_{[m-(k-2), \dots, m]}(0))$$

Man setze noch

$$\begin{aligned} p_{mk} &:= p_{[m-(k-1), \dots, m]}(0) \\ p_{m,k-1} &:= p_{[m-(k-2), \dots, m]}(0) \\ p_{m-1,k-1} &:= p_{[m-(k-1), \dots, m-1]}(0) \end{aligned}$$

und erhält die Vorschrift

$$p_{mk} := p_{m,k-1} + (p_{m,k-1} - p_{m-1,k-1}) \cdot \frac{t_m}{t_{m-k} - t_m} \quad (2.17)$$

Mit den Notationen

$$g_{j1} := g(t_j), \quad j = 1, 2, \dots, n$$

für die erste Spalte des Extrapolationsschemas, und

$$g_{mk} := p_{mk}, \quad m = i + (k - 1) = 2, 3, \dots, n$$

für $i = 1, \dots, n - (k - 1)$ und $k = 2, 3, \dots, n$, erhält man das folgende Schema der Näherungswerte für $g(0)$. Dieses entspricht dem Schema der Polynome in (2.3) mit Auswertung an der Stelle $t = 0$.

SCHEMA

$$\begin{array}{cccccc} t_1 & g(t_1) & = & g_{11} & & \\ t_2 & g(t_2) & = & g_{21} & g_{22} & \\ t_3 & g(t_3) & = & g_{31} & g_{23} & g_{33} \\ t_4 & g(t_4) & = & g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ t_n & g(t_n) & = & g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & g_{n4} & \cdots & g_{nn} \end{array} \quad (2.18)$$

Das beschriebene Verfahren lässt sich problemlos auf eine Folge von Quadraturformeln übertragen, die eine Potenzreihenentwicklung gestattet. Die Herleitungen dieser entwickelten Quadraturformeln wird in Kapitel 3 gezeigt.

2.3.3 Betrachtung des Fehlers

Die Fehlerbetrachtung wird für die jeweiligen Spalten geführt. Die Herleitung einer Fehlergleichung folgt direkt aus der Fehlerdarstellung der Polynominterpolation, welche in Satz (2.2.2) erläutert wurde.

Der Fehler

$$r_{[m-(k-1), \dots, m]} = g(t) - p_{[m-(k-1), \dots, m]}(t)$$

der Polynominterpolation aus Satz (2.2.2) für eine k -mal stetig differenzierbare Funktion g hat die Darstellung

$$r_{[m-(k-1), \dots, m]}(t) = \frac{g^{(k)}(\xi)}{k!} (t - t_{m-(k-1)})(t - t_{m-(k-2)}) \cdots (t - t_m) \quad (2.19)$$

Für den Fehler der Extrapolation folgt damit

$$r_{[m-(k-1), \dots, m]}(0) := g(0) - p_{[m-(k-1), \dots, m]}(0)$$

Also mit der abkürzenden Schreibweise

$$r_{mk} := g(0) - g_{mk} \quad (2.20)$$

für $m = k, \dots, n$ und $k = 2, \dots, n$.

Satz 2.3.2 (Fehlerabschätzung der Richardson-Extrapolation)

Der Fehler

$$r_{mk} := r_{[m-(k-1), \dots, m]}(0)$$

für Einträge der k -ten Spalte im Tableau (2.18) der Richardson-Extrapolation wird aus der Fehlerdarstellung der Polynominterpolation hergeleitet und hat die Darstellung

$$r_{mk} = (-1)^k \frac{1}{k!} g^{(k)}(\xi) \prod_{j=m-(k-1)}^m t_j \quad (2.21)$$

für $m = k, \dots, n$ und $k = 2, 3, \dots, n$

Beweis.

Man setzt $t = 0$ in Gleichung (2.19), dann ist

$$\begin{aligned} r_{mk} &= \frac{g^{(k)}(\xi)}{k!} (0 - t_{m-(k-1)})(0 - t_{m-(k-2)}) \cdots (0 - t_m) \\ &= (-1)^k \frac{1}{k!} g^{(k)}(\xi) (t_{m-(k-1)}) \cdots (t_m) \\ &= (-1)^k \frac{1}{k!} g^{(k)}(\xi) \prod_{j=m-(k-1)}^m t_j \end{aligned}$$

□

Kapitel 2: Allgemeine Grundlagen

Fehler für r_{22}

Mit der oben hergeleiteten Fehlergleichung wird der Fehler für $k = 2$ (zweite Spalte) berechnet, um die eingangs heuristisch geführte Diskussion für zwei Punkte zu bestätigen.

$$r_{m2} = g_{m2} - g(0) = 1 \cdot \frac{1}{2} g^{(2)}(\xi) t_{m-1} \cdot t_m \quad (2.22)$$

Für $m = 2$ folgt

$$r_{22} = g_{22} - g(0) = \frac{1}{2} g^{(2)}(\xi) t_1 \cdot t_2$$

Wegen $0 < t_2 < t_1$ gilt weiter

$$r_{22} = g_{22} - g(0) = \frac{1}{2} g^{(2)}(\xi) t_1 \cdot t_2 = \mathcal{O}(t_1^2)$$

Also

$$r_{22} = g_{22} - g(0) = \mathcal{O}(t_1^2)$$

Somit kann die Fehlerordnung der heuristischen Herleitung für zwei Punkte bestätigt werden.

3 Euler-MacLaurin Entwicklungen

Das oben beschriebene Verfahren der Extrapolation soll zur Konvergenzverbesserung der numerischen Integration verwendet werden. Grundlage dafür ist die asymptotische Potenzreihenentwicklung einer Quadraturformel. Ausgehend von einer beliebig oft differenzierbaren Funktion $F \in C^\infty[a, b]$ wird eine asymptotische Reihenentwicklung in Potenzen von h hergeleitet, welche formal der Reihe (2.8) entspricht. Nach der Elimination der ungeraden h -Potenzen stellt die so erzeugte Potenzreihe die Euler-MacLaurinsche Summenformel dar.

3.1 Herleitung der Trapezsumme

Die erste asymptotische Reihenentwicklung führt auf die entwickelte Sehnentrapezregel.

Seien zwei Punkte x_0 und $x_1 = x_0 + h$ aus dem Intervall $[a, b]$. Weiterhin sei $F \in C^\infty[x_0, x_0 + h]$. Im folgenden wird die Funktion F an den Stellen x_0 und x_1 in Taylor-Reihen entwickelt.

Es werden im weiteren Verlauf die folgenden beiden Abkürzungen benutzt

$$F^{(j)} := \frac{d^j}{dx^j} F(x), \quad F_k := F(x_k)$$

Die allgemeine Taylorentwicklung der Funktion F an der Stelle x_0 lautet

$$F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0)}{j!} (x - x_0)^j$$

Speziell an der Stelle $x = x_1 = x_0 + h$ folgt

$$\begin{aligned} F_1 := F(x_1) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0)}{j!} (x_0 + h - x_0)^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0)}{j!} h^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F_0^{(j)}}{j!} h^j \end{aligned}$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Bei $x_1 = x_0 + h$ wird eine zweite Entwicklung der Funktion F geführt

$$F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0 + h)}{j!} (x - (x_0 + h))^j$$

Man setze hier $x = x_0$ und erhalte

$$\begin{aligned} F_0 := F(x_0) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0 + h)}{j!} (x_0 - (x_0 + h))^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F^{(j)}(x_0 + h)}{j!} (-h)^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{F_1^{(j)}}{j!} (-h)^j \end{aligned}$$

Subtraktion der zweiten Gleichung von der Ersten ergibt

$$F_1 - F_0 = F_0 - F_1 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{F_0^{(j)}}{j!} h^j - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{F_1^{(j)}}{j!} (-h)^j$$

Umformung liefert

$$2(F_1 - F_0) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (F_0^{(j)} + (-1)^{j+1} F_1^{(j)})$$

Diese formale Potenzreihenentwicklung in h ist die Grundlage für die weiterführenden Überlegungen und wird im nachfolgenden Lemma zusammengefasst.

Lemma 3.1.1 *Es sei eine ganze Funktion $F \in C^\infty[x_0, x_0 + h]$ gegeben, welche an den Stellen x_0 und $x_1 = x_0 + h$ in Taylor-Reihen entwickelt wird. Durch Subtraktion beider Taylor-Reihen, erhält man eine Reihenentwicklung in h . Die Konvergenz dieser Reihe wird vorausgesetzt.*

Man erhält damit die analytische Entwicklung in h

$$\begin{aligned} 2(F_1 - F_0) &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} (F_0^{(j)} + (-1)^{j+1} F_1^{(j)}) h^j \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} d_j h^j, \quad d_j = \frac{1}{j!} (F_0^{(j)} + (-1)^{j+1} F_1^{(j)}) \end{aligned} \tag{3.1}$$

Die Koeffizienten d_j sind ausschließlich von der zugrundeliegenden Funktion F abhängig.

3.1 Herleitung der Trapezsumme

Sei nun $F(x)$ Stammfunktion zu einer Funktion $f(x)$. Dann gilt $F'(x) = f(x)$, insbesondere ist f beliebig oft differenzierbar, da nach Voraussetzung $F \in C^\infty[x_0, x_0 + h]$. Durch Anwendung des Hauptsatzes der Differentialrechnung und Integralrechnung wird die folgende Darstellung begründet

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx &= F(x_0 + h) - F(x_0) = F_1 - F_0 \\ &\stackrel{(3.1)}{=} \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h^2}{2 \cdot 2!}(f'_0 - f'_1) + \frac{h^3}{2 \cdot 3!}(f''_0 + f''_1) + \frac{h^4}{2 \cdot 4!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^{j+1}}{(j+1)!} (f_0^{(j)} + (-1)^j f_1^{(j)}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} f^{[j]} \quad (3.3)$$

Dabei wurde in der letzten Gleichung die abkürzende Schreibweise

$$f^{[j]} := \frac{h^{j+1}}{(j+1)!} (f_0^{(j)} + (-1)^j f_1^{(j)}), \quad j = 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

benutzt. Außerdem ist (3.3) die Ausgangsgleichung zur Rekursion der Bernoulli-Zahlen. Dazu erhalten die Koeffizienten der

$$f^{[1]}, f^{[2]}, \dots, f^{[n-1]}, \dots$$

die Bezeichnungen

$$b_j^{(0)} = \frac{1}{2}, \quad j = 2, 3, \dots, n, \dots$$

Also kann (3.3) geschrieben werden als

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \sum_{j=1}^{\infty} b_{j+1}^{(0)} f^{[j]} \quad (3.5)$$

Der Term $\frac{h}{2}(f_0 + f_1)$ ist gerade die einfache Trapezregel. Die hinteren Terme in (3.2) liefern die Fehlerentwicklung in Potenzen von h der Trapezregel.

Im nächsten Schritt werden die ungeraden h -Potenzen sukzessive eliminiert, um eine Fehlerentwicklung in geraden h -Potenzen zu erhalten. Gleichzeitig wird bei jeder Elimination eine Bernoulli-Zahl erzeugt.

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

ELIMINATION DER UNGERADEN H-POTENZEN, REKURSION DER BERNOULLI-ZAHLEN

Zur Veranschaulichung des Verfahrens werden die Eliminationen von $f^{[2]}$ und $f^{[4]}$ ausgeführt. Anhand von (3.4) stellt man fest, dass so die h -Potenzen h^3 und h^5 eliminiert werden.

Parallel dazu werden die Rechnungen mit Gleichung (3.5) geführt, um die Rekursion der Bernoulli-Zahlen herleiten zu können.

