technische universität dortmund
Fakultät für Mathematik
Prof. Dr. H. M. Möller

Dortmund, den 6. 6. 2008

Numerische Integration

Zusammenfassung der Woche 2.6. - 6.6.

Satz 9. (Satz von den Lebesgue-Konstanten)
Sei X ein Banachraum und $\{L_k\}_{k=1}^{\infty} \subset X^*$. $\mathcal{G}$ sei eine Grundmenge von X, d.h., $\mathcal{G} \subset X$ und zu jedem $f \in X$ und jedem $\varepsilon > 0$ gibt es eine Linearkombination h von Elementen aus $\mathcal{G}$ mit $\|f - h\| < \varepsilon$. Die Folge $\{L_k\}_{k=1}^{\infty}$ konvergiert genau dann schwach-$*$ gegen ein $L \in X^*$, wenn

i)	$\|L_k\| \leq M$	für alle $k \in \mathbb{N}$
ii)	$\lim_{k\to\infty} L_k(g) = L(g)$	für alle $g \in \mathcal{G}$.

Die Zahlen $\|L_k\|$ werden in diesem Zusammenhang *Lebesgue-Konstanten* genannt. Satz 9 ist ein Spezialfall des *Satzes von Banach-Steinhaus*, eines zentralen Satzes aus der Funktionalanalysis, in dem die Konvergenz von Operatoren $L_k : X \to V$ mit Banachräumen X und V betrachtet wird.

Korollar. Sei $G \subset \mathbb{R}^n$ kompakt und $X = C(G)$. Für jedes $\nu \in \mathbb{N}$ sei

$$\int_G f(x)dx = \sum_{k=1}^{N_\nu} a_k^{(\nu)} f(y_k^{(\nu)}) + E_\nu(f)$$

eine Kubaturformel des Exaktheitsgrads d_ν. Gilt

i)	$\exists M > 0 : \sum_{k=1}^{N_\nu} \|a_k^{(\nu)}\| \leq M$	für alle $\nu \in \mathbb{N}$,
ii)	$d_\nu \to \infty$	für $\nu \to \infty$,
iii)	$y_k^{(\nu)} \in G$	für $k = 1, \ldots, N_\nu,\ \nu \in \mathbb{N}$,

dann konvergieren die Kubatursummen

$$Q^{(\nu)} : f \mapsto \sum_{k=1}^{N_\nu} a_k^{(\nu)} f(y_k^{(\nu)})$$

schwach-$*$ gegen das Integral $I : f \to \int_a^b f(x)dx$

Bemerkung 1. Sind die Gewichte eine Folge von Kubaturformeln mit Kubatursummen $Q^{(\nu)}$ und Exaktheitsgrad d_ν sämtlich positiv, und gelten die

Bedingungen ii) und iii) des Korollars, dann konvergiert die Folge $\{Q^{(\nu)}(f)\}$ für jedes $f \in C(G)$ gegen $\int_G f(x)dx$, denn wegen $d_\nu \geq 0$ und $a_k = |a_k|$ gilt

$$|G| = \int_G dx = \sum_{k=1}^{N_\nu} a_k + E(1) = \sum_{k=1}^{N_\nu} a_k \;\Rightarrow\; \sum_{k=1}^{N_\nu} |a_k| = |G|,$$

also die fehlende Bedingung i).

Bemerkung 2. Aus dem Satz über die gleichmäßige Beschränktheit folgt (mit den Bez. des Korollars): Wenn die Elemente der Folge $\{\sum_{k=1}^{N_\nu} |a_k^{(\nu)}|\}_{\nu=1}^{\infty}$ nicht gleichmäßig beschränkt sind, gibt es ein $f \in C(G)$, so dass die Folge der $Q^{(\nu)}(f)$ nicht gegen $\int_G f(x)dx$ konvergiert.

