Konstruktion und Anwendung von Formeltripeln in der Quadratur

Inauguraldissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
der Justus-Liebig-Universität Gießen

(Fachbereich Mathematik)

vorgelegt von

Stephan Kade

Mündliche Prüfung am 03.09.1999
Referent : Prof. Dr. S. Filippi
Koreferent : PD Dr. A. Ostermann

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Die numerische Berechnung bestimmter Integrale ist eine der ältesten Aufgaben der Mathematik. Es ist die Aufgabe, den Inhalt krummlinig berandeter Flächen zu berechnen. Wohl am bekanntesten ist in diesem Zusammenhang das Problem der Quadratur des Kreises. Diese klassische Aufgabe gab der numerischen Integration auch den Namen *Quadratur*. Die Quadratur spielt in der Mathematik bis heute eine wichtige Rolle, führen doch viele Probleme der angewandten Mathematik auf die Berechnung von Integralen, die meistens nicht in expliziter Form dargestellt werden können, wie z.B.:

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$$

oder

$$\int_0^\pi \frac{sin(x)}{x}\,dx\,.$$

Desweiteren hat man oft die Situation, daß eine Stammfunktion zwar ermittelt werden kann, diese aber von so komplizierter Bauart ist, daß ein Quadraturverfahren ihrer Auswertung vorzuziehen ist, oder aber der Integrand ist nur punktweise, z.B. als Ergebnis von Messungen gegeben.
(Vgl. Davis/Rabinowitz [8], Deuflhard/Hohmann [9], Engels [16], Hämmerlin/Hoffmann [34], Köckler [39], Krylov [41], Piessens et al. [46], Schwarz [49], Stroud [51], Zwillinger [56])

Die gebräuchlichsten, heute in den Quadraturroutinen fast aller Softwarepakete benutzten Quadraturformeln sind, da von höchstmöglicher Ordnung, die Quadraturformeln von Gauß, genauer die Gauß-Kronrod-Formelpaare. Desweiteren verwendet man häufig auch Newton-Cotes Quadraturformeln als Basisformeln für anschließende Extrapolation, bzw. für auf sie aufbauende Folgen von Quadraturformeln. (Vgl. Davis/Rabinowitz [8], Engels [16], Favati [21], Köckler [39], Krylov [41], Piessens et al. [46], Walz [53], Zwillinger [56]) Der Nachteil dieser Routinen ist, daß sie Quadraturformeln sehr hoher Ordnung verwenden und somit der Auswertung des Integranden an sehr vielen Stützstellen bedürfen, daß sie bzgl. der Schrittweitensteuerung keine Rücksicht auf das Aussehen des Integranden nehmen und häufig für bestimmte Integranden geeigneter sind im Vergleich zu anderen. In dieser Arbeit werden wir Quadraturformeltripel konstruieren, die im Vergleich mit den in den vorgenannten Routinen enthaltenen Quadraturformeln von niedriger Ordnung sind, in Verbindung mit einer geeigneten Schrittweiten- und Ordnungssteuerung mit entsprechender Genauigkeit arbeiten, den Arbeitsaufwand nach Möglichkeit reduzieren und für jeden Typ von Integrand anwendbar sind. Anschließend werden numerische Experimente durchgeführt und die daraus resultierenden Ergebnisse miteinander verglichen.

Mein besonderer Dank gilt an dieser Stelle Herrn Prof. Dr. Siegfried Filippi, der mir die Anregung zu dieser Arbeit gab und ihre Weiterentwicklung mit großem Interesse förderte.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Problemstellung

Wie schon im Vorangegangenen angedeutet, ist es von Interesse, Näherungen der zu berechnenden Integrale zu bestimmen. Sei im Folgenden f aus dem Raum der stetigen Funktionen auf dem Intervall $[a,b]$, $f \in C[a,b]$. Zur Berechnung einer Näherung für das Integral $\int_a^b f(x)\,dx$ macht man den Ansatz

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n(f) = Q_n(f) + R_n(f).$$

Bezeichnung. $Q_n(f)$ heißt *Quadraturformel* oder auch *Integrationsformel*, mit den $n+1$ *Stützstellen* (*Knoten*) x_k und zugehörigen *Gewichten* (*Koeffizienten*) A_k. $R_n(f)$ heißt das *Restglied* der Quadraturformel.

2.2 Existenz und Eindeutigkeit von Quadraturformeln

Definition. Eine Quadraturformel heißt von der *Ordnung (m+1)* (vom *Grad* m bzw. von der *Fehlerordnung (m+2)*), $m \in \mathbb{N}$, falls sie alle Polynome bis zum Grad m exakt integriert, und m die größtmögliche Zahl mit dieser Eigenschaft ist.
(Vgl. Filippi [28], Schwarz [49])

Da später bei der Konstruktion von Quadraturformeltripeln interpolatorische Quadraturformeln eine tragende Rolle spielen werden, betrachten wir diese Klasse von Quadraturformeln genauer.
Über Existenz und Eindeutigkeit interpolatorischer Quadraturformeln gibt uns der folgende Satz Auskunft:

Satz 1 *Seien $x_0, x_1, \ldots, x_n$ beliebige, paarweise verschieden vorgegebene Integrationsstützstellen mit $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n \le b$.*
Sei $L_n(x)$ das Lagrange-Interpolationspolynom

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j) \quad \textit{mit Lagrangefaktoren} \quad l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}.$$

Dann existiert eine eindeutig bestimmte, interpolatorische Quadraturformel

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \quad \textit{mit} \quad A_k = \int_a^b l_k(x)\, dx,\ (k = 0, 1, \ldots, n),$$

deren Grad mindestens gleich n ist.