ELIMINATION VON $f^{[2]}$

In Gleichung (3.1) wird $F(x) := f'(x)$ gesetzt

$$2(f'_1 - f'_0) = h(f''_0 + f''_1) + \frac{h^2}{2!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \frac{h^3}{3!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) + \dots$$

und anschließende Multiplikation mit $\frac{h^3}{3!}$ ergibt

$$\frac{2!}{3!}h^2(f'_1 - f'_0) = \frac{h^3}{3!}(f''_0 + f''_1) + \frac{h^4}{2! \cdot 3!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \frac{h^5}{3! \cdot 3!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) + \dots$$

Umstellung nach $\frac{h^3}{3!}(f''_0 + f''_1) = f^{[2]}$ zeigt

$$\begin{aligned} f^{[2]} &= \frac{2!}{3!}h^2(f'_1 - f'_0) - \frac{h^4}{2! \cdot 3!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) - \frac{h^5}{3! \cdot 3!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) - \dots \\ &= -\frac{1}{3} \left(\frac{2}{2!}h^2(f'_0 - f'_1) + \frac{h^4}{2! \cdot 2!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \frac{h^5}{2! \cdot 3!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) + \dots \right) \\ &= -\frac{1}{3} \left(2 \cdot f^{[1]} + \frac{4!}{2! \cdot 2!} \cdot \frac{h^4}{4!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \frac{5!}{2! \cdot 3!} \cdot \frac{h^5}{5!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) + \dots \right) \\ &= -\frac{1}{3} \left(2 \cdot f^{[1]} + \binom{4}{2}f^{[3]} + \binom{5}{2}f^{[4]} + \dots \right) \end{aligned}$$

So hat man eine Darstellung für $f^{[2]}$ erhalten und setzt diese in (3.3) ein

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2}f^{[1]} + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{3} \left(2f^{[1]} + \binom{4}{2}f^{[3]} + \binom{5}{2}f^{[4]} + \dots \right) \right. \\ &\quad \left. + \binom{n}{2}f^{[n-1]} + \dots \right) + \frac{1}{2}f^{[3]} + \frac{1}{2}f^{[4]} + \dots + \frac{1}{2}f^{[n-1]} + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{3} \right) f^{[1]} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{3} \binom{4}{2} \right) f^{[3]} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{3} \binom{5}{2} \right) f^{[4]} + \dots \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{3} \binom{n}{2} \right) f^{[n-1]} + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{6}f^{[1]} - \frac{3}{6}f^{[3]} - \frac{7}{6}f^{[4]} - \dots - \left(\frac{3}{6} - \frac{2}{6} \binom{n}{2} \right) f^{[n-1]} - \dots \end{aligned} \tag{3.6}$$

3.1 Herleitung der Trapezsumme

Die gleiche Rechnung wird mit Gleichung (3.5) gemacht

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + b_2^{(0)} f^{[1]} + b_3^{(0)} \left(-\frac{1}{3} \left(2f^{[1]} + \binom{4}{2} f^{[3]} + \binom{5}{2} f^{[4]} + \dots \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \binom{n}{2} f^{[n-1]} + \dots \right) \right) + b_4^{(0)} f^{[3]} + b_5^{(0)} f^{[4]} + \dots + b_n^{(0)} f^{[n-1]} + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \left(b_2^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{2}{3} \right) f^{[1]} + \left(b_4^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{4}{2} \right) f^{[3]} \\ &\quad + \left(b_5^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{5}{2} \right) f^{[4]} + \dots + \left(b_n^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{n}{2} \right) f^{[n-1]} + \dots \end{aligned}$$

Der Koeffizient von $f^{[1]}$ erhält die feste Bezeichnung B_2 und stellt die erste erzeugte Bernoulli-Zahl dar

$$B_2 := b_2^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$$

Die weiteren Koeffizienten werden bei der nächsten Elimination modifiziert und werden mit $b_j^{(1)}$ ($j = 4, 5, \dots$) bezeichnet

$$\begin{aligned} b_4^{(1)} &= b_4^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{4}{2} = -\frac{3}{6} \\ b_5^{(1)} &= b_5^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{5}{2} = -\frac{7}{6} \\ &\vdots \\ b_n^{(1)} &= b_n^{(0)} - b_3^{(0)} \frac{1}{3} \binom{n}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \binom{n}{2} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Die Hochzahl in der Klammer gibt die Anzahl der durchgeführten Eliminationen an, bis hierhin also eine Einzige. Danach steht die modifizierte Gleichung

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2 f^{[1]} + \sum_{j=3}^{\infty} b_{j+1}^{(1)} f^{[j]} \quad (3.7)$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

ELIMINATION VON $f^{[4]}$

Zur Elimination von $f^{[4]}$ wird in (3.1) $F(x) := f^{(3)}(x)$ gesetzt und danach mit $\frac{h^4}{5!}$ multipliziert

$$\frac{2!}{5!}h^4(f_1^{(3)} - f_0^{(3)}) = \frac{h^5}{5!}(f_0^{(4)} + f_1^{(4)}) + \frac{h^6}{2! \cdot 5!}(f_0^{(5)} - f_1^{(5)}) + \frac{h^7}{3! \cdot 5!}(f_0^{(6)} + f_1^{(6)}) + \dots$$

Mit (3.4) folgt nach Umstellung

$$\begin{aligned} f^{[4]} &= \frac{2!}{5!}h^4(f_1^{(3)} - f_0^{(3)}) - \frac{h^6}{2! \cdot 5!}(f_0^{(5)} - f_1^{(5)}) - \frac{h^7}{3! \cdot 5!}(f_0^{(6)} + f_1^{(6)}) - \dots \\ &= -\frac{1}{5} \left(\frac{2}{4!}h^4(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \frac{6!}{2! \cdot 4!} \frac{h^6}{6!}(f_0^{(5)} - f_1^{(5)}) + \frac{7!}{3! \cdot 4!} \frac{h^7}{7!}(f_0^{(6)} + f_1^{(6)}) + \dots \right) \\ &= -\frac{1}{5} \left(2 \cdot f^{[3]} + \binom{6}{4}f^{[5]} + \binom{7}{4}f^{[6]} + \binom{8}{4}f^{[7]} + \dots \right) \end{aligned}$$

Aus Platzgründen wird in der nachfolgenden Rechnung auf die Darstellung des hinteren Terms zu $f^{[n-1]}$ verzichtet. Einsetzen von $f^{[4]}$ in (3.6)

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{6}f^{[1]} - \frac{3}{6}f^{[3]} - \frac{7}{6} \left(-\frac{1}{5} \left(2 \cdot f^{[3]} + \binom{6}{4}f^{[5]} + \binom{7}{4}f^{[6]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \binom{8}{4}f^{[7]} + \dots \right) \right) - \frac{12}{6}f^{[5]} - \frac{18}{6}f^{[6]} - \frac{25}{6}f^{[7]} - \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{6}f^{[1]} + \left(-\frac{3}{6} + \frac{14}{30} \right) f^{[3]} + \left(-\frac{12}{6} + \frac{7}{30} \binom{6}{4} \right) f^{[5]} \\ &\quad + \left(-\frac{18}{6} + \frac{7}{30} \binom{7}{4} \right) f^{[6]} + \left(-\frac{25}{6} + \frac{7}{30} \binom{8}{4} \right) f^{[7]} + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{6}f^{[1]} - \frac{1}{30}f^{[3]} + \frac{45}{30}f^{[5]} + \frac{155}{30}f^{[6]} + \frac{365}{30}f^{[7]} + \dots \end{aligned}$$

Parallel dazu wird die Elimination von $f^{[4]}$ in Gleichung (3.7) noch ausgeführt

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2f^{[1]} + b_4^{(1)}f^{[3]} + b_5^{(1)} \left(-\frac{1}{5} \left(2 \cdot f^{[3]} + \binom{6}{4}f^{[5]} + \binom{7}{4}f^{[6]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \dots + \binom{n}{4}f^{[n-1]} \right) \right) + b_6^{(1)}f^{[5]} + b_7^{(1)}f^{[6]} + \dots + b_n^{(1)}f^{[n-1]} + \dots \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2f^{[1]} + \left(b_4^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{2}{5} \right) f^{[3]} + \left(b_6^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{6}{4} \right) f^{[5]} \\ &\quad + \left(b_7^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{7}{4} \right) f^{[6]} + \dots + \left(b_n^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{n}{4} \right) f^{[n-1]} + \dots \end{aligned}$$

3.1 Herleitung der Trapezsumme

Es fällt auf, dass bei der Elimination von $f^{[4]}$ der Koeffizient von $f^{[1]}$ nicht mehr verändert wurde und daher die feste Bezeichnung B_2 rechtfertigt. Ebenso erhält der Koeffizient von $f^{[3]}$ von jetzt ab die feste Bezeichnung B_4

$$B_4 := b_4^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{2}{5} = -\frac{1}{30}$$

Die hinteren Glieder werden passenderweise mit $b_j^{(2)}$ bezeichnet, da diese bei der nächsten Elimination wieder modifiziert werden

$$\begin{aligned} b_6^{(2)} &= b_6^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{6}{4} = \frac{45}{30} \\ b_7^{(2)} &= b_7^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{7}{4} = \frac{155}{30} \\ &\vdots \\ b_n^{(2)} &= b_n^{(1)} - b_5^{(1)} \frac{1}{5} \binom{n}{4} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Nach zwei Eliminationen erhält man die folgende Entwicklung für das Integral

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2 f^{[1]} + B_4 f^{[3]} + \sum_{j=5}^{\infty} b_{j+1}^{(1)} f^{[j]}$$

Nach diesen einführenden Berechnungen wird nun eine allgemeine Vorschrift zur Elimination der geraden $f^{[n]}$ vorgestellt.

Lemma 3.1.2 *Mit der Reihenentwicklung (3.1)*

$$2(F_1 - F_0) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} (F_0^{(j)} + (-1)^{j+1} F_1^{(j)}) h^j$$

in Potenzen nach h ergibt sich mit den folgenden zwei Schritten eine allgemeine Vorschrift zur Elimination der geraden $f^{[n]}$.

i) Man setze $F(x) = f^{(2n-1)}(x)$ in Gleichung (3.1) und

ii) multipliziere (3.1) mit $\frac{h^{2n}}{(2n+1)!}$

Dann folgt

$$f^{[2n]} := -\frac{1}{2n+1} \left(2f^{[2n-1]} + \binom{2n+2}{2n} f^{[2n+1]} + \binom{2n+3}{2n} f^{[2n+2]} + \dots \right) \quad (3.8)$$

für $n = 1, 2, 3, \dots$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Ausgehend von Gleichung (3.3) bzw. (3.5) wird bei jeder Elimination $f^{[2n]}$ der Koeffizient des Vorgängers $f^{[2n-1]}$ noch einmal verändert. Alle davor stehenden Einträge bleiben unberührt und somit stehen bis $f^{[2n]}$ nur noch ungerade $f^{[n]}$, also

$$f^{[2n-1]}, f^{[2n-3]}, \dots, f^{[1]}$$

mit den Bernoulli-Zahlen $B_{2n}, B_{2n-2}, \dots, B_2$ als Koeffizienten, deren Rekursionsvorschrift nach dem Beweis des Lemmas erläutert wird.

Hingegen stehen nach $f^{[2n]}$ alle ungeraden

$$f^{[2n+1]}, f^{[2n+3]}, \dots$$

und speziell alle geraden Anteile

$$f^{[2n+2]}, f^{[2n+4]}, \dots$$

die immer wieder modifiziert werden.

Beweis Lemma (3.1.2).