Bemerkung 3. Wir betrachten jetzt wieder den univariaten Fall $n = 1$ und $G = [a, b]$. In der Approximationstheorie wird die Größe

$$E_m(f) := \max_{p \in \mathcal{P}_m} \|f - p\| \quad \text{mit} \quad \|g\| := \max_{a \leq x \leq b} |g(x)|$$

genauer untersucht. Nach dem Satz von Weierstraß ist für jedes $f \in C[a, b]$ die Folge der $E_m(f)$ eine Nullfolge. Sätze vom sogenannten Jackson-Typ machen in Abhängigkeit von Differenzierbarkeitseigenschaften der Funktion f Aussagen, wie schnell die Folge der $E_m(f)$ gegen Null konvergiert. Daraus lassen sich auch Aussagen über die Konvergenz des Quadraturfehlers gewinnen. Ein Jackson-Satz besagt etwa

$$f \in C^{m+1}[-1, 1] \;\Rightarrow\; E_m(f) \leq \frac{1}{2^m} \frac{1}{(m+1)!} \|f^{(m+1)}\|.$$

Hieraus folgt für den Fehler

$$R(f) := \int_{-1}^{1} f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k)$$

einer Quadraturformel des Exaktheitsgrads $\geq m$

$$\begin{aligned} |R(f)| &= |R(f - p_m^*)| \leq \|R\| \; \|f - p_m^*\| = \left(2 + \sum_{k=0}^{n} |a_k|\right) E_m(f) \\ &\leq \tfrac{1}{2^m} \tfrac{1}{(m+1)!} \left(2 + \sum_{k=0}^{n} |a_k|\right) \|f^{(m+1)}\| \end{aligned}$$

mit $\|f - p_m^*\| = E_m(f)$ für ein $p_m^* \in \mathcal{P}_m$.

Für die Simpsonregel für das Intervall $[-1, 1]$ bekommt man so für $f \in C^4[-1, 1]$

$$|E_S(f)| \leq 4 \cdot \frac{1}{2^3 \cdot 4!} \|f^{(4)}\| = \frac{1}{48} \|f^{(4)}\|.$$

Zum Vergleich: Aus der Fehlerdarstellung $E_S(f) = -\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$ erhält man die (nur etwas) genauere Abschätzung

$$|E_S(f)| \leq \frac{1}{90} \|f^{(4)}\|.$$

3.5 Näherungsprozesse in der Praxis

In Abhängigkeit von der Differenzierbarkeitsordnung des Integranden sollte man den Exaktheitsgrad d der Quadraturformel wählen. Nur wenn ein Integrand $d+1$-mal stetig differenzierbar ist, dann garantiert eine M-fach iterierte Quadraturformel des Exaktheitsgrads d die Konvergenzordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{M^{d+1}})$. Die Differenzierbarkeitsordnung des Integranden kann man z.B. bestimmen, indem man im Romberg-Schema die Konvergenzgeschwindigkeit der Näherungen in den einzelnen Spalten untersucht.

Der Fall, dass der Integrand nicht einmal stetig differenzierbar ist, verdient nähere Betrachtung.

Beispiel. Wir wollen näherungsweise

$$I := \int_0^1 \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} dx$$

bestimmen. Der Integrand $\frac{\sin(x)}{\sqrt{x}}$ ist stetig, aber nicht in $C^1[0,1]$.
<u>Methode 1</u>
Substitution $t := \sqrt{x}$ gibt

$$I = 2 \int_0^1 \sin(t^2) dt.$$

Jetzt ist der Integrand beliebig oft differenzierbar also leicht numerisch zu integrieren.