Beweis. Siehe z.B. Schwarz [49].

Zum Aufstellen von Quadraturformeln gibt es verschiedene Konstruktionsprinzipien, so z.B. die Integration eines Interpolationspolynoms, die Methode der Vergleichsfunktionen oder die Methode des Taylorabgleichs. Diese drei Methoden werden nachfolgend kurz beschrieben.

Als Folgerung aus Satz 1 erhalten wir:

Lemma 1 *Seien $x_0, x_1, \ldots, x_n$, paarweise verschieden gegeben, dann kann man die Konstanten $A_0, A_1, \ldots, A_n$ so bestimmen, daß in*

$$I(f) = \int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n(f) = Q_n(f) + R_n(f)$$

$Q_n(f)$ exakt ist, d.h. $R_n(f) \equiv 0$, falls $f(x)$ ein Polynom vom Grad $\le n$ ist.

Zur Erläuterung der Konstruktionsprinzipien zwei Beweise von Lemma 1:

Beweis 1. (Integration eines Interpolationspolynoms)
Sei $L_n(x)$ das Lagrange-Interpolationspolynom, welches $f(x)$ an den Knoten $x_0, x_1, \ldots, x_n$ interpoliert:

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x).$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} I(f) = \int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b (L_n(x) + R_n(x))\,dx \\ &= \int_a^b L_n(x)\,dx + \int_a^b R_n(x)\,dx \\ &= \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)\,dx + \int_a^b R_n(x)\,dx. \end{aligned}$$

Setzt man nun $A_k = \displaystyle\int_a^b l_k(x)\,dx,\ k = 0, 1, \ldots, n$, so folgt

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + \int_a^b R_n(x)\,dx.$$

Ist nun $f(x) = P_n(x)$ ein Polynom vom $Grad \leq n$, dann gilt $f(x) \equiv L_n(x)$ und somit $R_n(x) \equiv 0$.

Beweis 2. (Methode der Vergleichsfunktionen)
$Q_n(f)$ ist exakt für die Monome x^m, $m = 0, 1, \ldots, n$, falls die Gleichungen

$$\begin{aligned} A_0 + A_1 + \ldots + A_n &= \int_a^b 1\,dx \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \ldots + A_n x_n &= \int_a^b x\,dx \\ &\vdots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \ldots + A_n x_n^n &= \int_a^b x^n\,dx \end{aligned}$$

erfüllt sind.
Bei vorgegebenen x_k ist dies ein lineares Gleichungssystem von n+1 Gleichungen in den n+1 Unbekannten A_k.

Die Lösung des Gleichungssystems existiert und ist eindeutig, falls gilt:

$$D_n = Det \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \neq 0.$$

Dies ist aber gerade die Vandermonde Determinante, $D_n = \prod_{k=1}^{n} \prod_{j=0}^{k-1} (x_k - x_j)$, die wegen $x_j \neq x_k$ für $j \neq k$ von Null verschieden ist. Da nun die Quadraturformel exakt für die Monome ist, ist sie auch exakt für eine Linearkombination

$$\alpha_0 + \alpha_1 x + \ldots + \alpha_n x^n, \ \alpha_i \in \mathbb{R}$$

der Monome, d.h. $R_n(f) \equiv 0$ für Polynome vom $Grad \leq n$.

Eine weitere Möglichkeit, Quadraturformeln zu konstruieren, ist die

Methode des Taylor-Abgleichs:
Zur Vereinfachung wird zunächst das Intervall $[a, b]$ mittels der Substitution $t = \frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}$ auf das Intervall $[-1, 1]$ transformiert. Sei weiterhin $f(x) \in C^n[-1, 1]$ und seien $n+1$ Integrationsstützstellen x_k, $k = 0, 1, \ldots, n$ paarweise verschieden vorgegeben.
Nun führt man eine Taylorentwicklung bis zum $n - ten$ Glied an $x = 0$ durch und setzt diese Entwicklung in $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx$ sowie in $\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ ein.
Ein Koeffizientenvergleich liefert sofort

$$\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j = \frac{1 + (-1)^j}{j + 1}, \ j = 0, 1, \ldots, n\,.$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem mit $n+1$ Gleichungen in den $n+1$ Unbekannten A_k. Zur Existenz und Eindeutigkeit der Lösung siehe Lemma 1, Beweis 2. Siehe auch Engels [16] S.23ff.

Bemerkung. Für $j = 0$, d.h. aus der ersten Gleichung erhält man die zur Kontrolle der Gewichte günstige Eigenschaft:
Bei Integration über das Intervall $[a, b]$ erfüllen die Gewichte A_k die Gleichung

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a,$$

d.h. Konstanten werden exakt integriert.

Bezeichnung.

1) Ist $[a, b]$ ein endliches Intervall und werden die Stützstellen $x_0, \ldots, x_n$, wobei die Intervallenden unter den Stützstellen zu finden sind, äquidistant in $[a, b]$ gewählt, d.h. $x_i = a + ih, \ i = 0, 1, \ldots, n$ mit $h = \frac{b-a}{n}$, so kann man nach Lemma 1 Koeffizienten A_k so bestimmen, daß $Q_n(f)$ mit

$$I(f) = \int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n(f) = Q_n(f) + R_n(f)$$

exakt für Polynome vom $Grad \leq n$ ist.
Die so bestimmten Quadraturformeln heißen *geschlossene* $(n+1)$-*Punkt Newton-Cotes Formeln* auf dem Intervall $[a, b]$.