In (3.1) wird $F(x) = f^{(2n-1)}(x)$ gesetzt. Dann ist

$$2(f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)})$$

anschließend mit $\frac{h^{2n}}{(2n+1)!}$ multipliziert. Es folgt

$$\begin{aligned} & \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \cdot 2(f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) \\ &= \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \\ &= \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \cdot \frac{h}{1} (f_0^{(2n)} + f_1^{(2n)}) + \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \sum_{j=2}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \\ &\stackrel{(3.4)}{=} f^{[2n]} + \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \sum_{j=2}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \end{aligned}$$

3.1 Herleitung der Trapezsumme

Umstellung nach $f^{[2n]}$ liefert

$$\begin{aligned}
 f^{[2n]} &= \frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \left(2(f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) - \sum_{j=2}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \right) \\
 &= -\frac{h^{2n}}{(2n+1)!} \left(2(f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{h^j}{j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \right) \\
 &= -\frac{1}{(2n+1)} \left(2 \cdot \frac{h^{2n}}{(2n)!} (f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{h^{2n+j}}{(2n)! \cdot j!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \right) \\
 &= -\frac{1}{(2n+1)} \left(2 \cdot \frac{h^{2n}}{(2n)!} (f_1^{(2n-1)} - f_0^{(2n-1)}) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{(2n+j)!}{(2n)! \cdot j!} \cdot \frac{h^{2n+j}}{(2n+j)!} (f_0^{(2n-1+j)} + (-1)^{j+1} f_1^{(2n-1+j)}) \right) \\
 &\stackrel{(3.4)}{=} -\frac{1}{(2n+1)} \left(2f^{[2n-1]} + \sum_{j=2}^{\infty} \binom{2n+j}{2n} f^{[2n-1+j]} \right)
 \end{aligned}$$

Indexverschiebung bei der Summe führt zu dem Ergebnis

$$\begin{aligned}
 f^{[2n]} &= -\frac{1}{2n+1} \left(2f^{[2n-1]} + \sum_{j=1}^{\infty} \binom{2n+j+1}{2n} f^{[2n+j]} \right) \\
 &= -\frac{1}{2n+1} \left(2f^{[2n-1]} + \binom{2n+2}{2n} f^{[2n+1]} + \binom{2n+3}{2n} f^{[2n+2]} + \dots \right)
 \end{aligned}$$

□

Die Bernoulli-Zahlen werden rekursiv erzeugt. Bemerkenswert ist, dass die Erzeugung hier - im Gegensatz zu sonstigen Definitionen in der Literatur - nicht rekursiv aus schon berechneten Bernoullizahlen geschieht. In Ausgangsgleichung (3.5) werden die Startwerte $b_i^{(0)} = \frac{1}{2}$ ($i = 2, 3, \dots$) festgelegt und durch sukzessive Anwendung der Vorschrift (3.8) erhält man die K geraden Bernoulli-Zahlen B_2, B_4, \dots, B_{2K} . Es sei angemerkt, dass die beiden ersten Bernoulli-Zahlen $B_0 = 1$ und $B_1 = -\frac{1}{2}$ bei der Rekursion nicht miterzeugt werden.

Korollar 3.1.3 (Rekursion der Bernoulli-Zahlen)

Die Erzeugung der K geraden Bernoulli-Zahlen

$$B_2, B_4, \dots, B_{2K}$$

wird mit den Startwerten

$$b_i^{(0)} := \frac{1}{2}, \quad i = 2, 3, \dots, 2K + 1$$

der äußeren Schleife mit Laufindex $n = 1, 2, \dots, K$

$$B_{2n} := b_{2n}^{(n-1)} - b_{2n+1}^{(n-1)} \frac{2}{2n+1}$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

und der inneren Schleife mit $j = 2n + 2, 2n + 3, \dots, 2K + 1$

$$b_j^{(n)} := b_j^{(n-1)} - b_{2n+1}^{(n-1)} \frac{1}{2n+1} \binom{j}{2n}$$

realisiert.

Diese Rekursionsvorschrift kann in wenigen Zeilen in Matlab implementiert werden und wird im letzten Kapitel vorgestellt.

Nach den ersten n Eliminationen erhält man die folgende Modifikation der Gleichung (3.5)

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2 f^{[1]} + B_4 f^{[3]} + \dots + B_{2n} f^{[2n-1]} + \sum_{j=2n+1}^{\infty} b_{j+1}^{(n)} f^{[j]} \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2 f^{[1]} + B_4 f^{[3]} + \dots + B_{2n} f^{[2n-1]} + \mathcal{O}(h^{2n+2}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Liegt ein Intervall $[a, b]$ vor, so gilt die Entwicklung (3.9) für ein Teilintervall und die summierte Potenzreihenentwicklung der STR kann durch Anwendung der obigen Berechnungen auf alle Teilintervalle realisiert werden. Dazu wird $[a, b]$ in äquidistante Teilintervalle mit der Länge $h := h_N = \frac{b-a}{N}$ aufgeteilt. Für die äquidistanten Stützstellen gilt

$$x_m = a + m \cdot h, \quad m = 0, 1, \dots, N$$

Es folgt somit

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} [\dots] + \int_{x_1}^{x_2} [\dots] + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} [\dots] \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + B_2 f_1^{[1]} + B_4 f_1^{[3]} + \dots \\ &\quad + \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + B_2 f_2^{[1]} + B_4 f_2^{[3]} + \dots \\ &\quad \vdots \\ &\quad + \frac{h}{2}(f_{N-1} + f_N) + B_2 f_N^{[1]} + B_4 f_N^{[3]} + \dots \end{aligned}$$

Mit (3.4) gilt

$$\begin{aligned} &= T_N^S f + B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_0 - f'_1) \right) + B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) \right) + \dots \\ &\quad + B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_1 - f'_2) \right) + B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_1^{(3)} + f_2^{(3)}) \right) + \dots \\ &\quad \vdots \\ &\quad + B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_{N-1} - f'_N) \right) + B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_{N-1}^{(3)} - f_N^{(3)}) \right) + \dots \end{aligned}$$

3.2 Hermite-Quadratur (Trapezsumme für $K=1$)

Der Term $T_N^S f$ gibt die summierte STR ohne Fehlerkorrektur an. Wie man weiter sieht, heben sich alle Einträge die zu derselben Bernoulli-Zahl stehen, bis auf den ersten und den letzten, weg. Das ist eine sog. Teleskopsumme. Damit steht die Potenzreihenentwicklung der STR für eine beliebig oft differenzierbare Funktion $f \in C^\infty[a, b]$

$$(T_N^S f)(h) = I(f) + \sum_{j=1}^{\infty} B_{2j} \frac{h^{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a))$$

Oft wird aber auch eine Funktion $f \in C^{2K+2}[a, b]$ für $K < \infty$ vorliegen. Dann wird die Potenzreihenentwicklung bei K abgebrochen und man erhält die erste Euler-MacLaurinsche Summenformel

$$\begin{aligned} (T_N^S f)(h) &:= \frac{b-a}{N} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{m=1}^{N-1} f(x_m) + \frac{f(b)}{2} \right) \\ &= I(f) + \sum_{j=1}^K B_{2j} \frac{h^{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)) + \sum_{i=2K+1}^{\infty} b_{i+1} f^{[i]} \\ &= I(f) + \sum_{j=1}^K B_{2j} \frac{h^{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)) + \mathcal{O}(h^{2K+2}) \end{aligned}$$

für $f \in C^{2K+2}[a, b]$. Das heißt, die Formel ist exakt für $f^{(2K+2)} = 0$. Anders ausgedrückt, ein Polynom $p \in \pi_{2K+1}$ wird exakt integriert.

Für $K = 1$ folgt aus der ersten Euler-MacLaurinschen Summenformel

$$(T_N^S f)(h) := \frac{b-a}{N} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{m=1}^{N-1} f(x_m) + \frac{f(b)}{2} \right) + \frac{h^2}{12} (f'(a) - f'(b)) + \mathcal{O}(h^4)$$

Das ist genau die zusammengesetzte Hermitesche Quadraturformel, die Polynome dritten Grades exakt integriert. Die Formel wird im anschließenden Abschnitt durch Integration des Hermite-Interpolationspolynoms bestätigt.

3.2 Hermite-Quadratur (Trapezsumme für $K=1$)

In diesem Abschnitt soll die erste Euler-MacLaurinsche Summenformel für den Fall $K = 1$ über eine andere Methode hergeleitet werden. Durch Aufstellen des kubischen Hermite-Interpolationspolynoms erhält man eine Quadraturformel, in welcher die jeweils erste Ableitung der Intervallrandpunkte enthalten ist.

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

3.2.1 Intervallweise Hermite-Interpolation

Für das zugrundeliegende Teilintervall

$$[x_{j-1}, x_j] \quad \text{mit } h_j = x_j - x_{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

gelten die folgenden vier Interpolationsbedingungen

$$\begin{aligned} p(x_{j-1}) &= f(x_{j-1}), & p(x_j) &= f(x_j) \\ p'(x_{j-1}) &= f'(x_{j-1}), & p'(x_j) &= f'(x_j) \end{aligned}$$

durch die ein Polynom dritten Grades festgelegt wird.



Abbildung 3.1: Bedingungen der kubischen Hermite-Interpolation für ein Teilintervall

Für das zu interpolierende Polynom $p_{4,j}(x)$ für $(x_{j-1} \leq x \leq x_j)$ wird die folgende Variablentransformation benutzt

$$x =: x_{j-1} + sh_j, \quad s \in [0, 1], \quad \text{also } s := \frac{x - x_{j-1}}{h_j}$$

durch die der ganze Prozess auf das Einheitsintervall $[0, 1]$ transformiert wird. Das Polynom genügt dem Ansatz

$$p_{4,j}(x_{j-1} + sh_j) = c_0 + c_1s + c_2s^2 + c_3s^3, \quad 0 \leq s \leq 1 \quad (3.10)$$

mit der ersten Ableitung

$$p'_{4,j}(x_{j-1} + sh_j) = c_1 + 2c_2s + 3c_3s^2, \quad 0 \leq s \leq 1$$

Weiter muß die folgende Beziehung der ersten Ableitung berücksichtigt werden

$$p_{4,j}(x) = \frac{dp_{4,j}(x)}{dx} = \frac{1}{h_j} \frac{dp_{4,j}(x_{j-1} + sh_j)}{ds}$$

Mit diesen Vorbereitungen kann nun das zugehörige lineare Gleichungssystem aufgestellt werden

$$\begin{aligned} c_0 &= f(x_{j-1}) \\ c_0 + c_1 + c_2 + c_3 &= f(x_j) \\ c_1 &= h_j \cdot f'(x_{j-1}) \\ c_1 + 2c_2 + 3c_3 &= h_j \cdot f'(x_j) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Dieses wird mit Austauschmethode gelöst:

3.2 Hermite-Quadratur (Trapezsumme für $K=1$)

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c|cccc}
 & c_0 & c_1 & c_2 & c_3 \\
 \hline
 f(x_{j-1}) & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 f(x_j) & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 h_j f'(x_{j-1}) & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 h_j f'(x_j) & 0 & 1 & 2 & 3
 \end{array} \\
 \rightarrow \\
 \begin{array}{c|cccc}
 & f(x_{j-1}) & c_1 & c_2 & c_3 \\
 \hline
 c_0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 f(x_j) & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 h_j f'(x_{j-1}) & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 h_j f'(x_j) & 0 & 1 & 2 & 3
 \end{array} \\
 \rightarrow \\
 \begin{array}{c|cccc}
 & f(x_{j-1}) & f(x_j) & c_2 & c_3 \\
 \hline
 c_0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 c_1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\
 h_j f'(x_{j-1}) & -1 & 1 & -1 & -1 \\
 h_j f'(x_j) & -1 & 1 & 1 & 2
 \end{array} \\
 \rightarrow \\
 \begin{array}{c|cccc}
 & f(x_{j-1}) & f(x_j) & h_j f'(x_{j-1}) & c_3 \\
 \hline
 c_0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 c_1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 c_2 & -1 & 1 & -1 & -1 \\
 h_j f'(x_j) & -2 & 2 & -1 & 1
 \end{array} \\
 \rightarrow \\
 \begin{array}{c|cccc}
 & f(x_{j-1}) & f(x_j) & h_j f'(x_{j-1}) & h_j f'(x_j) \\
 \hline
 c_0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 c_1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 c_2 & -3 & 3 & -2 & -1 \\
 c_3 & 2 & -2 & 1 & 1
 \end{array}
 \end{array}$$

