```
N_red := N ;   z := ω
while N_red > 1 do
  | M_red := N_red/2
  | for j = 0 : (N/N_red − 1)
  |   | l := j N_red
  |   | for k = 0 : M_red − 1
  |   |   | a := f_{l+k} + f_{l+k+M_red}
  |   |   | f_{l+k+M_red} := (f_{l+k} − f_{l+k+M_red}) z^k
  |   |   | f_{l+k} := a
  | N_red := M_red ;   z := z^2
for k = 0 : N − 1
  | α_{σ(k)} := f_k
```

Vertauschung der Komponenten von α bestimmt durch Permutation $\sigma(k)$:

$$\sigma\Big(\sum_{j=0}^{N-1} a_j 2^j\Big) := \sum_{j=0}^{N-1} a_{N-j} 2^j \quad \text{mit} \quad a_0, a_1, \ldots, a_{N-1} \in \{\,0,\,1\,\}\,.$$

$\rightsquigarrow$ „bit reversal", einfache Implementierung durch Bitmanipulationen

- Typisches Beispiel eines „divide–and–conquer"–Algorithmus,
- gut parallelisierbar,
- in Signalprozessoren hardwaremäßig verfügbar.

5 Quadratur

Bemerkung 5.1 (Problemstellung)

geg.: stückweise stetige Funktion $f\ :\ [a,b] \to \mathbb{R}$

ges.: $I(f) := I_a^b(f) := \displaystyle\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$

Eigenschaften

a) Linearität: $I(\alpha f + \beta g) = \alpha I(f) + \beta I(g)$

b) Positivität: $f(x) \geq 0\,,\ (\,x \in [a,b]\,) \ \Rightarrow\ I(f) \geq 0$

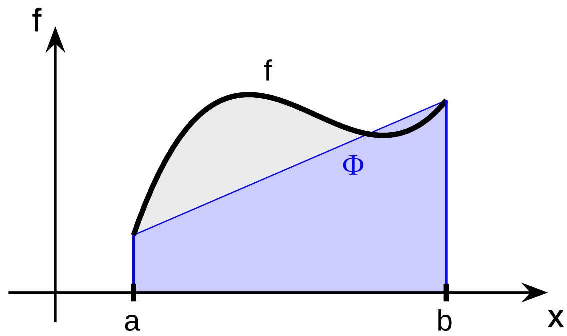
c) Additivität: $I_a^b(f) = I_a^c(f) + I_c^b(f)\,,\ (\,c \in (a,b)\,)$

Spezialfall $\tilde f(x) = x^k \quad \Rightarrow \quad I_a^b(\tilde f) = \int_a^b x^k \, \mathrm{d}x = \frac{1}{k+1} \, x^{k+1} \Big|_a^b$

Idee Approximiere $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ durch ein (Interpolations–)Polynom $\tilde f$ und verwende $I(\tilde f)$ als Näherungswert für $I(f)$.

Beispiel 5.2 (Trapezregel)
a) Approximation von $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ durch lineares Interpolationspolynom Φ mit Stützstellen a und b:

$$\Phi(x) = f(a) + \frac{x-a}{b-a}\big(f(b) - f(a)\big)$$



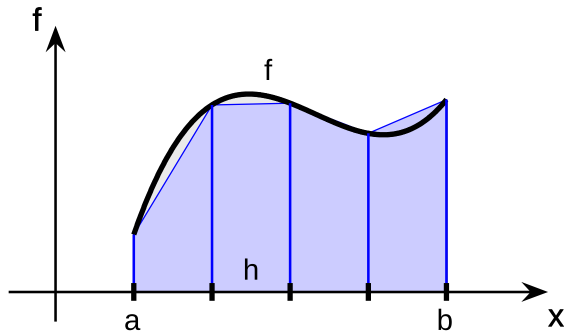
$$I(\Phi) = (b-a)f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \cdot \frac{1}{2}(x-a)^2\Big|_a^b = \frac{b-a}{2}\big(f(a) + f(b)\big)$$

b) Zusammengesetzte Trapezregel, *Trapezsumme*. Wähle ein Gitter

$$\Delta = \{\, a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N = b \,\}$$

mit Schrittweiten

$$h_i := x_{i+1} - x_i \,, \ (\, i = 0, 1, \ldots, N-1 \,) \,.$$



$$I_a^b(f) = \sum_{i=0}^{N-1} I_{x_i}^{x_{i+1}}(f) \,, \qquad \text{Trapezregel: } I_{x_i}^{x_{i+1}}(f) \approx \frac{h_i}{2}\big(f(x_i) + f(x_{i+1})\big)$$