2) Wählt man die Stützstellen der geschlossenen Newton-Cotes-Formeln und läßt sodann die Intervallenden unberücksichtigt, so spricht man von *offenen Newton-Cotes-Formeln.*

3) Setzt man $h = \frac{b-a}{n+1}$ und bestimmt die Stützstellen x_i gemäß $x_i = a + (i + \frac{1}{2})h, \ i = 0, 1, \ldots, n,$ so erhält man als weiteren Vertreter von Newton-Cotes-Typ-Formeln die *MacLaurin Quadraturformeln.*

4) Unterteilt man das Integrationsintervall $[a, b]$ in m gleichlange Teilintervalle, so erhält man durch wiederholte Anwendung einer Quadraturformel $Q_n(f)$ (z.B. einer $(n+1)$-Punkt Newton-Cotes Formel) auf jedem der m Teilintervalle und anschließendes Aufsummieren eine *Quadraturformel in zusammengesetzter Form.*
(Vgl. Davis/Rabinowitz [8], Zwillinger [56], Engels [16], S.70, Filippi [28], Brass [5], S.19)

Bemerkung. Die Unterteilung des Intervalls $[a, b]$ zur Erzeugung von zusammengesetzten Quadraturformeln muß nicht notwendigerweise in gleichlange Teilintervalle geschehen, auch muß nicht für jedes der Teilintervalle die gleiche Quadraturformel ausgewählt werden.
(Vgl. Brass [5], S.30)

Nach Satz 1 existiert zu $n+1$ paarweise verschieden vorgegebenen Stützstellen eine eindeutig bestimmte interpolatorische Quadraturformel, deren Grad mindestens gleich n ist. Speziell für Newton-Cotes-Formeln gilt:

Satz 2 *Der Grad d einer $(n+1)$-Punkt Newton-Cotes-Formel ist*

$$d = \begin{cases} n & \text{für } n \text{ ungerade} \\ n+1 & \text{für } n \text{ gerade .} \end{cases}$$

Beweis. Siehe z.B. Stroud [51], S.114.

Bei den bisher betrachteten Quadraturformeln ist man stets von vorgegebenen Integrationsstützstellen ausgegangen und hat die zugehörigen Gewichte bestimmt. Nun stellt man sich die Aufgabe, sowohl die Stützstellen x_k, als auch die Gewichte A_k so zu wählen, daß die resultierende interpolatorische Quadraturformel von maximalem Grad ist.

Satz 3 *Der Grad einer Quadraturformel mit $n+1$ Stützstellen ist höchstens $(2n+1)$.*

Beweis. Siehe z.B. Schwarz [49], S.341, Isaacson/Keller [38], S.308ff, Engels [16].

Bezeichnung. Interpolatorische Quadraturformeln von maximalem Grad heißen *Gauß-Typ-Quadraturformeln.*
(Vgl. Schwarz [49], Engels [16])

Betrachten wir nachfolgend exemplarisch die Quadraturformeln vom Gauß-Legendre-Typ.

Satz 4 *Es existiert genau eine Quadraturformel*

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \; x_k \in [-1, 1]$$

mit $n+1$ Stützstellen x_k, welche den maximalen Genauigkeitsgrad $(2n+1)$ besitzt. Die Stützstellen sind die Nullstellen des $(n+1)$-ten Legendre-Polynoms $P_{n+1}(x)$ und die Gewichte sind gegeben durch

$$A_k = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \left(\frac{x - x_i}{x_j - x_i} \right)^2 dx, \; k = 0, 1, \ldots, n \, .$$

Beweis. Siehe z.B. Schwarz [49].

Bemerkung.

1) Die Festlegung des Integrationsintervalls auf $[-1, 1]$ stellt keine Einschränkung dar, denn jedes Intervall $[a, b]$ läßt sich mittels einer linearen Transformation auf das Intervall $[-1, 1]$ abbilden.
(Vgl. dazu die Methode des Taylor-Abgleichs.)

2) Weitere Quadraturverfahren, die eng mit der Theorie der Orthogonalpolynome verknüpft sind, sind das Polya-Verfahren, das Filippi-Verfahren und das Clenshaw-Curtis-Verfahren. Sie verwenden die Nullstellen der Tschebyscheffpolynome erster und zweiter Art als Stützstellen. Bei n Stützstellen sind dies beim Polya-Verfahren die $x_i \in [-1, 1]$ mit $x_i = -cos\left(\frac{i-\frac{1}{2}}{n}\pi\right)$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$, sowie beim Filippi-Verfahren die $x_i \in [-1, 1]$ mit $x_i = -cos\left(\frac{i}{n+1}\pi\right)$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$. Das Clenshaw-Curtis-Verfahren unterscheidet sich vom Filippi-Verfahren lediglich dadurch, daß zusätzlich die Stützstellen $+1, -1$ Verwendung finden.
(Vgl Brass [5], S.113ff)

Verwendet man das *Richardson-Extrapolations-Prinzip* mit der Sehnen-Trapez-Regel in zusammengesetzter Form als Basisformel

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

Schrittweite $h = \dfrac{b-a}{N}$, N = Anzahl der Teilintervalle, so gelangt man zum Romberg-Quadratur-Schema.

$$
\begin{array}{r|llll}
h & T_{0,k} & T_{1,k} & T_{2,k} & \cdots \\
\hline
h_0 = h & T_{0,0} & & & \\
 & & T_{1,0} & & \\
h_1 = \frac{h}{2} & T_{0,1} & & T_{2,0} & \cdots \\
 & & T_{1,1} & \vdots & \\
h_2 = \frac{h}{4} & T_{0,2} & \vdots & & \\
 & \vdots & & & \\
\vdots & & & &
\end{array}
$$

mit $T_{m,k} = \dfrac{4^m T_{m-1,k+1} - T_{m-1,k}}{4^m - 1}$.