Für die rechte Seite $(f(x_{j-1}), f(x_j), f(x_{j-1}), f(x_j))^T$ im Gleichungssystem (3.11) werden nacheinander die vier Einheitsvektoren $e_1, e_2, e_3, e_4 \in \mathbb{R}^4$ eingesetzt. Dies soll exemplarisch für e_1 ausgeführt werden, als Ergebnis erhält man für die Koeffizienten c_0, c_1, c_2, c_3 jeweils einen Zahlenwert. Also

$$\begin{array}{c|cccc}
 & 1 & 0 & h_j \cdot 0 & h_j \cdot 0 \\
 \hline
 c_0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 c_1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 c_2 & -3 & 3 & -2 & -1 \\
 c_3 & 2 & -2 & 1 & 1
 \end{array}$$

Hieraus folgt

$$c_0 = 1, c_1 = 0, c_2 = -3, c_3 = 2$$

Einsetzen in (3.10) liefert das erste lokale Hermite-Basispolynom

$$\psi_{1,j}^{(4)}(x_{j-1} + sh_j) = 1 - 3s^2 + 2s^3, \quad 0 \leq s \leq 1$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Verfährt man so weiter und setzt die drei weiteren Einheitsvektoren ein, so erhält man die insgesamt vier lokalen Hermite-Basispolynome für das Teilintervall $[x_{j-1}, x_j]$

$$\begin{aligned}
 \psi_{1,j}^{(4)}(x_{j-1} + sh_j) &= 1 - 3s^2 + 2s^3 \quad \text{für } 0 \leq s \leq 1 \\
 \psi_{2,j}^{(4)}(x_{j-1} + sh_j) &= 3s^2 - 2s^3 \\
 \omega_{1,j}^{(4)}(x_{j-1} + sh_j) &= h_j(s - 2s^2 + s^3) \\
 \omega_{2,j}^{(4)}(x_{j-1} + sh_j) &= h_j(-s^2 + s^3)
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Insgesamt läßt sich somit das Hermite-Interpolationspolynom $p_{4,j}(x)$ als Linearkombination schreiben

$$p_{4,j}(x) = f(x_{j-1})\psi_{1,j}^{(4)}(x) + f(x_j)\psi_{2,j}^{(4)}(x) + f'(x_{j-1})\omega_{1,j}^{(4)}(x) + f'(x_j)\omega_{2,j}^{(4)}(x)$$

Für das Gesamtintervall existieren dementsprechend N kubische Polynomstücke $p_{4,1}(x), p_{4,2}(x), \dots, p_{4,N}(x)$.

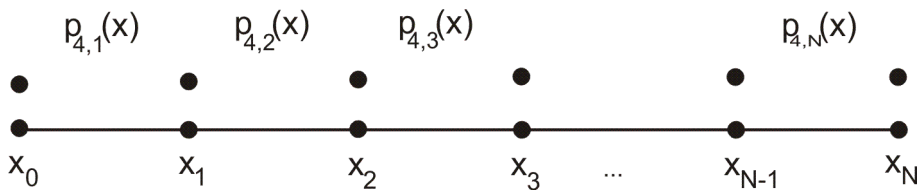


Abbildung 3.2: Bedingungen und Basispolynome $p_{4,j}(x)$ des Gesamtintervalls

3.2.2 Quadraturformel von Hermite

Zur Konstruktion der Hermite-Quadraturformel werden die einzelnen Polynome $p_{4,j}(x)$ auf den jeweiligen Teilintervallen $[x_{j-1}, x_j]$ integriert. Die Stützstellen haben nun den festen einheitlichen Abstand $h_N = x_j - x_{j-1}$

$$Q_N^H f := \sum_{j=1}^N \left(\int_{x_{j-1}}^{x_j} p_{4,j}(x) dx \right)$$

3.2 Hermite-Quadratur (Trapezsumme für $K=1$)

Mit der Substitution $x = x_{j-1} + sh_N$ gilt für die Länge des Teilintervalls $h_N = 1$ und es können die in (3.12) hergeleiteten Polynomstücke angesetzt werden

$$\begin{aligned} Q_N^H f &= \sum_{j=1}^N \left(\int_0^1 h_N p_{4,j}(x_{j-1} + sh_N) ds \right) \\ &= \sum_{j=1}^N \left(h_N f(x_{j-1}) \int_0^1 (1 - 3s^2 + 2s^3) ds + h_N f(x_j) \int_0^1 (3s^2 - 2s^3) ds \right. \\ &\quad \left. + h_N f'(x_{j-1}) \int_0^1 h_N (s - 2s^2 + s^3) ds + h_N f'(x_j) \int_0^1 h_N (-s^2 + s^3) ds \right) \end{aligned}$$

Ausführen der Integrale ergibt

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=1}^N \left(h_N f(x_{j-1}) \left[s - s^3 + \frac{1}{2}s^4 \right]_0^1 + h_N f(x_j) \left[s^3 - \frac{1}{2}s^4 \right]_0^1 \right. \\ &\quad \left. + h_N^2 f'(x_{j-1}) \left[\frac{1}{2}s^2 - \frac{2}{3}s^3 + \frac{1}{4}s^4 \right]_0^1 + h_N^2 f'(x_j) \left[-\frac{1}{3}s^3 + \frac{1}{4}s^4 \right]_0^1 \right) \\ &= \sum_{j=1}^N \left(h_N f(x_{j-1}) \cdot \frac{1}{2} + h_N f(x_j) \cdot \frac{1}{2} + h_N^2 f'(x_{j-1}) \cdot \frac{1}{12} + h_N^2 f'(x_j) \cdot \frac{1}{12} \right) \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{h_N}{2} (f(x_{j-1}) + f(x_j)) + \frac{h_N^2}{12} (f'(x_{j-1}) - f'(x_j)) \right) \end{aligned}$$

Bei Ausführung der Summation heben sich im hinteren Teil der Summe die Ableitungsterme, bis auf den Ersten und Letzten, alle anderen weg (Telekopsomme). Damit ist

$$\begin{aligned} Q_N^H f &= h \cdot \left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{N-1}) + \frac{f(x_N)}{2} \right) + \frac{h^2}{12} (f'(x_0) - f'(x_N)) \\ &= \frac{b-a}{N} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{f(b)}{2} \right) + \frac{(b-a)^2}{12} (f'(a) - f'(b)) \end{aligned}$$

für $h := h_N = \frac{b-a}{N}$.

Das ist nun die zusammengesetzte Quadraturformel von Hermite, die mit der ersten Euler-MacLaurinschen Summenformel, für $K = 1$, übereinstimmt. Ein kubisches Polynom $p \in \pi_3$ wird exakt integriert.

3.3 Asymptotische Entwicklung der Mittelpunkregel

In diesem Kapitel wird weitestgehend analog zur STR die MPR in eine Potenzreihe dargestellt. Dazu sei eine Funktion $f \in C^\infty[x_0, x_1]$ ($x_1 = x_0 + h$) vorgelegt. Diese Funktion wird an den Stellen x_0 und x_1 in Taylor-Reihen entwickelt

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^{(j)}(x_0)}{j!} (x - x_0)^j$$

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^{(j)}(x_1)}{j!} (x - x_1)^j$$

und an den Stellen $x_0 + \frac{h}{2}$ und $x_1 - \frac{h}{2}$ ausgewertet

$$f_{1/2} := f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^{(j)}(x_0)}{j!} \left(x_0 + \frac{h}{2} - x_0\right)^j$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f_0^{(j)}}{j!} \left(\frac{h}{2}\right)^j$$

$$f_{1/2} := f\left(x_1 - \frac{h}{2}\right) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^{(j)}(x_1)}{j!} \left(x_1 - \frac{h}{2} - x_1\right)^j$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f_1^{(j)}}{j!} \left(-\frac{h}{2}\right)^j$$

Addition der beiden Gleichungen liefert

$$2f_{1/2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (f_0^{(j)} + (-1)^j f_1^{(j)}) \left(\frac{h}{2}\right)^j$$

$$= f_0 + f_1 + \frac{h}{2}(f_0' - f_1') + \frac{h^2}{4 \cdot 2!}(f_0'' + f_1'') + \frac{h^3}{8 \cdot 3!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \dots$$

Multiplikation mit h und Division durch 2 zeigt

$$h \cdot f_{1/2} = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h^2}{4}(f_0' - f_1') + \frac{h^3}{8 \cdot 2!}(f_0'' + f_1'') + \frac{h^4}{16 \cdot 3!}(f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \dots$$

$$= \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2 \cdot 2} h^2 (f_0' - f_1') + \frac{1 \cdot 3}{2^3 \cdot 3!} h^3 (f_0'' + f_1'') + \frac{1 \cdot 4}{2^4 \cdot 4!} h^4 (f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) + \dots$$

$$\stackrel{(3.4)}{=} \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2} f^{[1]} + \frac{3}{2^3} f^{[2]} + \frac{4}{2^4} f^{[3]} + \dots$$

3.3 Asymptotische Entwicklung der Mittelpunkregel

Zum Schluß wird die Gleichung nach $\frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2}f^{[1]}$ umgestellt

$$\begin{aligned} \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2}f^{[1]} &= h \cdot f_{1/2} - \frac{3}{2^3}f^{[2]} - \frac{4}{2^4}f^{[3]} - \dots \\ &= h \cdot f_{1/2} - \sum_{j=2}^{\infty} \frac{j+1}{2^{j+1}}f^{[j]} \end{aligned} \quad (3.13)$$

An dieser Stelle wird (3.13) in die schon bekannte Entwicklung (3.3)

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{1}{2}f^{[1]} + \frac{1}{2} \sum_{k=2}^{\infty} f^{[k]}$$

eingesetzt und man erhält

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = h \cdot f_{1/2} - \sum_{j=2}^{\infty} \frac{j+1}{2^{j+1}}f^{[j]} + \frac{1}{2} \sum_{k=2}^{\infty} f^{[k]}$$