<u>Methode 2</u>
Zerlegung von des Integrationsgebiets in $[0, \varepsilon]$ und $[\varepsilon, 1]$. In $[\varepsilon, 1]$ ist der Integrand beliebig oft differenzierbar. Für $[0, \varepsilon]$ erhält man, wenn man die Sinusfunktion durch ihre Taylorentwicklung ersetzt, als Integranden die rasch konvergente und leicht integrierbare Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{(2k+1)!} x^{2k+\frac{1}{2}}.$$

Methode 3
(Besonders empfehlenswert, wenn mehrere Integrale zu berechnen sind, die $\frac{1}{\sqrt{x}}$ als Faktor im Integranden haben). Man berechnet für das Integral

$$\tilde{I}(f) := \int_0^1 f(x) \frac{1}{\sqrt{x}} dx$$

eine interpolatorische Quadraturformel. Die Berechnung von $\tilde{I}(\sin(x))$ ist numerisch problemlos, weil der Integrand die beliebig oft differenzierbare Sinusfunktion ist.

Methode 4
Wegen

$$\frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} = \sqrt{x} - \frac{x^2\sqrt{x}}{3!} + \frac{x^4\sqrt{x}}{5!} \mp \dots$$

ist $h(x) := \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} - \sqrt{x}$ in der Nähe von 0 zweimal stetig differenzierbar. Also

$$I = \int_0^1 h(x)dx + \int_0^1 \sqrt{x}dx = \int_0^1 h(x)dx + \frac{2}{3}$$

und $\int_0^1 h(x)dx$ ist besser numerisch integrierbar, weil der Integrand eine höhere Differenzierbarkeitsordnung besitzt.

Die Berechnung der Quadratursumme bzw. der Kubatursumme ist problemlos im Vergleich zur Berechnung oder Abschätzung des Quadraturfehlers. (Beim Kubaturfehler ist wegen fehlender einfacher Fehlerdarstellungen alles noch viel schwieriger.) Im folgenden stellen wir Methoden vor, die uns Informationen über die Größe des Quadraturfehlers geben.

Einschließung des Quadraturfehlers
Wenn es zwei Quadraturformeln gleichen Exaktheitsgrads d gibt,

$$I(f) = Q_1(f) + E_1(f) \qquad I(f) = Q_2(f) + E_2(f),$$

und wenn der d-te Peanokern $G_d^{(1)}(x) \geq 0$ für alle $x \in [a,b]$ ist während $G_d^{(2)}(x) \leq 0$ für alle $x \in [a,b]$, dann folgt

$$f \in C^{d+1}[a,b],\ f^{(d+1)}(x) \geq 0\ \forall\ x \in [a,b] \ \Rightarrow\ Q_1(f) \leq I(f) \leq Q_2(f).$$

Man kann als erste Formel die Mittelpunktregel oder eine m-fach Iterierte davon wählen und als zweite die Trapezregel oder eine m-fach Iterierte davon. Dann bekommt man die gezeigte Einschließung des Integrals für konvexe Funktionen, also $f''(x) \geq 0$ für alle $x \in [a,b]$.

Ein ähnliches Paar bilden die n-punktige Gauß-Legendre Formel und die $n+1$-punktige Lobattoformel (und jeweils ihre Iterierten auch). Hierbei ist $d = 2n - 1$.

Näherungsmethoden im Rechner

- Bei der *automatischen Quadratur* berechnet man die ersten Glieder einer gegen $\int_a^b f(x)dx$ konvergenten Folge von Quadratursummen $\{Q^{(n)}(f)\}_{n=1}^{\infty}$ zusammen mit Zahlen ε_n, mit denen man die Größe des Fehlers schätzen kann.
- Bei der *adaptiven Quadratur* geht man im wesentlichen wie bei der automatischen vor. Man modifiziert aber die Folge der Quadratursummen, wenn die Fehlerschätzungen nicht den Erwartungen entsprechen (s.u.). Man zerlegt $[a, b]$ in Teilintervalle. Auf jedem Teilintervall nimmt man zwei verschiedene Quadraturformeln (zwei verschiedene Iterierte einer Formel oder zwei verschiedene Formeln). Ist die Abweichung der Näherungen klein, dann ist das Teilintervall akzeptiert. Sonst Teilintervalle weiter verkleinern und selbe Prozedur darauf anwenden oder andere Quadraturformeln verwenden.