Bezeichnung. Die Formeln $T_{m,k}$ des Romberg-Quadratur-Schemas heißen *Romberg Quadratur-Formeln* .
(Vgl. Davis/Rabinowitz [8],S.166ff, Engels [16], S.372, Stroud [51], S.155)

2.3 Quadratur und AWA bei gewöhnlichen Differentialgleichungen

Formuliert man das Quadraturproblem als Anfangswertaufgabe

$$
\begin{aligned}
y'(t) &= f(t) \\
y_0 = y(a) &= 0 \\
y(b) &= \int_a^b f(t)\,dt\,,
\end{aligned}
$$

so lassen sich auch die Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen wie z.B. die Runge-Kutta-Verfahren anwenden.
(Vgl. Filippi [32])

Ein (s+1)-stufiges Runge-Kutta-Verfahren der Form

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(x_0, y_0) \\
k_1 &= f(x_0 + \alpha_1 h, y_0 + h c_{1,0} k_0) \\
\vdots & \qquad\qquad \vdots \\
k_s &= f(x_0 + \alpha_s h, y_0 + h \sum_{i=0}^{s-1} c_{s,i} k_i) \\
y_1 &= y_0 + h \sum_{i=0}^{s} \gamma_i k_i
\end{aligned}
$$

vereinfacht sich bei einem Quadraturproblem zu

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(x_0) \\
k_1 &= f(x_0 + \alpha_1\, h) \\
\vdots & \qquad \vdots \\
k_s &= f(x_0 + \alpha_s\, h) \\
\\
y &= h \sum_{i=0}^{s} \gamma_i\, k_i = \sum_{i=0}^{s} A_i\, f(x_i)
\end{aligned}
$$

mit $A_i = h\gamma_i$ und $f(x_i) = f(x_0 + \alpha_i\, h) = k_i$. Führt man nun wie üblich eine Taylerentwicklung mit anschließendem Koeffizientenvergleich durch, so erhält man die vereinfachten Bedingungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
\gamma_0 + \gamma_1 + \ldots + \gamma_s &= 1 \\
\gamma_1\, \alpha_1 + \gamma_2\, \alpha_2 + \ldots + \gamma_s\, \alpha_s &= \frac{1}{2} \\
\vdots \qquad & \qquad \vdots \\
\gamma_1\, \alpha_1^{s-1} + \gamma_2\, \alpha_2^{s-1} + \ldots + \gamma_s\, \alpha_s^{s-1} &= \frac{1}{s}\,.
\end{aligned}
$$

Die Lösung dieses nichtlinearen Gleichungssystems liefert schließlich die gesuchten α_i und γ_i der Quadraturformel.

2.4 Zur Konvergenz von Quadraturformeln

Satz 5 (Polya, Stekloff) *Die Quadraturformel $Q_n(f)$ konvergiert für $n \to \infty$ gegen $I(f)$ für jedes $f \in C[a,b]$ genau dann, wenn gilt:*

1. $\sum_{k=0}^{n} |A_k| \leq K < \infty \; \forall n,$

2. *$Q_n(f)$ konvergiert für alle Polynome, $Q_n(f) \to I(f)$, f ist Polynom.*

Beweis. Siehe Krylov [41], Brass [5], S.32, Engels [16], S.183.

Satz 6 *Eine interpolatorische Quadraturformel konvergiert genau dann, wenn gilt:*

$$\sum_{k=0}^{n} |A_k| \leq K < \infty.$$

Beweis. Siehe Krylov [41], S.265.

Folgerung. Für die Newton-Cotes-Formeln ist Satz 6 *nicht* erfüllt.
Siehe Krylov [41].

Aber:
Zitat H.R. Schwarz: "Falls aber $f(x)$ periodisch und analytisch auf $\mathbb{R}$ ist, und falls $(b-a)$ gleich der Periode ist, dann bedarf die Sehnen-Trapez-Regel keiner weiteren Verbesserung mehr." (Schwarz [49], S.321)
(Vgl. auch Isaacson/Keller [38], S.340, Hämmerlin [35])

Satz 7 *Für jede zusammengesetzte Quadraturformel $Q_n(f)$, die Konstanten exakt integriert gilt:*

$$Q_n(f) \to I(f) \quad \textit{für} \quad n \to \infty\,,\; f \in C[a,b].$$

Beweis. Siehe Davis/Rabinowitz [8], S.25, Brass [5], S.21, Engels [16], S.196.

Definition. Eine Quadraturformel heißt *positiv* genau dann, wenn alle Gewichte nichtnegativ sind.
(Vgl. Engels [16])

Satz 8 *Sind alle Gewichte A_k einer Quadraturformel $Q_n(f)$ nichtnegativ, so konvergiert $Q_n(f)$ für $f \in C[a,b]$ genau dann, wenn $Q_n(f)$ für alle Polynome konvergiert.*

Beweis. Siehe Krylov [41], S.265, Engels [16], S.189.

Satz 9 *Gauß Quadraturformeln sind stets positiv*

Beweis. Siehe z.B. Piessens [46], Engels [16], S.315.

Satz 10 *Romberg Quadraturformeln sind stets positiv.*

Beweis. Siehe Engels [16], S.381.

Satz 11 *Das Romberg-Quadratur-Schema konvergiert für jedes $f \in C[a,b]$.*

Beweis. Siehe Engels [16], S.382.