Aufsummieren $\Rightarrow$ *zusammengesetzte Trapezregel*:

$$I_a^b(f) \approx \tilde I_a^b(f) := \frac{h_0}{2} f(x_0) + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{h_{i-1} + h_i}{2} f(x_i) + \frac{h_{N-1}}{2} f(x_N)$$

Spezialfall äquidistantes Gitter $x_i := a + ih$ mit $i = 0, 1, \ldots, N$ und $h := (b-a)/N$:

$$I_a^b(f) \approx \tilde I_a^b(f) = \frac{h}{2}\Big(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b)\Big) \,.$$

Bemerkung 5.3 (Newton–Cotes–Formeln)
Wähle Interpolationspolynom Φ zu $n+1$ äquidistanten Stützstellen $x_i := a + ih$ mit $h := (b-a)/n$, ($i = 0, \ldots, n$):

$$\Phi(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b \Phi(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} \Big(\int_a^b L_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x \Big) f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

mit *Knoten* $x_0, x_1, \ldots, x_n$ und *Gewichten* $w_i := \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x$.

Allgemeine Struktur einer *Quadraturformel*: $\tilde{I}(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$.

Positivität, falls $w_i > 0$, ($i = 0, 1, \ldots, n$)
Gewichte der *Newton–Cotes–Quadraturformeln* liegen für $[a,b] = [0,1]$ tabelliert vor:

n	w_i	Name	Fehler
1	1/2, 1/2	Trapezregel	$h^3/12\; f''(\xi_1)$
2	1/6, 2/3, 1/6	Keplersche Fassregel	$h^5/90\; f^{IV}(\xi_2)$
3	1/8, 3/8, 3/8, 1/8	Newtonsche 3/8–Regel	$3h^5/80\; f^{IV}(\xi_3)$

mit geeigneten $\xi_1, \xi_2, \xi_3 \in (0,1)$.
Positivität nur bis $n \leq 7$.
Für $n \geq 8$ treten auch negative Gewichte auf $\rightsquigarrow$ praktisch unbrauchbar.

Analog zu Beispiel 5.2 definiert man *zusammengesetzte Newton–Cotes–Formeln*:

Simpson–Regel Zusammengesetzte Keplersche Fassregel.

$$S(h) := \frac{h}{3}\Big(f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h) + \ldots + \\ + 4f(a+(2N-1)h) + f(b) \Big) \quad \text{mit} \quad h := \frac{b-a}{2N}.$$

Bemerkung 5.4 (Fehlerabschätzungen für Newton–Cotes–Formeln)

Trapezregel Restglied der Polynominterpolation, vgl. Satz 1.13 $\Rightarrow$

$$f(x) - \Phi(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b) \quad \text{mit einem } \xi \in [a,b]$$

$$\Big|\underbrace{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x}_{I(f)} - \underbrace{\int_a^b \Phi(x)\,\mathrm{d}x}_{\tilde{I}(f)}\Big| \;=\; \Big|\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}\underbrace{(x-a)(x-b)}_{<0}\,\mathrm{d}x\Big|$$

$$\le \max_{\xi\in[a,b]} |f''(\xi)| \cdot \frac{1}{2}\int_a^b (x-a)(b-x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \max_{\xi\in[a,b]} |f''(\xi)| \cdot \frac{(b-a)^3}{12}$$

Polynome ersten Grades werden durch die Trapezregel exakt integriert.

Keplersche Fassregel $n=2\,,\;\; h=\dfrac{b-a}{2}\,,\;\; x_0=a\,,\;\; x_1=\dfrac{a+b}{2}\,,\;\; x_2=b$

$$f(x)-\Phi(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)$$

Ähnlich wie bei der Trapezregel zeigt man

$$|I(f)-\tilde{I}(f)| \le \frac{h^5}{90}\max_{\xi\in[a,b]} |f^{IV}(\xi)|\,.$$

Polynome bis zum Grad 3 (!) werden exakt integriert.

Bemerkung 5.5 (Gauß–Christoffel–Quadraturformeln)

Idee Wähle Gewichte w_i *und* Knoten x_i so, dass Polynome möglichst hohen Grades exakt integriert werden:

$$\sum_{i=0}^{n} w_i x_i^j = \tilde{I}(x^j) \overset{!}{=} I(x^j) = \int_a^b x^j\,\mathrm{d}x = \frac{b^{j+1}-a^{j+1}}{j+1}\,,\;(j=0,1,\ldots,m)$$

$m+1$ nichtlineare Gleichungen für $2n+2$ Unbekannte $x_0,x_1,\ldots,x_n,w_0,w_1,\ldots,w_n$.