Hier sieht man die enge Verwandtschaft der entwickelten STR und MPR, denn im hinteren Teil stehen bis auf $f^{[1]}$ die schon bekannten Korrekturwerte der STR. Weitere Umformung und Einfügen der $b_j^{(0)}$ liefert

$$\begin{aligned} I(f) &= h \cdot f_{1/2} + \sum_{j=2}^{\infty} \left(\frac{1}{2} - \frac{j+1}{2^{j+1}} \right) f^{[j]} \\ &= h \cdot f_{1/2} + \sum_{j=2}^{\infty} \left(\frac{2^j}{2^{j+1}} - \frac{j+1}{2^{j+1}} \right) f^{[j]} \\ &= hf_{1/2} + \sum_{j=2}^{\infty} b_{j+1}^{(0)} \cdot \frac{2^j - (j+1)}{2^j} f^{[j]}, \quad b_{j+1}^{(0)} = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Der Summand $h \cdot f_{1/2}$ stellt die einfache MPR für das Intervall $[x_0, x_1]$ dar. Mit (3.8) werden, analog zur Trapezsumme, die $f^{[2^n]}$ aufgelöst. Dann folgt

$$\begin{aligned} I(f) &= hf_{1/2} + \frac{1}{8} \left(-\frac{1}{3} \left(2f^{[1]} + \binom{4}{2}f^{[3]} + \binom{5}{2}f^{[4]} + \binom{6}{2}f^{[5]} + \dots \right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{4}f^{[3]} + \frac{11}{32}f^{[4]} + \frac{26}{64}f^{[5]} + \frac{57}{128}f^{[6]} + \frac{120}{256}f^{[7]} + \dots \\ &= hf_{1/2} - \frac{1}{24}2f^{[1]} + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{24} \binom{4}{2} \right) f^{[3]} + \left(\frac{11}{32} - \frac{1}{24} \binom{5}{2} \right) f^{[4]} \\ &\quad + \left(\frac{26}{64} - \frac{1}{24} \binom{6}{2} \right) f^{[5]} + \left(\frac{57}{128} - \frac{1}{24} \binom{7}{2} \right) f^{[6]} + \left(\frac{120}{256} - \frac{1}{24} \binom{8}{2} \right) f^{[7]} + \dots \\ &= hf_{1/2} - \frac{1}{12}f^{[1]} - 0 \cdot f^{[3]} - \frac{7}{96}f^{[4]} - \frac{7}{32}f^{[5]} - \frac{56}{128}f^{[6]} - \frac{67}{96}f^{[7]} - \dots \end{aligned}$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Elimination von $f^{[4]}$ liefert

$$\begin{aligned}
 I(f) &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{96} \left(-\frac{1}{5} \left(2f^{[3]} + \binom{6}{4}f^{[5]} + \binom{7}{4}f^{[6]} + \binom{8}{4}f^{[7]} + \dots \right) \right) \\
 &\quad - \frac{7}{32}f^{[5]} - \frac{55}{128}f^{[6]} - \frac{67}{96}f^{[7]} - \dots \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} + \frac{14}{480}f^{[3]} + \left(\frac{7}{480} \cdot 15 - \frac{7}{32} \right) f^{[5]} + \left(\frac{7}{480} \cdot 35 - \frac{55}{128} \right) f^{[6]} \\
 &\quad + \left(\frac{7}{480} \cdot 70 - \frac{67}{96} \right) f^{[7]} \dots \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f^{[3]} + 0 \cdot f^{[5]} + \frac{31}{384}f^{[6]} + \frac{31}{96}f^{[7]} + \dots
 \end{aligned}$$

Mit der Elimination von $f^{[6]}$ folgt weiter

$$\begin{aligned}
 I(f) &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f^{[3]} + \frac{31}{384} \left(-\frac{1}{7} \left(2f^{[5]} + \binom{8}{6}f^{[7]} + \binom{9}{6}f^{[8]} + \dots \right) \right) + \frac{31}{96}f^{[7]} + \dots \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f^{[3]} - \frac{62}{2688}f^{[5]} + \left(-\frac{31}{2688} \binom{8}{6} + \frac{31}{96} \right) f^{[7]} + \dots \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f^{[3]} - \frac{62}{64 \cdot 42}f^{[5]} + 0 \cdot f^{[7]} - \dots \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f^{[3]} - \frac{31}{32}B_6f^{[5]} - \dots \\
 &= \dots
 \end{aligned}$$

Nach der n -ten Rekursion sind gemäß der Vorschrift (3.8) alle $f^{[2n]}$ aufgelöst und man erhält aus Gleichung (3.14)

$$I(f) = hf_{1/2} - \sum_{j=1}^n \frac{2^{2j-1} - 1}{2^{2j-1}} B_{2j}f^{2j-1} + \mathcal{O}(h^{2n+2})$$

Da nach Voraussetzung $f \in C^\infty[x_0, x_0 + h]$ lassen sich die Rekursionen weiterführen, sodass die folgende Entwicklung erreicht wird

$$I(f) = hf_{1/2} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{2^{2j-1} - 1}{2^{2j-1}} B_{2j}f^{2j-1}$$

Diese gilt für das betrachtete Teilintervall $[x_0, x_0 + h]$.

3.3 Asymptotische Entwicklung der Mittelpunkregel

Für die summierte Entwicklung wird ein gegebenes Intervall $[a, b]$ in N gleich große Teilintervalle zerlegt und es folgt mit $h := h_N = \frac{b-a}{N}$

$$\begin{aligned}
 I(f) &= \int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} [\dots] + \int_{x_1}^{x_2} [\dots] + \dots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} [\dots] \\
 &= hf_{1/2} - \frac{1}{2}B_2f_1^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f_1^{[3]} - \dots \\
 &\quad + hf_{1/2+1} - \frac{1}{2}B_2f_2^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f_2^{[3]} - \dots \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + hf_{1/2+(N-1)} - \frac{1}{2}B_2f_N^{[1]} - \frac{7}{8}B_4f_N^{[3]} - \dots \\
 &= T_N^M f - \frac{1}{2}B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_0 - f'_1) \right) - \frac{7}{8}B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_0^{(3)} - f_1^{(3)}) \right) - \dots \\
 &\quad - \frac{1}{2}B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_1 - f'_2) \right) - \frac{7}{8}B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_1^{(3)} - f_2^{(3)}) \right) - \dots \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad - \frac{1}{2}B_2 \left(\frac{h^2}{2!} (f'_{N-1} - f'_N) \right) - \frac{7}{8}B_4 \left(\frac{h^4}{4!} (f_{N-1}^{(3)} - f_N^{(3)}) \right) - \dots
 \end{aligned}$$

Der Term $T_N^M f$ gibt die summierte MPR ohne Randkorrektur an. Wegen Teleskopsumme (Argumentation wie bei STR) entsteht mit der Beziehung $\frac{2^{2j-1}-1}{2^{2j-1}} = 1 - 2^{1-2j}$ die folgende Entwicklung der Mittelpunkregel

$$I(f) = T_N^M f + \sum_{j=1}^K (1 - 2^{1-2j}) B_{2j} \frac{h^{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a))$$

Falls f nicht beliebig oft differenzierbar ist, folgt mit Umstellung nach $T_N^M f$ die zweite Quadraturformel von Euler-MacLaurin

$$\begin{aligned}
 (T_N^M f)(h) &:= \frac{b-a}{N} \left(\sum_{m=0}^{N-1} f(x_{m+1/2}) \right) \\
 &= I(f) - \sum_{j=1}^K (1 - 2^{1-2j}) B_{2j} \frac{h^{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)) + \mathcal{O}(h^{2K+2})
 \end{aligned}$$

für $f \in C^{2K+2}[a, b]$.

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Im Fall $K = 1$ erhält man die verbesserte MPR

$$(T_N^M f)(h) = \frac{b-a}{N} \left(\sum_{m=0}^{N-1} f(x_{m+1/2}) \right) + \frac{1}{24} h^2 (f'(b) - f'(a)) + \mathcal{O}(h^4)$$

Diese Gleichung kann auch durch Integration eines Interpolationspolynom erreicht werden, wie im Abschnitt (3.4) gezeigt wird.

3.4 Interpolatorische Herleitung der entw. MPR im Fall $K=1$

Die zweite Summenformel von Euler-MacLaurin lässt sich für den Fall $K = 1$ (Funktion f sei einmal stetig differenzierbar) durch Integration eines Interpolationspolynoms herleiten. Das notwendige Interpolationspolynom wird mit der *Hermite-Birkhoff-Interpolation* bestimmt. Für dieses soll gelten

$$(B_{0,1}f)(x) = p(x) \in \pi_2$$

und erfüllt die Bedingungen

$$p(x_j) = f(x_j), \quad p'(z_{j-1}) = f'(z_{j-1}), \quad p'(z_j) = f'(z_j) \quad (3.15)$$

mit der Symmetriebeziehung bei Schrittweite h_N

$$z_{j-1} = x_j - \frac{h_N}{2}, \quad z_j = x_j + \frac{h_N}{2}, \quad z_j - z_{j-1} = h_N$$

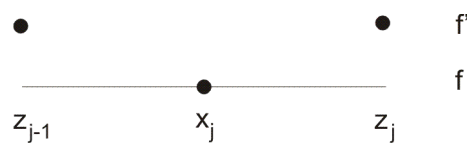


Abbildung 3.3: Bedingungen der Hermite-Birkhoff-Interpolation für ein Teilintervall

Im Gegensatz zum vorherigen Abschnitt wird hier kein Gleichungssystem zur Bestimmung der lokalen Polynome $\omega_{1,j}^{(3)}(x_j + sh_N)$ und $\omega_{2,j}^{(3)}(x_j + sh_N)$ gelöst, sondern das Restglied der konstanten Interpolation benutzt. Mit Taylor folgt zunächst

$$f(x) = f(x_j) + \int_{x_j}^x f'(t) dt \quad (3.16)$$

Weiter soll gelten, wie anfangs erwähnt

$$f(x) = p(x) \in \pi_2$$

3.4 Interpolatorische Herleitung der entw. MPR im Fall $K=1$

Hieraus folgt

$$f(x_j) = p(x_j)$$

und

$$f'(x) = p'(x) \in \pi_1$$

Also erhält man die lineare Gleichung in x

$$p'(x) = p'(x_j - \frac{h_N}{2}) \cdot \frac{x - (x_j + \frac{h_N}{2})}{-h_N} + p'(x_j + \frac{h_N}{2}) \cdot \frac{x - (x_j - \frac{h_N}{2})}{h_N} \quad (3.17)$$

Zur Probe wird in (3.17) gesetzt:

$$x = z_{j-1} = x_j - \frac{h_N}{2} \quad \text{und} \quad x = z_j = x_j + \frac{h_N}{2}$$

Mit der Substitution

$$x =: x_j + sh_N, \quad \text{mit} \quad -\frac{1}{2} \leq s \leq \frac{1}{2} \quad (3.18)$$

in (3.17) ergibt sich

$$\begin{aligned} p'(x_j + sh_N) &= p'(x_j - \frac{h_N}{2}) \cdot \frac{(x_j + sh_N) - (x_j + \frac{h_N}{2})}{-h_N} + p'(x_j + \frac{h_N}{2}) \cdot \frac{(x_j + sh_N) - (x_j - \frac{h_N}{2})}{h_N} \\ &= p'(z_{j-1}) \cdot \frac{x_j + sh_N - x_j - \frac{h_N}{2}}{-h_N} + p'(z_j) \cdot \frac{x_j + sh_N - x_j + \frac{h_N}{2}}{h_N} \\ &= p'(z_{j-1}) \cdot \frac{sh_N - \frac{1}{2}h_N}{-h_N} + p'(z_j) \cdot \frac{sh_N + \frac{1}{2}h_N}{h_N} \\ &= p'(z_{j-1}) \cdot \left(\frac{1}{2} - s\right) + p'(z_j) \cdot \left(s + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

Mit der Taylor-Formel (3.16) rechnet man das quadratische Polynomstück für das Teilintervall $[z_{j-1}, z_j]$ aus

$$\begin{aligned} p_{3,j}(x_j + sh_N) &= f(x_j) + \int_0^s \left(h_N \cdot f'(z_{j-1}) \left(\frac{1}{2} - t\right) + f'(z_j) \left(t + \frac{1}{2}\right) \right) dt \\ &= f(x_j) + f'(z_{j-1}) \cdot h_N \int_0^s \left(\frac{1}{2} - t\right) dt + f'(z_j) \cdot h_N \int_0^s \left(t + \frac{1}{2}\right) dt \\ &= f(x_j) + f'(z_{j-1}) \cdot h_N \left[\frac{1}{2}t - \frac{1}{2}t^2 \right]_0^s + f'(z_j) \cdot h_N \left[\frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{2}t \right]_0^s \\ &= f(x_j) + f'(z_{j-1}) \cdot h_N \left(\frac{1}{2}s - \frac{1}{2}s^2 \right) + f'(z_j) \cdot h_N \left(\frac{1}{2}s^2 + \frac{1}{2}s \right) \end{aligned}$$

Kapitel 3: Euler-MacLaurin Entwicklungen

Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned}\omega_{1,j}^{(3)}(x_j + sh_N) &= h_N \left(\frac{1}{2}s - \frac{1}{2}s^2 \right) \\ \omega_{2,j}^{(3)}(x_j + sh_N) &= h_N \left(\frac{1}{2}s^2 + \frac{1}{2}s \right)\end{aligned}$$

für die beiden lokalen Basispolynome erhält man durch Linearkombination

$$p_{3,j}(x_j + sh_N) = f(x_j) + f'(z_{j-1})\omega_{1,j}^{(3)}(x_j + sh_N) + f'(z_j)\omega_{2,j}^{(3)}(x_j + sh_N) \quad (3.19)$$

Für alle Teilintervalle werden nun die jeweiligen Polynomstücke konstruiert, wie in Abb. 3.2 veranschaulicht.