2.5 Fehlerabschätzungen

Ausgehend von der Restgliedabschätzung für das Lagrange-Interpolations-Polynom

$$|f(x) - L_n(x)| \leq \frac{(b-a)^{n+1}}{(n+1)!} \max_{x\in[a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$$

erhält man für das Quadraturformelrestglied der Newton-Cotes-Formeln die Abschätzung:

Satz 12 *Für die Newton-Cotes-Formeln gilt die Fehlerabschätzung*

$$R_n \leq \frac{(b-a)^{n+2}}{(n+1)!} \max_{x\in[a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right| \ .$$

Beweis. Siehe Brass [5], S.128, Filippi [28].

Eine weitere wichtige Quelle für Abschätzungen und andere Aussagen über den Rest ist die *Peanosche Restglieddarstellung.* Wir orientieren uns im Folgenden an der Darstellung von Brass. (Brass [5], S.39ff, vgl. auch Engels [16], S.93ff)

Bezeichnung.

$$u_+^0 = \begin{cases} 1 & u > 0 \\ \frac{1}{2} & u = 0 \\ 0 & u < 0 \end{cases} \qquad u_+^r = \begin{cases} u^r & u \geq 0 \\ 0 & u < 0 \end{cases} \qquad ; r \geq 1.$$

Definition. Sei Q_n eine Quadraturformel mit $R_n(P_{s-1}) = 0$, $R_n(f) = I(f) - Q_n(f)$, P_{s-1} Polynom vom *Grad* $s-1$.
Dann heißt die Funktion K_s

$$K_s(x) = R_n \left(\frac{(* - x)_+^{s-1}}{(s-1)!} \right)$$

der s-te *Peanokern* von Q_n.

Bemerkung.

1) Quadraturformeln, die Konstanten *nicht* exakt integrieren, haben keinen Peanokern.

2) Ist Q_n exakt für $f \in P_{s-1}$, P_{s-1} Menge aller Polynome vom *Grad* $s-1$, aber nicht für alle $f \in P_s$, so hat Q_n genau s Peanokerne $K_1, K_2, \cdots, K_s$.

Satz 13 *Es sei* $R_n(P_{s-1}) = 0$. *Ist* $f \in C^s[a, b]$, *so gilt*

$$R_n(f) = \int_a^b f^{(s)}(x)\ K_s(x)\ dx.$$

Beweis. Siehe z.B. Brass [5], S.40, vgl. Engels [16], S.94f.

Satz 14 *Sei* $M_s(f) = \sup_{x \in [a,b]} \left| f^{(s)}(x) \right|$. *Falls die vorkommenden Peano-Kerne existieren, gilt*

$$R_n(f) \leq M_s(f) \int_a^b |K_s(x)|\ dx.$$

Beweis. Siehe Brass [5], S.42.

Bemerkung. Restglieder von Quadraturformeln lassen sich unter Verwendung höherer Ableitungen entwickeln. Die nachfolgende Entwicklung ist wegen ihrer Anwendung auf zusammengesetzte Quadraturformeln von Interesse.

Definition. Sei $Q_n(f)$ eine feste Quadraturformel mit $R_n(P_0) = 0$ und K_1 ihr Peano-Kern. Dann setzt man

$$\begin{aligned} c_1(x) &= -K_1(x) + \frac{1}{b-a}\int_a^b K_1(u)\,du\ ,\ a < x < b \\ c_1(a) &= c_1(b) = \frac{1}{b-a}\int_a^b K_1(u)\,du \\ c_\nu(x) &= c_\nu(a) + \int_a^x c_{\nu-1}(u)\,du\ ;\ \int_a^b c_\nu(x)\,dx = 0\ ,\ \nu = 2,3,\cdots . \end{aligned}$$

Klar: $c_\nu(a) = c_\nu(b)$.

Satz 15 *Für jedes* $f \in C^s[a,b]$ *gilt*

$$R_n(f) = \sum_{\nu=0}^{s-1} c_{\nu+1}(a)\left[f^{(\nu)}(b) - f^{(\nu)}(a)\right] + (-1)^s \int_a^b f^{(s)}(x)c_s(x)\,dx.$$

Beweis. Siehe Brass [5], S.47f.

Bezeichnung. Sei $Q_n(f)$ eine Quadraturformel auf dem Grundintervall $[0,1]$. Man bezeichnet $Q_n(f)$ auch als *Elementarformel*, $Q_n(f) := Q^{el}$. Ihre auf das Teilintervall $[a+(\nu-1)H, a+\nu H]$, $H = \frac{b-a}{m}$ Transformierte bezeichnet man mit $Q_n^{(\nu)}$.
Dann ist

$$Q_{(m)} := Q_n^{(1)} + Q_n^{(2)} + \cdots + Q_n^{(m)}$$

eine Quadraturformel in zusammengesetzter Form, entstanden durch m-faches Anwenden der Elementarformel. Für diese Q^{el} ist der Rest entwickelbar nach Satz 15.
Bezeichne c_ν^{el} die auf das Intervall $[0,1]$ bezogenen Funktionen c_ν.

Satz 16 *Ist* $f \in C^s[a,b]$, *so gilt für den Fehler einer zusammengesetzten Quadraturformel*

$$\begin{aligned} R_m(f) &= \sum_{\nu=0}^{s-1}(-1)^\nu c_{\nu+1}^{el}(0)H^{\nu+1}\left[f^{(\nu)}(b) - f_{(\nu)}(a)\right] \\ &+ (-1)^s H^s \int_a^b f^{(s)}(x)\tilde{c}_s^{el}(m\frac{x-a}{b-a})\,dx. \end{aligned}$$

Dabei bedeutet $\tilde{c}_s^{el}$ *diejenige Funktion mit Periode 1, die auf* $[0,1]$ *mit* c_s^{el} *übereinstimmt.*

Beweis. Siehe Brass [5], S.168ff.