Ergebnisse

- $m=2n+1$ ist stets erreichbar,
- Knoten x_i und Gewichte w_i sind für $m=2n+1$ eindeutig bestimmt,
- Knoten x_i sind Nullstellen der sog. Legendre–Polynome.

Beispiel $n=1 \quad\Rightarrow\quad x_{0,1}=\dfrac{a+b}{2}\pm\dfrac{b-a}{2\sqrt{3}}\,,\;\; w_{0,1}=\dfrac{b-a}{2}$

$$\tilde{I}(f)=\frac{b-a}{2}\big(f(x_0)+f(x_1)\big)$$

integriert Polynome bis zum Grad $2n+1=3$ exakt.

Erweiterung $\displaystyle\int_a^b \omega(x) f(x)\,\mathrm{d}x$ mit Gewichtsfunktion $\omega(x) \geq 0\,,\ (\,x \in [a,b]\,)\,.$

Die optimalen Knoten $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ergeben sich auch hier als Nullstellen orthogonaler Polynome.

Beispiel Tschebyscheff–Quadratur

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \ \text{ mit } \ x_i = \cos\frac{2i+1}{2n+2}\pi\,,\ w_i = \frac{\pi}{n+1}\,,\ (\,i = 0,1,\ldots,n\,)$$

Literatur Deuflhard/Hohmann, Kapitel 9.3.

Bemerkung 5.6 (Romberg–Quadratur)
Die zusammengesetzte Trapezregel $T(h)$ aus Beispiel 5.2b) ergibt (theoretisch) für $h \to 0$ den exakten Wert $I_a^b(f)$.

Idee Berechne $T(h_i)$ für einige endliche Schrittweiten $h_i > 0$, interpoliere die Stützpunkte $(h_1, T(h_1))$, ... , $(h_k, T(h_k))$ durch ein Polynom $\pi(h)$ mit $\deg \pi \leq k-1$ und setze $I_a^b(f) \approx \tilde{I}_a^b(f) := \pi(0)\,.$

Theorie Asymptotische Entwicklung des Fehlers der Trapezsumme (Euler–Maclaurinsche Summenformel):

$$T(h) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + \sum_{k=1}^{M} c_k h^{2k} + \mathcal{O}(h^{2M+2}) \quad \text{mit Konstanten } c_k\,.$$

praktisch Wähle $h_i = H/n_i$ mit Grundschrittweite H und $n_i = 2^{i-1}$ und bestimme Interpolationspolynom π mit $\pi(h_i^2) = T(h_i)\,,\ (\,i = 1,\ldots,k\,)$. Berechnung von $\pi(0)$ mittels Neville–Schema, vgl. Bemerkung 1.10:

$$T_{i,\ldots,i+l} = T_{i+1,\ldots,i+l} - \frac{T_{i+1,\ldots,i+l} - T_{i,\ldots,i+l-1}}{\left(\dfrac{h_i}{h_{i+l}}\right)^2 - 1} \quad \text{mit} \quad \left(\frac{h_i}{h_{i+l}}\right)^2 = \left(\frac{n_{i+l}}{n_i}\right)^2$$

und $T_i := T(h_i)\,.$ Ergebnis: $I_a^b(f) \approx T_{1,\ldots,k}$ (*Romberg–Quadratur, Romberg–Schema*).

wichtig Für $n_i = 2^{i-1}$ ist $h_i = 2h_{i+1}$ und

$$\begin{aligned} T(h_{i+1}) &= \frac{h_{i+1}}{2}\Big(f(a) + 2\sum_{j=1}^{n_{i+1}-1} f(a + jh_{i+1}) + f(b)\Big) \\ &= \frac{1}{2}\,T(h_i) + h_{i+1}\sum_{k=0}^{n_i-1} f(a + (2k+1)h_{i+1}) \end{aligned}$$

allgemein Romberg–Quadratur ist Spezialfall von *Extrapolationsverfahren*, die immer dann angewendet werden können, wenn der Fehler eines numerischen Verfahrens eine asymptotische Entwicklung in Potenzen von h hat.

Beispiel 5.7 (Extrapolation und Differenzenquotient)
a) Rechtsseitiger Differenzenquotient erster Ordnung

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Taylorentwicklung von $f(x+h)$ ergibt asymptotische h–Entwicklung des Fehlers.

b) Zentraler Differenzenquotient zur Approximation der ersten Ableitung

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Fehler hat h^2–Entwicklung (Taylorentwicklung von $f(x+h)$ und $f(x-h)$).