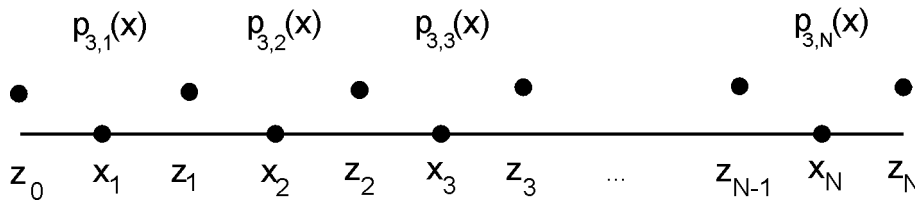


Abbildung 3.4: Bedingungen und Basispolynome $p_{3,j}(x)$ des Gesamtintervalls

Integration der einzelnen $p_{3,j}(x)$ führt auf eine Quadraturformel. Die Vermutung aufgrund der Vorgabe der Interpolationsbedingungen (3.15) liegt nahe, dass man die zweite Euler-MacLaurin Summenformel im Fall $K = 1$ erhält (also an den Randpunkten jeweils die erste Ableitung bekannt ist). Dazu werden im nächsten Schritt die $p_{3,j}(x)$ jeweils im Intervall $[z_{j-1}, z_j], j = 1, 2, \dots, N$ integriert. Anschließend wird festgestellt, dass sich die inneren Ableitungsterme aufheben und man die zweite Euler-MacLaurinsche Summenformel für $K = 1$ erhält.

Für das Gesamtintervall $[a, b]$ mit $a = z_0$ und $b = z_N$ gilt

$$\begin{aligned}Q_N^B f &:= \int_{z_0}^{z_1} p_{3,1}(x) dx + \int_{z_1}^{z_2} p_{3,2}(x) dx + \dots + \int_{z_{N-1}}^{z_N} p_{3,N}(x) dx \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\int_{z_{j-1}}^{z_j} p_{3,j}(x) dx \right)\end{aligned}$$

3.4 Interpolatorische Herleitung der entw. MPR im Fall $K=1$

Mit den geforderten Bedingungen (3.15) und der Linearkombination (3.19), sowie der Substitution (3.18) zeigt man

$$\begin{aligned}
 Q_N^B f &= \sum_{j=1}^N \left(\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} h_N \cdot p_{3,j}(x_j + sh_N) ds \right) \\
 &= \sum_{j=1}^N \left(\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} h_N \cdot f(x_j) ds + f'(z_{j-1}) h_N^2 \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2}s - \frac{1}{2}s^2 \right) ds + f'(z_j) h_N^2 \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2}s^2 + \frac{1}{2}s \right) ds \right) \\
 &= \sum_{j=1}^N \left(h_N \cdot f(x_j) [s]_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} + f'(z_{j-1}) h_N^2 \left[\frac{1}{4}s^2 - \frac{1}{6}s^3 \right]_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} + f'(z_j) h_N^2 \left[\frac{1}{6}s^3 + \frac{1}{4}s^2 \right]_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \right) \\
 &= \sum_{j=1}^N \left(f(x_j) h_N + f'(z_{j-1}) h_N^2 \left(\frac{1}{16} - \frac{1}{48} - \frac{1}{16} - \frac{1}{48} \right) + f'(z_j) h_N^2 \left(\frac{1}{48} + \frac{1}{16} + \frac{1}{48} - \frac{1}{16} \right) \right) \\
 &= \sum_{j=1}^N \left(f(x_j) h_N + f'(z_{j-1}) h_N^2 \left(-\frac{1}{24} \right) + f'(z_j) h_N^2 \left(\frac{1}{24} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Bei der Summation heben sich die inneren Ableitungsterme wie gewünscht weg und es folgt das Ergebnis

$$\begin{aligned}
 Q_N^B f &= h \cdot \left(\sum_{j=1}^N f(x_j) \right) + \frac{1}{24} h^2 (f'(b) - f'(a)), \quad h := h_N = \frac{b-a}{N} \\
 &= \frac{b-a}{N} \left(\sum_{j=1}^N f(x_j) \right) + \frac{1}{24} \frac{(b-a)^2}{N^2} (f'(b) - f'(a))
 \end{aligned}$$

Das ist die zweite Euler-MacLaurin Summenformel für $K = 1$, diese integriert ein Polynom $p \in \pi_3$ exakt.

3.5 Zusammenfassung

Die Ergebnisse aus diesem Kapitel werden im folgenden Satz zusammengefasst.

Satz 3.5.1 Für eine feste Funktion $f \in C^{2K+2}[a, b]$, mit $0 \in [a, b]$, und der Schrittweite $h = \frac{b-a}{N}$ gilt für STR und MPR die asymptotische Entwicklung in h^2

$$(Tf)(h) = I(f) + d_1 h^2 + d_2 h^4 + \dots + d_K h^{2K} + \mathcal{O}(h^{2K+2}) \quad (3.20)$$

mit $I(f) = \int_a^b f(x) dx$ und den von h unabhängigen Koeffizienten

$$d_j^S := \frac{B_{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)) \quad (\text{Sehnen trapezregel})$$

$$d_j^M := -(1 - 2^{1-2j}) \cdot \frac{B_{2j}}{(2j)!} (f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)) \quad (\text{Mittelpunktregel})$$

Hieran sieht man die enge Verwandtschaft der beiden Quadraturformeln. Die Koeffizienten der Mittelpunktregel haben lediglich den zusätzlichen Faktor $-(1 - 2^{1-2j})$.

Weiter muß die Reihe (3.20) für eine Funktion $f \in C^\infty[a, b]$ mit $h \neq 0$ nicht notwendig konvergieren (daher der Begriff asymptotische Reihe), da keine allgemeine Aussage über die Beschränktheit der Koeffizienten gemacht werden kann. Allerdings behält die Reihe trotzdem ihren Wert.

Für kleines h kann der Restterm $\mathcal{O}(h^{2K+2})$ vernachlässigt werden, so dass die Entwicklung als Polynom in h^2 behandelt werden kann, das an der Stelle $h = 0$ den gesuchten Integralwert $I(f)$ liefert.

Somit sind die Voraussetzungen zur Anwendung der Extrapolationsvorschrift gegeben. Die so durchgeführte numerische Quadratur wird *Romberg-Integration* genannt und im nächsten Kapitel ausführlich behandelt.

4 Romberg-Integration: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR

4.1 Herleitung der Rekursionsvorschrift

Wie im vorherigen Kapitel gezeigt, lassen sich zu einer festen Funktion f die Sehnentrapezregel und Mittelpunkregel mit Hilfe von Taylor in asymptotische Reihen entwickeln, die sog. Euler-MacLaurinschen Summenformeln. Mit dieser Voraussetzung ist nun Extrapolation auf die beiden Quadraturformeln anwendbar.

Die benötigten Stützstellen werden mit Hilfe der Romberg-Folge erzeugt. Natürlich sind auch andere positive monotone Nullfolgen möglich; beispielsweise die Burlisch-Folge. In der Praxis ist es nicht unerheblich sich die Wahl der Stützstellenfolge genauer zu überlegen. Denn bei schneller Schrittweitenverkleinerung erreicht man zum einen schnellere Konvergenz gegen den gesuchten Wert, allerdings steigt dann auch der Rechenaufwand schneller an.

Für das Gesamtintervall der Länge $h_0 = b - a$ wird eine Folge von Schrittweiten konstruiert

$$h_1 = q^1 h_0 = b - a, h_2 = q^2 h_0 = \frac{b - a}{2}, \dots, h_K = q^K h_0 = \frac{b - a}{2^{K-1}}$$

und anschließend die Trapezsummen

$$T_{j1} := (T^S f)(h_j) = \frac{b - a}{2^{j-1}} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{n=1}^{2^{j-1}-1} f(x_n) + \frac{f(b)}{2} \right), \quad j = 1, \dots, K$$

bzw. die Mittelpunktsammen

$$T_{j1} := (T^M f)(h_j) = \frac{b - a}{2^{j-1}} \left(\sum_{n=1}^{2^{j-1}} f\left(a + \left(j - \frac{1}{2}\right) \cdot h_j\right) \right), \quad j = 1, \dots, K$$

berechnet. Auf die Berechnung wird unten näher eingegangen. Da die folgenden Überlegungen für beide Quadraturformeln identisch sind, wird auf unterschiedliche Bezeichnungen verzichtet.

Aus Satz (3.5.1) liegt die Entwicklung (3.20) in Potenzen von h^2 vor

$$(Tf)(h) = I(f) + d_1 h^2 + d_2 h^4 + \dots + d_K h^{2K} + \mathcal{O}(h^{2K+2})$$

Kapitel 4: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR

Das weitere Vorgehen besteht darin, K Punktepaare zu bilden, um anschließend Polynominterpolation in h^2 anwenden zu können. Die Punkte

$$(h_1^2, Tf(h_1)), (h_2^2, Tf(h_2)), \dots, (h_K^2, Tf(h_K))$$

werden wie im Tableau (2.18) angeordnet

$$\begin{array}{ll} h_1^2 & Tf(h_1) = T_{11} \\ h_2^2 & Tf(h_2) = T_{21} \\ h_3^2 & Tf(h_3) = T_{31} \\ h_4^2 & Tf(h_4) = T_{41} \\ \vdots & \vdots \\ h_K^2 & Tf(h_K) = T_{K1} \end{array}$$

Durch Polynominterpolation werden analog zu dem in Lemma (2.3.1) beschriebenen Verfahren die Interpolationspolynome $T_{[m-(k-1), \dots, m]}(h^2) \in \pi_{2(k-1)}$ konstruiert, die die Interpolationsbedingung

$$T_{[m-(k-1), \dots, m]}(h_j) = (Tf)(h_j), \quad j = m - (k - 1), \dots, m$$

erfüllen. Anschließend werden diese bei $h = 0$ ausgewertet um eine Approximation des Integralwertes $I(f)$ zu erhalten. Daher kann die Extrapolationsvorschrift

$$p_{mk} := p_{m,k-1} + (p_{m,k-1} - p_{m-1,k-1}) \cdot \frac{t_m}{t_{m-k} - t_m}$$

umgeschrieben werden zu

$$T_{mk} := T_{m,k-1} + (T_{m,k-1} - T_{m-1,k-1}) \frac{h_m^2}{h_{m-(k-1)}^2 - h_m^2}$$

Bei Benutzung der Romberg-Folge kann der hintere Faktor noch vereinfacht werden

$$\frac{h_m^2}{h_{m-(k-1)}^2 - h_m^2} = \frac{\left(\frac{(b-a)}{2^m}\right)^2}{\left(\frac{(b-a)}{2^{m-(k-1)}}\right)^2 - \left(\frac{(b-a)}{2^m}\right)^2} = \frac{1}{\frac{1}{2^{2(1-k)} - 1}} = \frac{1}{4^{k-1} - 1}$$

Letztendlich steht die Vorschrift

$$T_{mk} := T_{m,k-1} + \frac{T_{m,k-1} - T_{m-1,k-1}}{4^{k-1} - 1} = \frac{4^{k-1} T_{m,k-1} - T_{m-1,k-1}}{4^{k-1} - 1} \quad (4.1)$$

mit dem zugehörigen Tableau

$$\begin{array}{cccccc} h_1^2 & T_{11} & & & & \\ h_2^2 & T_{21} & T_{22} & & & \\ h_3^2 & T_{31} & T_{32} & T_{33} & & \\ h_4^2 & T_{41} & T_{42} & T_{43} & T_{44} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ h_K^2 & T_{K1} & T_{K2} & T_{K3} & T_{K4} & \dots & T_{KK} \end{array} \quad (4.2)$$

4.1 Herleitung der Rekursionsvorschrift

In Worten: Ein neues Element der Quadraturfolge (T_{mk}) wird durch Linearkombination aus zwei Elementen der vorherigen Spalte gewonnen. Weiter kann durch hinzufügen eines zusätzlichen Interpolationspunktes ($h_{K+1}^2, Tf(h_{K+1})$) eine neue Zeile berechnet werden, die eine Verbesserung der Genauigkeit liefert.