Bemerkung. Weitere Fehlerabschätzungen für zusammengesetzte Quadraturformeln findet man z.B. bei Engels [16] oder Isaacson/Keller [38], S. 336ff.

Bisher war es nötig, zur Bestimmung einer Fehlerschranke die (evtl. höheren) Ableitungen von $f(x)$ zu berechnen. Fordert man allgemein, daß $f(z) = f(x+iy)$ analytisch im Einheitskreis und stetig auf seinem Rand Γ ist, wobei der Einheitskreis das betrachtete Intervall der reellen Achse umschließt, so kann man den Fehler in der Form $|R(f)| \leq \sigma \|f\|_\infty$ abschätzen, d.h. man kommt ohne Differentation der zu integrierenden Funktion aus. Aufgabe ist jetzt noch, σ, eine dem Näherungsansatz eigentümliche Konstante zu berechnen, bzw. abzuschätzen. Für einige Newton-Cotes-Formeln bei wiederholter Anwendung (Vgl. zusammengesetzte Formeln), wurde dieses Vorgehen von Hämmerlin [35], [36] vorgeführt. Legt man sich, was durch eine lineare Transformation stets zu erreichen ist, auf das Integrationsintervall $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ fest, so erhält man z.B.

Sehnentrapezregel	$\sqrt{2\,\pi}\;\sigma < 0.189h^2$
Tangententrapezregel	$\sqrt{2\,\pi}\;\sigma < 0.0946h^2$
Simpson-Regel	$\sqrt{2\,\pi}\;\sigma < 0.253h^4$
Newton $\frac{3}{8}$ -Regel	$\sqrt{2\,\pi}\;\sigma < 0.569h^4.$

(Vgl. Hämmerlin [36], [37])

Bemerkung. Zitat G. Hämmerlin: "Der Vorteil der Abschätzungen in dieser Arbeit gegenüber den herkömmlichen, in die höhere Ableitungen von $f(x)$ eingehen, liegt weniger in der Schärfe als in ihrer Einfachheit. Während sich $\|f(z)\|$ im allgemeinen leicht abschätzen läßt, kann sich die Ermittlung von Ableitungsschranken recht schwierig gestalten." (Hämmerlin [36])

Fehlerabschätzungen wie vorangegangen beschrieben, sind für die Praxis im allgemeinen zu aufwendig, daher verwendet man in der adaptiven Quadratur statt einer Fehlerabschätzung eine *Fehlerschätzung.* Man greift dabei in aller Regel auf eine Fehlerschätzung nach dem Prinzip von Runge zurück. Dazu führt man zunächst zwei Integrationsschritte mit der Schrittweite h aus. Danach integriert man erneut, nun allerdings mit der Schrittweite $2h$. Der Vergleich beider Ergebnisse liefert die gewünschte Schätzung des Fehlers. In einer modifizierten Form werden zwei Quadraturformeln I_1, I_2 des gleichen Typs aber unterschiedlicher Ordnung, z.B. ein Gauß-Kronrod Paar oder ein Paar aufeinanderfolgender Formeln eines (der im Anschluß konstruierten)

Quadraturformeltripel benutzt.Ihre Abweichung (relativ, absolut oder gemischt) voneinander liefert auch hier die Schätzung des Fehlers.

Bezeichnung. Sind $I_1,\ I_2$ Näherungswerte für das Integral $I = \int_a^b f(x)\,dx$ die mittels zweier Quadraturformeln gleichen Typs aber unterschiedlicher Ordnung berechnet wurden, dann heißt

$$err = |I_1 - I_2|$$

der *geschätzte* Quadraturfehler.
(Vgl. Schwarz [49], Deuflhard [9], Köckler [39])

Kapitel 3

Globale und adaptive automatische Quadratur

Softwaresysteme müssen Quadraturformeln enthalten, die sich mit Hilfe einer Genauigkeitskontrolle selbst steuern. Zum einen wird eine Folge (I_k), $k = 1, 2, \cdots$ von Näherungswerten I_k für das Integral $I = \int_a^b f(x)\,dx$ von z.B. eingebetteten Quadraturformeln, d.h. die Stützstellen der vorhergehenden Quadraturformel sind vollständig unter den Stützstellen der aktuellen Formel zu finden, erzeugt. Die Berechnung wird abgebrochen, sobald für den (geschätzten) Fehler err, $err = |I_k - I_{k-1}| \leq tol$, bei vorgegebener Genauigkeit tol gilt. Bei diesem Vorgehen wird derselbe Quadraturformeltyp mit wachsender Anzahl an Stützstellen, d.h. mit wachsender Ordnung (Grad) auf das gesamte Integrationsintervall angewandt, man spricht daher auch von *globaler automatischer Quadratur*. Zum anderen kann man aber im allgemeinen ein Integral über ein kurzes Intervall genauer und schneller berechnen, als ein entsprechendes Integral über ein langes Intervall. Deshalb ist es vorteilhaft, vor der Anwendung einer Quadraturformel das Integrationsintervall $[a, b]$ geeignet zu unterteilen und sodann die Teilintegrale aufzusummieren. Dies legt nahe, $[a, b]$ fortgesetzt solange zu unterteilen, bis in jedem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$ der Länge $h_i = x_{i+1} - x_i$ mit der zugrundegelegten Quadraturformel wie vorher die geforderte Genauigkeit erreicht wird. Eine Reduktion des Arbeitsaufwandes kann dabei dadurch erzielt werden, daß die Wahl der Integrationsstützstellen dem individuellen Integranden angepaßt wird. Dadurch wird die Unterteilung dort feiner, wo f stark variiert, und gröber in Intervallen geringer Variation. Die Entscheidung, ob ein Teilintervall weiter unterteilt werden soll, d.h. mit welcher Schrittweite

h_i man im Folgenden voranschreitet, erfolgt i.a. auf Grund des Vergleichs zweier verschiedener Näherungswerte, wobei die zugehörigen Quadraturformeln unterschiedlicher Ordnung (Grad) sind. Erfolgt die Bestimmung der neuen Schrittweite automatisch, so spricht man von *adaptiver Quadratur*. Unser Ziel wird es nun sein, ein *global adaptives Verfahren*, d.h. ein Verfahren, in dem gleichzeitig Schrittweite und Ordnung dem Problem angepaßt werden können, zu entwickeln.

