Ausgehend von diesem Satz ist es einfach, auch Abschätzungen für die Quadraturfehler der zusammengesetzten Formeln abzuleiten.

Bei der *zusammengesetzten Trapezformel* (4.5) ist (4.7) auf jedes Teilintervall $[x_j, x_{j+1}]$ anzuwenden. Bezeichnet I_1^j die Trapezregel in $[x_j, x_{j+1}]$, so folgt

$$\begin{aligned}
\left|\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx - T(h)\,(f)\right| &= \left|\sum_{j=0}^{n-1}\left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j(f)\right)\right| \le \sum_{j=0}^{n-1}\left|\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - I_1^j(f)\right| \\
&\le \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x_{j+1}-x_j)^3}{12} \max_{\xi\in[x_j,x_{j+1}]} \left|f''(\xi)\right| \\
&\le \frac{n}{12}\cdot\left(\frac{b-a}{n}\right)^3 \max_{\xi\in[a,b]} \left|f''(\xi)\right| \\
&= \frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{\xi\in[a,b]} \left|f''(\xi)\right|\,, \qquad \text{und mit} \quad h = \frac{b-a}{n} \\
&= \frac{h^2}{12}\,(b-a) \max_{\xi\in[a,b]} \left|f''(\xi)\right|\,. \qquad (4.9)
\end{aligned}$$

Analog erhält man für die *zusammengesetzte Simpsonregel* (4.6) durch Anwendung von (4.8) auf die Teilintervalle $[x_{2j}, x_{2j+2}]$, $j = 0, 1, \ldots, \frac{n}{2}-1$, wobei I_2^{2j} die Simpsonregel im Intervall $[x_{2j}, x_{2j+2}]$ bezeichnet:

$$\begin{aligned}
\left|\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx - S(h)\,(f)\right| &= \left|\sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-1}\left(\int_{x_{2j}}^{x_{2j+2}} f(x)\,dx - I_2^{2j}(f)\right)\right| \\
&\le \sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-1}\left|\int_{x_{2j}}^{x_{2j+2}} f(x)\,dx - I_2^{2j}(f)\right| \\
&\le \sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{2880}\left(\frac{2(b-a)}{n}\right)^5 \max_{\xi\in[x_{2j},x_{2j+2}]} \left|f^{(4)}(\xi)\right| \\
&\le \frac{n}{2}\cdot\frac{2^5}{2880}\left(\frac{b-a}{n}\right)^5 \max_{\xi\in[x_0,x_n]} \left|f^{(4)}(\xi)\right| \\
&= \left(\frac{b-a}{n}\right)^4 \frac{(b-a)}{180} \max_{\xi\in[x_0,x_n]} \left|f^{(4)}(\xi)\right|\,, \quad \text{und mit } h = \frac{b-a}{n} \\
&= \frac{h^4}{180}\,(b-a) \max_{\xi\in[a,b]} \left|f^{(4)}(\xi)\right|\,. \qquad (4.10)
\end{aligned}$$

Zusammenfassend gilt also

Satz 4.3

a) Ist $f \in C^2[a,b]$, so gilt für die *zusammengesetzte Trapezregel*

$$T(h)\,(f) \;=\; \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(a+jh) + f(b)\right], \qquad h \;=\; \frac{b-a}{n} \tag{4.5}$$

die Fehlerabschätzung

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - T(h)\,(f)\right| \;\le\; \frac{h^2}{12}\,(b-a)\,\max_{\xi\in[a,b]} |f''(\xi)|\;. \tag{4.9}$$

b) Ist $f \in C^4[a,b]$ so gilt für die *zusammengesetzte Simpsonregel*

$$\begin{aligned} S(h)\,(f) &= \tfrac{h}{3}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(a+2jh) + 4\sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-1} f(a+(2j+1)h) + f(b)\right], \\ h &= \frac{b-a}{n} \end{aligned} \tag{4.6}$$

die Fehlerabschätzung

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - S(h)\,(f)\right| \;\le\; \frac{h^4}{180}\,(b-a)\,\max_{\xi\in[a,b]} \left|f^{(4)}(\xi)\right|\;. \tag{4.10}$$

Bemerkung:
Die Potenz von h in den Fehlerabschätzungen nennt man die *Ordnung der Verfahren.*