STARTWERTE SEHNENTRAPEZREGEL

Um die Werte T_{mk} des Schemas berechnen zu können, werden als Erstes die Startwerte, sprich die Trapezsummen T_{j1} der ersten Spalte berechnet. Diese Trapezsummen entsprechen der Auswertung der asymptotischen Reihe $Tf(h_j)$, da beide über die Euler-MacLaurinsche Summenformel unmittelbar zusammenhängen. Für die Sehnentrapezregel gilt

$$T_{j1} := (T^S f)(h_j) = \frac{b-a}{2^{j-1}} \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{n=1}^{2^{j-1}-1} f(x_n) + \frac{f(b)}{2} \right), \quad j = 1, \dots, K$$

Also

$$\begin{aligned} T_{11} &= (b-a) \left(\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right) \\ T_{21} &= \frac{b-a}{2} \left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + \frac{f(b)}{2} \right) \\ T_{31} &= \frac{b-a}{4} \left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) + \frac{f(b)}{2} \right) \\ &\vdots \\ T_{K1} &= \frac{b-a}{2^{K-1}} \left(\frac{f(a)}{2} + f(a+h_K) + f(a+2h_K) + \dots + f(b-h_K) + \frac{f(b)}{2} \right) \end{aligned}$$

Zur Berechnung der j -ten Trapezsumme T_{j1} sind also $2^{j-1} + 1$ Funktionsauswertungen der Funktion f nötig. Da bei vorherigen Schritten berechnete Funktionswerte wieder benutzt werden, lässt sich die Berechnung der Startwerte noch vereinfachen.

Lemma 4.1.1 *Unter Verwendung der Romberg-Folge wird die Schrittweite h_0 in einer neuen Zeile immer wieder halbiert und somit lassen sich die Startwerte T_{k1} rekursiv berechnen durch*

$$T_{j1} = \frac{1}{2} T_{j-1,1} + h_j \sum_{\kappa=1}^{2^{j-2}} f(a + (2\kappa - 1) \cdot h_j), \quad j = 1, \dots, K$$

Kapitel 4: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR

Beweis.

Vollständige Induktion über j .

$j = 2$: (Induktionsanfang).

$$\begin{aligned} T_{21} &= \frac{b-a}{2} \left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + \frac{f(b)}{2} \right) = h_2 \left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + \frac{f(b)}{2} \right), \quad h_2 = \frac{1}{2}h_1 \\ &= \frac{1}{2}h_1 \left(\frac{f(a)}{2} + f(x_1) + \frac{f(b)}{2} \right) = \frac{1}{2}h_1 \left(\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right) + \frac{1}{2}h_1 f(x_1) \\ &= \frac{1}{2}T_{11} + h_2 f(x_1) \end{aligned}$$

$j \rightarrow j + 1$:

$$\begin{aligned} T_{j+1,1} &= h_{j+1} \left(\frac{f(a)}{2} + f(a + h_{j+1}) + f(a + 2h_{j+1}) + \dots + f(a + (2^j - 1)h_{j+1}) + \frac{f(b)}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2}h_j \left(\frac{f(a)}{2} + f(a + 2h_{j+1}) + f(a + 4h_{j+1}) + \dots + f(a + (2^j - 2)h_{j+1}) + \frac{f(b)}{2} \right) \\ &\quad + h_{j+1} (f(a + h_{j+1}) + f(a + 3h_{j+1}) + \dots + f(a + (2^j - 1)h_{j+1})) \\ &= \frac{1}{2}T_{j1} + h_{j+1} \sum_{\mu=1}^{2^j-1} f(a + (2\mu - 1)h_{j+1}) \end{aligned}$$

□

STARTWERTE MITTELPUNKTREGEL

Die Mittelpunktsommen T_{j1} stellen die Startwerte der zweiten Quadraturformel

$$T_{j1} := (T^M f)(h_j) = \frac{b-a}{2^{j-1}} \left(\sum_{n=1}^{2^{j-1}} f(a + (j - \frac{1}{2}) \cdot h_j) \right), \quad j = 1, \dots, K$$

Für die ersten Werte gilt somit

$$\begin{aligned} T_{11} &= h_1 \cdot f(a + \frac{1}{2}h_1), \quad h_1 = b - a \\ T_{21} &= h_2 \left(f(a + \frac{1}{2}h_2) + f(a + \frac{3}{2}h_2) \right), \quad h_2 = \frac{b-a}{2} \\ T_{31} &= h_3 \left(f(a + \frac{1}{2}h_3) + f(a + \frac{3}{2}h_3) + f(a + \frac{5}{2}h_3) + f(a + \frac{7}{2}h_3) \right), \quad h_3 = \frac{b-a}{4} \end{aligned}$$

Hier sind für den j -ten Eintrag 2^{j-1} Funktionsauswertungen für f zu machen.

Für die Mittelpunkregel ist eine Startwertvereinfachung nicht möglich, da vorherige Funktionswerte nicht wieder benutzt werden. In der nächsten Abbildung sind die Startwerte beider Quadraturverfahren zum Vergleich dargestellt.

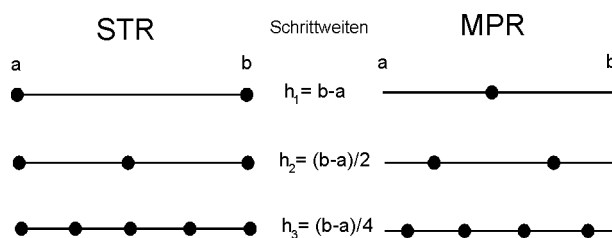


Abbildung 4.1: Startwerte von STR und MPR

4.2 Fehler

Der Fehler der Romberg-Integration wird mit der Fehlerabschätzung (2.21) angegangen

$$r_{mk} = (-1)^k \frac{1}{k!} g^{(k)}(\xi) \prod_{j=m-(k-1)}^m t_j$$

Allerdings muß diese Gleichung etwas modifiziert werden. Die Koeffizienten d_k der asymptotischen Potenzreihenentwicklung in Satz (3.5.1) sind eindeutig bestimmt. Mit der Annahme, dass diese hinreichend schnell abnehmen kann als Näherung für $\frac{1}{k!} g^{(k)}(\xi)$ folgende Beziehung genutzt werden, die durch Differentiation von (2.8) entsteht

$$g^{(k)}(t) = k! d_k + (k+1)! d_{k+1} t + \mathcal{O}(t^2)$$

Also

$$\frac{1}{k!} g^{(k)}(t) = d_k + (k+1) d_{k+1} t + \mathcal{O}(t^2) \quad (4.3)$$

Mit diesen Vorbereitungen kann nun die Fehlerabschätzung hergeleitet werden.

FEHLER DER SEHNENTRAPEZREGEL

Für eine feste Spalte (k fest) und $m \rightarrow \infty$ und

$$h_m = q^m (b - a) = \frac{b - a}{2^{m-1}}$$

folgt die Abschätzung

$$r_{mk}^S := T_{mk} - T(0) = (-1)^k \left(\prod_{j=m-(k-1)}^m (q^j (b - a))^2 \right) (d_k^S + \mathcal{O}(h^2)), \quad h^2 \in (0, h_m^2)$$

mit $I(f) = T(0) = \int_a^b f(x) dx$.

Kapitel 4: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR

Als betragliche Abschätzung erhält man bei Vernachlässigung der höheren Glieder von h^2

$$\begin{aligned}
 |r_{mk}^S| &:= |T_{mk} - T(0)| \\
 &= \left| \prod_{j=m-(k-1)}^m (q^j (b-a))^2 \cdot d_k^S \right| \\
 &= \left| q^{2(m-(k-1))} (b-a)^2 \cdot q^{2(m-(k-1)+1)} (b-a)^2 \dots q^{2m} (b-a)^2 \cdot d_k^S \right| \\
 &\leq \left| q^{2(m-(k-1))} (b-a)^2 \cdot q^{2(m-(k-1))} (b-a)^2 \dots q^{2(m-(k-1))} (b-a)^2 \cdot d_k^S \right| \\
 &= \left| q^{2k(m-(k-1))} (b-a)^{2k} \cdot d_k^S \right|
 \end{aligned}$$

Mit den Koeffizienten

$$d_k^S = \frac{B_{2k}}{(2k)!} (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a))$$

siehe Satz (3.5.1) folgt weiter

$$\begin{aligned}
 |r_{mk}^S| &\leq \left| q^{2k(m-(k-1))} (b-a)^{2k} \cdot \left(\frac{B_{2k}}{(2k)!} (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)) \right) \right| \\
 &\leq q^{2k(m-(k-1))} (b-a)^{2k} \left| \frac{B_{2k}}{(2k)!} \int_a^b f^{(2k)}(\xi) d\xi \right| \\
 &\leq q^{2k(m-k+1)} (b-a)^{2k} \cdot \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} (b-a) \|f^{(2k)}\|_\infty
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

für $0 < q < 1$.

Speziell für die Romberg-Folge $q = \frac{1}{2}$ und den Grenzen $a = 0, b = 1$ gilt

$$|r_{mk}^S| \leq \left(\frac{1}{2}\right)^{2k(m-k+1)} \cdot \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \|f^{(2k)}\|_\infty$$

Somit werden Polynome vom Grad $\leq 2k - 1$ exakt integriert. Insbesondere entspricht die zweite Spalte T_{m2} des Schemas (4.2) der Fehlerordnung und dem Exaktheitsgrad der Simpsonregel.

Für eine Funktion $f \in C^K[a, b]$ für festes $k \leq K < \infty$ mit $m \rightarrow \infty$ erreicht man mit der Abschätzung (4.4) immer Spaltenkonvergenz

$$|r_{mk}^S| \rightarrow 0 \quad (m \rightarrow \infty) \quad (\text{Spaltenkonvergenz})$$

4.3 Herleitung der Simpson-Regel

KONVERGENZORDNUNG DER SEHNENTRAPEZREGEL

Die Konvergenzgeschwindigkeit gegen den gesuchten Wert $T(0)$ wird mit (4.4) ermittelt. Weiter seien o.B.d.A die Intervallgrenzen $a = 0$ und $b = 1$. Für eine feste Spalte (k fest) gilt

$$\begin{aligned} |r_{mk}^S| &\leq q^{2k(m-k+1)} \cdot \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \|f^{(2k)}\|_\infty \\ &= q^{2km} \cdot \underbrace{q^{2k(-k+1)} \cdot \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \|f^{(2k)}\|_\infty}_{=C} \\ &= (q^m)^{2k} \cdot C, \quad C = \text{const} \\ &= (h_m)^{2k} \cdot C, \quad h_m = q^m \cdot h_0 \\ &= \mathcal{O}((h_m)^{2k}) \end{aligned}$$

Die k -te Spalte konvergiert für $m \rightarrow \infty$ also mit dem Faktor q^{2k} .