3.1 Eingebettete Quadraturformeln

Da, wie gesagt, in Softwaresystemen selbststeuernde Quadraturformeln enthalten sein müssen, benötigen wir, um die angesprochene Folge (I_k), $k = 1, 2, \cdots$ von Näherungen I_k bzw. um die unterschiedlichen Näherungswerte $\tilde{I}_1, \tilde{I}_2$ für dasselbe Teilintervall zu berechnen, eine Folge bzw. Paare von Quadraturformeln unterschiedlichen Grades. Um nun den Rechenaufwand gering zu halten, ist es dabei von Vorteil, wenn die verwendeten Formeln möglichst viele Stützstellen gemeinsam benutzen und somit einmal berechnete Funktionswerte weiter verwendet werden. Nachfolgend suchen wir daher Folgen von Quadraturformeln $(Q^{(k)})$, $k = 1, 2, \cdots$ mit $Grad(Q^{(k-1)}) < Grad(Q^{(k)})$ und für die Mengen der Stützstellen gilt:

$$\left\{x_i \mid x_i \,\text{ist Knoten von}\, Q^{(k-1)}\right\} \subseteq \left\{x_j \mid x_j \,\text{ist Knoten von}\, Q^{(k)}\right\}.$$

Quadraturformeln mit diesen Eigenschaften heißen *eingebettet*.
(Vgl. z.B. Favati [21], Filippi [31], Patterson [42])
Wir werden die Eigenschaft des Eingebettetseins später bei der Konstruktion von Quadraturformeltripeln verwenden. Auch einige in der Auswertung benutzten Vergleichsroutinen basieren auf speziellen eingebetteten Formeln. Aus diesem Grund sollen hier Taktiken der Einbettung kurz vorgestellt werden.

3.1.1 Optimale Erweiterungen von Quadraturformeln

Unter den Quadraturformeln sind die Gauß'schen Formeln dadurch ausgezeichnet, daß sie vom höchstmöglichen Grad $(2n-1)$ bei n Stützstellen sind. Kronrod [40] erweitert eine n-Punkt Gauß-Legendre-Formel optimal durch Addition von $(n+1)$ zusätzlichen Stützstellen und erzeugt eine Quadraturformel vom Grad $(3n+1)$ bzw. vom Grad $(3n+2)$ falls n ungerade ist, bei nunmehr $(2n+1)$ Stützstellen. Bedingt durch diese Konstruktion werden also alle Knoten der Gaußformel beibehalten, die zugehörigen Funktionswerte weiterverwendet. Die Gaußformel ist somit in die Kronrodformel eingebettet. Patterson [42] greift die Idee Kronrods auf und beschreibt optimale Erweiterungen allgemeiner Quadraturformeln. Er gibt, ausgehend von einer 3-Punkt Gaußformel, eine Folge eingebetteter, optimal erweiterter Quadraturformeln mit positiven Gewichten der nachfolgenden Stützstellenanzahl sowie zugehörigem Grad an,

Anzahl der Stützstellen	3	7	15	31	63	127	255	511
zugehöriger Grad	5	11	23	47	95	191	383	767

die in das Softwarepaket Quadpack (a subroutine package for automatic integration) [46] Eingang gefunden hat. (Vgl. Köckler [39])

3.1.2 Absteigende Folgen von Quadraturformeln

Eine andere Möglichkeit, eine Folge von Quadraturformeln zu erzeugen, von der jede Formel die Stützstellen ihres Vorgängers benutzt, ist, ausgehend von der Menge der Stützstellen einer Basisformel, Teilmengen dieser Stützstellenmenge zu bestimmen und für jede dieser Teilmengen eine Quadraturformel zu berechnen. Patterson [43] beschreibt dieses Vorgehen ausgehend von einer Gaußformel mit $2^r + 1$ Stützstellen vom Grad $2(2^r + 1) - 1$. Seien nun $x_j,\ j = 1(1)(2^r + 1)$ die Stützstellen dieser Ausgangsformel. Dann erzeugt man r Teilmengen von Stützstellen $x_{2^i(j-1)+1},\ j = 1(1)(2^{r-i}+1),\ i = 1(1)r$ durch sukzessives Streichen von alternierenden Knoten der Ausgangsstützstellen, und bestimmt für jede dieser Stützstellenmengen eine interpolatorische Quadraturformel. Bedingt durch diese Konstruktion beobachtet man die Eigenschaft, daß beginnend mit der untersten Formel, jede nachfolgende Quadraturformel die Stützstellen und somit die schon berechneten Funktionswerte ihres Vorgängers weiterverwendet, also keine Information verschwendet wird. Weiter ist anzumerken, daß diese eingebetteten Quadraturformeln sämtlich positiv sind, allerdings nur die Ausgangsformel den maximalen Grad $2(2^r + 1) - 1$ besitzt.