Ist eine Funktion f auf $[a, b]$ $d+1$-mal stetig differenzierbar und verwendet man eine Quadraturformel des Exaktheitsgrads d, dann gilt für den Fehler $E^{(m)}$ der m-fach iterierten Formel

$$\frac{E^{(m_1)}}{E^{(m_1)}} \approx \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{d+1}.$$

Wählt man $m_1 = m,\ m_2 = 2m,\ m_3 = 4m$, dann bekommt man mit etwas Rechnung für die entsprechenden Quadratursummen

$$\frac{Q^{(2m)} - Q^{(m)}}{Q^{(4m)} - Q^{(2m)}} \approx 2^{d+1}.$$

Ist die linke Seite der Gleichung tatsächlich fast gleich 2^{d+1}, dann ist der Integrand vermutlich glatt genug (vgl. Aufgabe 26^*).

Bei multivariaten Problemen (Kubatur) wird analog zur automatischen Quadratur verfahren. Man nimmt als Folge von Integralnäherungen
- entweder eine Kubaturformel und ihre iterierten Formeln
- oder, im Fall des sogenannten *Simplex-Integrals*

$$\int_{T_n} f(x)dx \quad \text{mit} \quad T_n := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^{n} x_i \leq 1,\ x_i \geq 0\ \},$$

man verwendet eine Formelschar, die für jedes $s \in \mathbb{N}$ eine Formel mit Exaktheitsgrad $2s+1$ und $\binom{n+s+1}{s}$ Knoten enthält (Details später).

Kapitel 4

Hier betrachten wir ein Integral $I \in \mathcal{P}^*$ mit $\mathcal{P} := \mathbb{R}[x_1, \ldots, x_n]$

$$I(f) := \int_G f(x)w(x)dx \quad \text{für alle} \quad f \in C(G).$$

Wie üblich ist die Gewichtsfunktion nicht-negativ, $w : G \to [0, \infty)$. Wegen

$$p \in \mathcal{P} \;\Rightarrow\; I(p^2) \geq 0$$

wird I auch als *positives Funktional* bezeichnet, d.h. eigentlich genauer: *quadrat-positives Funktional*, denn I erfüllt auch die Positivitätsbedingung

$$p \in \mathcal{P},\; p(x) \geq 0 \;\; \forall\, x \in \mathbb{R}^n \;\Rightarrow\; I(p) \geq 0,$$

die wir in dieser Vorlesung aber nicht verwenden wollen.

4.1 Interpolatorische Kubaturformeln

Das Interpolationsproblem
Gegeben: $y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}^n$ paarweise verschieden, $c_1, \ldots, c_N \in \mathbb{R}$ und $d \in \mathbb{N}_0$.
Gesucht: $p \in \mathcal{P}_d$ mit $p(y_i) = c_i$, $i = 1, \ldots, N$.

Satz 1. Das Interpolationsproblem ist genau dann eindeutig lösbar, wenn $N = \dim \mathcal{P}_d$ gilt und

$$p \in \mathcal{P}_d, \quad p(y_1) = p(y_2) = \ldots = p(y_N) = 0 \;\Rightarrow\; p = 0.$$

Zu gegebenem Polynom $0 \neq g \in \mathcal{P}$ nennt man die Punktmenge

$$\{x \in \mathbb{C}^n \mid g(x) = 0\}$$

algebraische (Hyper)fläche. Da wir nur reelle Punkte betrachten, beschränken wir uns auf

$$\{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) = 0\}$$

und nennen diese Punktmenge der Einfachheit zuliebe auch *algebraische Fläche* und schreiben dafür kurz $g = 0$. Die Bedingung an die $N = \dim \mathcal{P}_d$ Punkte $y_1, \ldots, y_N$ in Satz 1 lautet also, dass sie auf keiner Fläche $g = 0$ mit $0 \neq g \in \mathcal{P}_d$ liegen.