Konvergenz der Integrationsformeln

Bei der reinen Interpolationsquadratur ist es schwierig Konvergenzaussagen zu machen, da z.B die hohen Ableitungen $f^{n+1}(\xi)$ entweder nicht existieren oder nur sehr schlecht auswertbar sind. Im Fall der zusammengesetzten Integrationsformeln ist die Konvergenzfrage sehr einfach zu klären. Man benötigt nur Ableitungen niedriger Ordnung und kann beliebige kleine Fehler garantieren. Aus Satz 4.3 sofort die

Folgerung 4.4

Unter den Voraussetzungen von Satz 4.3 konvergieren sowohl die zusammengesetzte Trapezregel als auch die zusammengesetzte Simpsonformel für $h = \frac{b-a}{n} \to 0$, d.h.

$$\lim_{h\to 0} \left| \int_a^b f(x)\,dx \;-\; T(h)\,(f) \right| = 0, \quad \text{falls} \quad f \in C^2[a,b],$$

$$\lim_{h\to 0} \left| \int_a^b f(x)\,dx \;-\; S(h)\,(f) \right| = 0, \quad \text{falls} \quad f \in C^4[a,b].$$

Der Beweis ist unmittelbar aus (4.9) bzw. (4.10) abzulesen, da alle Größen der Fehlerabschätzungen bis auf h Konstanten sind, die unabhängig von h sind. ■

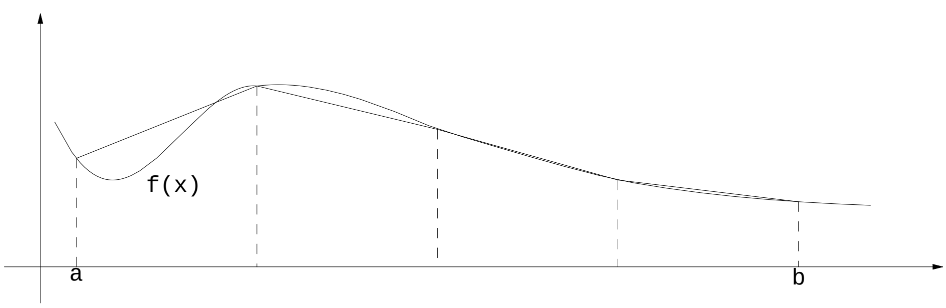
Bemerkung:

Die Fehlerabschätzungen bedeuten anschaulich: Wird die Schrittweite halbiert (n verdoppelt), so sinkt bei der zusammengesetzten Trapezregel die Fehlerschranke um den Faktor $\left(\frac{1}{2}\right)^2$, bei der zusammengesetzten Simpsonformel sogar um den Faktor $\left(\frac{1}{2}\right)^4$.

Beachte: Der absolute Fehler hängt natürlich von den Größen $|f''(\xi)|$ bzw. $\left|f^{(4)}(\xi)\right|$ in den einzelnen Teilintervallen ab. Wenn diese Größen in $[a,b]$ nicht allzusehr variieren, gilt obige Überlegung auch „in etwa“ für den absoluten Fehler.

Adaptive Quadraturformeln

Fehlerschranken bieten die Möglichkeit, vor Beginn der Rechnung abzuschätzen, wie groß die Schrittweite h gewählt werden muß, damit der Fehler eine vorgegebene Schranke nicht übersteigt, vorausgesetzt natürlich, man kennt Schranken für die betreffenden Ableitungen. Dies ist oft nicht der Fall oder mit großen Mühen verbunden. Außerdem sind Formeln mit äquidistanten Stützstellen oft mit zu großem Rechenaufwand verbunden, weil sie auch in Regionen, in denen es nicht nötig ist, die Schrittweite verkleinern, wie man schon an folgendem einfachen Beispiel für die zusammengesetzte Trapezregel erkennt.



Es ist deshalb sinnvoll, nach Verfahren zu suchen, welche die Schrittweite selbst an die Eigenschaften der Funktion f anpassen (adaptieren), also kleine Schrittweiten wählen, wenn sich die Funktion (oder das Integral) stark ändern, große, wenn dies nicht der Fall ist.

ZIEL: Entwickle ein Verfahren mit Schrittweitenanpassung, das für eine vorgegebene Funktion $\int\limits_a^b f(x)\,dx$ bis auf einen vorgegebenen Fehler $\varepsilon > 0$ genau berechnet.