FEHLER DER MITTELPUNKTREGEL

Die MPR unterscheidet sich lediglich in dem Faktor $-(1 - 2^{(1-2k)})$ von der Sehnentrapezregel. Speziell unterscheiden sich die Fehler nur in diesem Faktor

$$|r_{mk}^M| = -(1 - 2^{(1-2k)}) \cdot |r_{mk}^S|$$

Daher hat die MPR einen geringfügig besseren Fehlerwert als die STR. Allerdings haben beide Quadraturverfahren dieselbe Konvergenzordnung, da der zusätzliche Faktor von m unabhängig ist.

Weiter unterscheiden sich die beiden Fehler der Quadraturformeln durch die unterschiedlichen Vorzeichen. Geometrisch gesehen bedeutet dies eine Einschließung für das Integral $I(f)$ durch die beiden Quadraturformeln. Der einfachste Fall für eine konvexe bzw. konkave Funktion wurde in der Einleitung, siehe Abb. 1.3, bereits gezeigt. Bei einer Funktion $f \in C^K[a, b]$ kann bei hinreichend vielen Stützstellen immer eine solche Einschließung erreicht werden.

4.3 Herleitung der Simpson-Regel

Schon bekannte Quadraturformeln, wie z.B. die summierte Simpsonregel, können durch Extrapolation der Sehnentrapezregel gewonnen werden. Durch Linearkombination der Formeln T_{11} und T_{21} mit der Rekursionsvorschrift (4.1) erhält man T_{22} . Wie im folgenden gezeigt wird, entspricht das genau der summierten Simpsonregel.

$$\begin{aligned} T_{11} &= h_N \left(\frac{f_a}{2} + \sum_{n=1}^{N-1} f_n + \frac{f_b}{2} \right), \quad h_N = \frac{b-a}{N} \\ T_{21} &= \frac{h_N}{2} \left(\frac{f_a}{2} + \sum_{n=1}^{2N-1} f_{n/2} + \frac{f_b}{2} \right) \end{aligned}$$

Kapitel 4: Anwendung Extrapolation auf STR und MPR

Mit (4.1) folgt

$$\begin{aligned}
 T_{22} &= \frac{4 \cdot T_{21} - T_{11}}{4 - 1} = \frac{4}{3}T_{21} - \frac{1}{3}T_{11} \\
 &= \frac{4}{3} \frac{h_N}{2} \left(\frac{f_a}{2} + \sum_{n=1}^{2N-1} f_{n/2} + \frac{f_b}{2} \right) - \frac{1}{3} h_N \left(\frac{f_a}{2} + \sum_{n=1}^{N-1} f_n + \frac{f_b}{2} \right) \\
 &= \frac{4}{6} h_N \left(\frac{f_a}{2} + f_{1/2} + f_1 + f_{3/2} + f_2 + \dots + f_{\frac{2N-2}{2}} + f_{\frac{2N-1}{2}} + \frac{f_b}{2} \right) \\
 &\quad - \frac{2}{6} h_N \left(\frac{f_a}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-2} + f_{N-1} + \frac{f_b}{2} \right) \\
 &= h_N \left(\frac{2}{6} \frac{f_a}{2} + \frac{4}{6} f_{1/2} + \frac{2}{6} f_1 + \frac{4}{6} f_{3/2} + \frac{2}{6} f_2 + \dots + \frac{2}{6} f_{N-1} + \frac{4}{6} f_{\frac{2N-1}{2}} + \frac{2}{6} \frac{f_b}{2} \right) \\
 &= \frac{h_N}{6} \left(f_a + 4f_{1/2} + 2f_1 + 4f_{3/2} + 2f_2 + \dots + 2f_{N-1} + 4f_{\frac{2N-1}{2}} + f_b \right)
 \end{aligned}$$

FEHLERBETRACHTUNG

Der Quadraturfehler ergibt sich mit (4.4)

$$\begin{aligned}
 |r_{22}^S| &= |T_{22} - T(0)| \\
 &\leq h_N^4 \frac{B_4}{4!} \|f^{(4)}\|_\infty (b - a) \\
 &= h_N^4 \cdot (b - a) \frac{1}{720} \|f^{(4)}\|_\infty \\
 &= \mathcal{O}(h_N^4)
 \end{aligned}$$

Vergleich mit dem Fehler der interpolatorisch erzeugten Simpsonregel zeigt, dass die Konvergenzordnungen übereinstimmen

$$\begin{aligned}
 R_N f &= h_N^4 \cdot (b - a) \frac{1}{180} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b] \\
 &= \mathcal{O}(h_N^4)
 \end{aligned}$$

Die Simpsonregel integriert ein Polynom $p \in \pi_3$ exakt.

5 Programmcode und Beispiele

5.1 Rekursion der Bernoullizahlen

Die mathematische Herleitung der Rekursion der Bernoulli-Zahlen wird im Folgenden in Matlab implementiert.

```
%Bernoulli Rekursion

format rat
%Startwerte, K = Anzahl der erzeugten geraden Bernoulli-Zahlen
K=10; b = linspace(1/2 , 1/2 , 2*K+1);

%Rekursion
for m=1:K
    B(2*m) = b(2*m) - 2/(2*m +1) * b(2*m +1);
    for n=2*m+2:2*K+1
        b(n) = b(n) - 1/(2*m+1) ...
            *(factorial(n) / (factorial(2*m) * factorial(n - 2*m))) * b(2*m +1);
    end
end

% Darstellung des Ergebnisses in einem Vektor
B
```

Die ersten 10 geraden Bernoulli-Zahlen erzeugt durch obiges Programm sehen so aus

$$\begin{array}{l|l} B_2 = \frac{1}{6} & B_{12} = -\frac{691}{2730} \\ B_4 = -\frac{1}{30} & B_{14} = \frac{7}{6} \\ B_6 = \frac{1}{42} & B_{16} = -\frac{2078}{293} \\ B_8 = -\frac{1}{30} & B_{18} = \frac{5717}{104} \\ B_{10} = \frac{5}{66} & B_{20} = -\frac{89422}{169} \end{array}$$

5.2 Beispiel. Extrapolation mit STR und MPR

Numerische Bestimmung des Integrals

$$I(f) = T(0) = \int_0^1 x^{3/2} dx$$

Kapitel 5: Programmcode und Beispiele

Beispiel aus [7] S. 308

```
% Datei myfun.m
% Definiere Funktion, deren Integral berechnet werden soll
function y = myfun(x)
    y = x^(3/2);

% Implementierung der Rekursionsvorschrift für STR und MPR
% unter Verwendung der Romberg-Folge
% Die zu integrierende Funktion ist in der Datei myfun.m enthalten
format short
% Integrationsintervall
a = 0; b = 1;

% Anzahl m Zeilen und n Spalten
m = 5; n = 5;

% Romberg-Folge
for j = 1:m
    q(j) = 1/2^(j-1);
end
q;
% Schrittweiten
'Schrittweiten:'
qh = (b-a).* q

format long
% STR
% Startwert
TS(1,1) = qh(1) * (myfun(a)/2 + myfun(b)/2);
% Zur Berechnung der Startwerte (erste Spalte) wird Rekursion Lemma 4.1.1 benutzt
% Berechne zunächst die Funktionswerte
for l = 1:m
    for k = 1:2^(l-2)
        B(k,2^(l-2)) = myfun((a + (2*k - 1)*qh(l)));
    end
end
C = sum(B);
for l = 2:m
    A(1,1) = C(1,2^(l-2));
end
% Funktionswerte der Summe
A;
% Rekursion der Werte der ersten Spalte
```

5.2 Beispiel. Extrapolation mit STR und MPR

```
for k = 2:m
    TS(k,1) = TS(k-1,1) * 1/2 + qh(k) * A(k,1);
end
TS;
% Extrapolation
for j = 2:n
    for i = j:m
        TS(i,j) = TS(i,j-1) + (TS(i,j-1) - TS(i-1,j-1))...
            * (qh(i)^2/(qh(i-j+1)^2 - qh(i)^2));
    end
end
% Ergebnis STR
'Ergebnis STR:'
DS = [q' TS]

% MPR
% Berechne Funktionswerte, um anschließend die Startwerte bestimmen zu können
for l = 1:m
    for k = 1:2^(l-1)
        BM(k,2^(l-1)) = myfun((a + (k - 1/2)*qh(1)));
    end
end BM;
CM = sum(BM);
% Startwerte erste Spalte
for l = 1:m
    TM(1,1) = qh(1) * CM(1,2^(l-1));
end TM;
% Extrapolation
for j = 2:n
    for i = j:m
        TM(i,j) = TM(i,j-1) + (TM(i,j-1) - TM(i-1,j-1))...
            * (qh(i)^2/(qh(i-j+1)^2 - qh(i)^2));
    end
end
% Ergebnis
'Ergebnis MPR:'
DM = [q' TM]
```

Kapitel 5: Programmcode und Beispiele

Ergebnisse

Ergebnis STR:

DS =

t_m	T_m1	T_m2	T_m3
1.0000000000000000	0.5000000000000000	0	0
0.5000000000000000	0.42677669529664	0.40236892706218	0
0.2500000000000000	0.40701811085790	0.40043191604499	0.40030278197718
0.1250000000000000	0.40181246479997	0.40007724944733	0.40005360500749
0.0625000000000000	0.40046340130205	0.40001371346941	0.40000947773754
	T_m4	T_m5	
	0	0	
	0	0	
	0	0	
	0.40004964981749	0	
	0.40000877730469	0.40000861702032	

Ergebnis MPR:

DM =

t_m	T_m1	T_m2	T_m3
1.0000000000000000	0.35355339059327	0	0
0.5000000000000000	0.38725952641916	0.39849490502779	0
0.2500000000000000	0.39660681874205	0.39972258284968	0.39980442803780
0.1250000000000000	0.39911433780412	0.39995017749148	0.39996535046760
0.0625000000000000	0.39977194111751	0.39999114222197	0.39999387320400
	T_m4	T_m5	
	0	0	
	0	0	
	0	0	
	0.39996790479188	0	
	0.39999432594585	0.39999442955822	

Bemerkungen

Der wahre Wert des Integrals ist $I(f) = 0.4$. Durch Anwendung der Extrapolation erhält man eine schnellere Konvergenz gegen den gesuchten Wert. Weiter ist an diesem Beispiel sehr gut zu erkennen, dass die beiden Quadraturformeln von verschiedenen Seiten gegen den gesuchten Wert konvergieren; begründet durch die unterschiedlichen Vorzeichen der Fehlerentwicklung.

Literaturverzeichnis

- [1] Gerhard Maess ; Vorlesungen über numerische Mathematik II, Analysis
Birkhäuser Verlag, 1988
- [2] R. Schaback , H. Werner ; Numerische Mathematik, 4. Auflage
Springer Verlag, 1993
- [3] Rainer Kress; Numerical Analysis
Springer Verlag, 1998
- [4] Walter Oevel ; Einführung in die numerische Mathematik
Spektrum Akademischer Verlag, 1996
- [5] Konrad Königsberger; Analysis 1
Springer Verlag, 2003
- [6] E. Freitag , R. Busam ; Funktionentheorie 1 , 4., korrigierte Auflage
Springer Verlag, 2006
- [7] G. Hämmerlin , K.-H. Hoffmann ; Numerische Mathematik
Springer Verlag, 1989
- [8] Heinz Rutishauser ; Vorlesungen über numerische Mathematik, Band 1
Birkhäuser Verlag, 1976
- [9] Josef Stoer ; Numerische Mathematik 1, 9. Auflage
Springer Verlag, 2005
- [10] <http://de.wikipedia.org> ; Konvergenzgeschwindigkeit
Internet, 23. Jul. 2006
- [11] www.mathe.tu-freiberg.de/ernst/Lehre/PWR/pwrKapitel3.pdf
Internet, 23. Jul. 2006
- [12] Avram Sidi ; Mathematics of computation, Volume 69, Number 229, Pages 305-323
American Mathematical Society, 1999

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Arbeit unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel selbstständig angefertigt habe.

Bad Laasphe, den 6. Dezember 2006.