Ausgangspunkt der Überlegungen ist 1), daß man weiß, wie „in etwa“ sich der Fehler bei Intervallhalbierungen verhält (vgl. die obige Bemerkung) und 2), daß die numerische Differenz der Integrationswerte bei Intervallhalbierung ja numerisch anfällt. Beide Fakten kann man benutzen, um den wirklichen Integrationsfehler zu **schätzen** und daraus eine **Schätzung** für eine geeignete Schrittweite abzuleiten. Wir wollen dies (in einer Rohform – Verfeinerungen sind möglich –) für die zusammengesetzte Simpsonregel demonstrieren.

Sei also L die (vorläufig noch unbekannte) Zahl von Teilintervallen $I_j = [x_{j-1}, x_j]$ von $[a, b]$ der (vorläufig noch unbekannten) Länge $h_j = x_j - x_{j-1}$. Wir bezeichnen den exakten Integralwert im Intervall $[x_{j-1}, x_j]$ durch

$$I^j(f) \quad = \quad \int\limits_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)\,dx\,,$$

die Simpsonformel mit der Maschenweite $\frac{h_j}{2}$ in I^j durch (vgl. (4.4))

$$S^j(f) \quad = \quad \frac{h_j}{6}\left[f(x_{j-1}) + 4f\left(x_{j-1} + \frac{h_j}{2}\right) + f(x_j)\right],$$

und die Simpsonformel mit halbierter Maschenweite $\frac{h_j}{4}$ durch

$$Q^j(f) = \frac{1}{6}\,\frac{h_j}{2}\left[f(x_{j-1}) + 4f\left(x_{j-1} + \frac{h_j}{4}\right) + 2f\left(x_{j-1} + \frac{h_j}{2}\right) + 4f\left(x_{j-1} + \frac{3h_j}{4}\right) + f(x_j)\right].$$

Aus der Fehlerabschätzung (4.8) folgt die Existenz einer Konstanten c_j, so daß gilt

$$\left|I^j(f) - S^j(f)\right| \quad = \quad c_j\,h_j^5 \tag{4.11}$$

Halbiert man das Intervall $[x_{j-1}, x_j]$ und wendet die Fehlerabschätzung auf beide Hälften an, so existieren Konstanten c_{j_1} und c_{j_2}, so daß

$$\left|I^j(f) - Q^j(f)\right| \quad = \quad (c_{j_1} + c_{j_2})\left(\frac{h_j}{2}\right)^5. \tag{4.12}$$

Wir nehmen nun an, daß sich c_{j_1} und c_{j_2} nicht wesentlich von c_j unterscheiden. Dies ist um so eher erfüllt, je weniger sich $f^{(4)}$ ändert, d.h. u.a. je kleiner die Teilintervalle werden. Setzt man also $c_{j_1} \approx c_{j_2} \approx c_j$, so geht (4.12) über in

$$\left|I^j(f) - Q^j(f)\right| \quad \approx \quad 2c_j\left(\frac{h_j}{2}\right)^5 \qquad \left(= \frac{1}{16}\,c_j\,h_j^5\right). \tag{4.13}$$

Dies ermöglicht einen Vergleich mit (4.11):

$$\left|I^j(f) - Q^j(f)\right| \;\approx\; \frac{1}{16}\left|I^j(f) - S^j(f)\right| \;\leq\; \frac{1}{16}\left(\left|I^j(f) - Q^j(f)\right| + \left|Q^j(f) - S^j(f)\right|\right),$$

bzw.

$$\left|I^j(f) - Q^j(f)\right| \;\lesssim\; \frac{1}{15}\left|Q^j(f) - S^j(f)\right| .$$

Hieraus folgt für den Gesamtfehler

$$\begin{aligned}
\left|I(f) - \sum_{j=1}^{L} Q^j(f)\right| &= \left|\sum_{j=1}^{L} \left(I^j(f) - Q^j(f)\right)\right| \\
&\leq \sum_{j=1}^{L} \left|I^j(f) - Q^j(f)\right| \qquad (4.14)\\
&\lesssim \tfrac{1}{15} \sum_{j=1}^{L} \left|Q^j(f) - S^j(f)\right| .
\end{aligned}$$

Die Werte $|Q^j(f) - S^j(f)|$ sind nach der Intervallhalbierung und der numerischen Integration ja bekannt. Genügt nun h_j der **Forderung**

$$\left|Q^j(f) - S^j(f)\right| \;\leq\; \frac{15 h_j \cdot \varepsilon}{b-a}, \qquad (4.15)$$

so folgt wegen $\sum_{j=1}^{L} h_j = b-a$ aus (4.15) und (4.14)

$$\left|I(f) - \sum_{j=1}^{L} Q^j(f)\right| \;\lesssim\; \varepsilon . \qquad (4.16)$$

Umsetzung in ein Verfahren

START: $x_0 := a$, $x_1 := b$, berechne S^1, Q^1 und prüfe (4.15) für $h_1 = (b-a)$. Ist (4.15) erfüllt $\longrightarrow$ Ende, andernfalls

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 := b, \quad I_1 = \left[a, \frac{a+b}{2}\right], \quad I_2 = \left[\frac{a+b}{2}, b\right], \quad h_1 = h_2 = \frac{b-a}{2}.$$

Prüfe (4.15) für beide Teilintervalle.

Für das (die) Teilintervall(e), in dem (denen) (4.15) nicht erfüllt ist, wird die Schrittweite halbiert, usw.

Ist (4.15) in allen Teilintervallen erfüllt, gilt (4.16).

Daß das beschriebene (sehr einfache) Verfahren ein Schätzverfahren ist (wie alle raffinierteren adaptiven Verfahren auch), belegt folgendes einfache

Beispiel:

Berechne für $f(x) = \cos 4x$ das Integral $\int\limits_0^{2\pi} \cos 4x \, dx$. Nun ist $\cos 4x = 1$ für $x = j\,\frac{\pi}{2}$, $j = 0, 1, 2, 3, 4$. Also gilt $S^1(f) = 2\pi$, $Q^1(f) = 2\pi$, das Verfahren bricht ab, weil (4.15) erfüllt ist, und liefert den Wert 2π statt 0.

Natürlich passiert dieser Zusammenbruch nicht, wenn man gleich mit einer höheren Zahl von Stützstellen beginnt, doch ist immer Vorsicht geboten.

Von anderen möglichen und wichtigen Integrationsmethoden wollen wir hier nur die

Gauß–Quadraturformeln

erwähnen. Sie sind wie die bisherigen Formeln von der Gestalt

$$G(f) \quad = \quad \sum_{j=0}^{n} A_j \, f(x_j) \, .$$

Verlangt man als Güteforderung, daß durch solche Formeln Polynome möglichst hohen Grades exakt integriert werden, so liegt es nahe zu versuchen, sowohl die Stützstellen als auch die Gewichte A_j gemäß dieser Güteforderung zu bestimmen. Bei vorgegebenem n hat man dann $2n+2$ Unbekannte A_j, x_j. Setzt man zu ihrer Bestimmung die Forderung an

$$\sum_{j=0}^{n} A_j \, (x_j)^k \quad = \quad \int\limits_a^b x^k \, dx \quad = \quad \frac{1}{k+1} \left(b^{k+1} - a^{k+1} \right) \, , \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, 2n+1$$

(d.h. $2n + 2$ Gleichungen für $2n + 2$ Unbekannte), so besteht die Hoffnung, Polynome bis zum Grad $(2n + 1)$ exakt integrieren zu können, falls dieses (nicht lineare) Gleichungssystem eine Lösung besitzt.

Es ist in der Tat möglich, solche Quadraturformeln zu konstruieren, allerdings mit einem aufwendigeren mathematischen Apparat, als er uns bisher zur Verfügung steht (Hermite Interpolation, orthogonale Polynome u.a.). In manchen Taschenrechnern sind solche Gaußformeln implementiert. Beispielsweise erhält man für $n = 1$ (also 2 Stützstellen) die Fehlerabschätzung

$$I(f) \; - \; G_1(f) \quad = \quad \frac{(b-a)^5}{4320} \, f^{(4)}(\xi) \, , \qquad \xi \; \in \; [a, b] \, ,$$

welche ca. um den Faktor $1,5$ kleiner ist als der Fehler der Simpsonformel, die 3 Stützstellen benötigt.

Vom Rechenaufwand her (Zahl der nötigen Funktionsauswertungen) sind diese Formeln konkurrenzlos günstig. Nachteilig ist:

1) Für jedes n müssen die Stützstellen (Gauß–Knoten) neu berechnet werden.

2) Teilergebnisse für den Fall n können für den Fall $n+1$ nicht weiterverwendet werden.

3) Es ist i.a. unmöglich, von vorneherein festzustellen, welches n die gewünschte Genauigkeit garantiert.

Man muß also n schrittweise erhöhen und hat als Abbruchkriterium nur aufzuhören, wenn 2 aufeinanderfolgende Näherungen im Rahmen der geforderten Genauigkeit übereinstimmen.

Deshalb gehen mit wachsendem n die theoretischen Vorteile der Gauß–Integration bald verloren.