3.1.3 Interpolatorische Quadraturformeln für optimalen Zusammenbau

Ein Nachteil, den die bisher konstruierten Folgen von Quadraturformeln aufweisen ist, daß fast sämtliche Funktionswerte bei einer weiteren Intervallunterteilung neu berechnet werden müssen.Von Interesse ist es daher, solche Formeln zu erzeugen, die, wenn man die Taktik der Intervallhalbierung verfolgt, in zusammengesetzter Form alle schon berechneten Funktionswerte weiterverwenden. Ausgehend von der Trapezregel versucht man nun eine Folge von Quadraturformeln $Q^{(1)}, \cdots, Q^{(n)}$ mit nachfolgenden Eigenschaften zu konstruieren:

- die Stützstellen von $Q^{(k-1)}$ sind eine Teilmenge der Stützstellen von $Q^{(k)}$.
- bei Verwendung der Formeln in zusammengesetzter Form werden keine Funktionswerte verworfen.
- der Grad von $Q^{(k)}$ ist größer als der Grad von $Q^{(k-1)}$.
- der Abstand zweier benachbarter Stützstellen ist (in Anlehnung an die Gauß-Typ-Formeln) zum Intervallrand hin geringer als in der Intervallmitte.
- alle Formeln stammen von der Trapezregel ab, d.h. $Q^{(1)}$ ist die 2-Punkt Newton-Cotes Formel.
- alle Formeln sind numerisch stabil, d.h. alle auftretenden Gewichte sind positiv.

Quadraturformeln die diese Bedingungen erfüllen heißen *RMS-Formeln* (**r**ecursive, **m**onotone and **s**table). Favati u.a. [21] haben alle RMS-Formeln bestimmt und sie in Baumform zusammengestellt. Es zeigt sich, daß leider nur wenige der oben beschriebenen Folgen von Quadraturformeln von unterschiedlicher, begrenzter Länge existieren.

3.1.4 Runge-Kutta-Formelpaare

Ausgehend von den Runge-Kutta-Formelpaaren zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form $y'(x) = f(x, y)$ stellt man fest, daß diese häufig so konstruiert sind, daß sie sich im Quadraturfall, d.h. für $y'(x) = f(x)$ zu Standard-Quadraturformeln reduzieren (Vgl. Filippi [32]). Bei der Konstruktion legte man Wert darauf, daß bei diesen Formelpaaren vom Grad $(p-1)p$ (Ordnung $p(p+1)$) von beiden Formeln gemeinsame Stützstellen verwendet werden, d.h. sie erfüllen die Eigenschaft des Eingebettetseins. (Vgl. Dormand/Prince [12], [13], [14], Fehlberg [25], [26], [27], Filippi [29], [30], Verner [52]).
Da zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen konstruiert, führt dies

im Quadraturfall leider oftmals dazu, daß die Formeln identisch sind und somit eine Schätzung des Fehlers nicht möglich ist. Shampine [50] beschreibt nun ein Vorgehen, die Auslöschung der Fehlerschätzung zu verhindern. Betrachten wir dazu exemplarisch das Runge-Kutta-Formelpaar vom Grad 6(7) (Ordnung 7(8)), RK 7(8) nach Fehlberg [26]. Im Quadraturfall sind beide Formeln identisch und die Schätzung des lokalen Fehlers mißlingt. Die Quadraturformel, entstanden aus dem Formelpaar RKF 7(8) integriert ein Polynom 7-ten Grades exakt, d.h. sie ist vom Grad 7. Fehlberg verwendete 10 Stützstellen, von denen im Quadraturfall einige mit dem Gewicht Null versehen sind. Da nun zur Konstruktion einer Quadraturformel vom Grad 8 lediglich 9 Knoten benötigt werden (siehe Satz 1), schlägt Shampine [50] vor, die vorgegebenen 10 Stützstellen weiter zu nutzen, eine davon zu streichen, und zwar so, daß die resultierende Quadraturformel von jetzt höherem Grade, die nun verschieden von der Formel des Formelpaares RK 7(8) ist, möglichst kleine Koeffizienten besitzt. Die Eigenschaft des Eingebettetseins bleibt somit erhalten.

Kapitel 4

Quadraturroutinen auf der Basis von Quadraturformeltripeln

4.1 Konstruktion von Quadraturformeltripeln

4.1.1 Quadraturformeltripel auf Basis von Runge-Kutta-Formelpaaren

Wir machen uns oben beschriebenes Vorgehen zu eigen und werden im Folgenden Quadraturtripel vom Grad $p_1(p_2)p_3$ mit $p_1 < p_2 < p_3$, ausgehend von Standard-Runge-Kutta-Formelpaaren durch Verwendung vorgegebener aber noch nicht benutzter Stützstellen, bzw durch sukzessives Streichen von Stützstellen erzeugen. Dabei wird, falls die Formeln des RKF-Formelpaares im Quadraturfall identisch zusammenfallen, diese als Basisformel vom Grad p_2 festgesetzt und, ausgehend von dieser Basisformel, eine Quadraturformel höheren Grades p_3 und eine niedrigeren Grades p_1 konstruiert. Ansonsten werden wir, da i.a. von den vorgegebenen Stützstellen einige nicht benutzt werden, die Formeln des RK-Formelpaares des Grades $p_1(p_2)$ als Basisformeln verwenden und zusätzlich eine Quadraturformel höheren Grades p_3 hinzukonstruieren.
D.h. wir bestimmen neben der Näherungslösung y bzw. neben den Näherungslösungen $\tilde{y}$ und y, welche uns durch das RK-Formelpaar vorgeben sind, weitere Näherungen $\tilde{y}$ und $\hat{y}$ bzw. eine weitere Näherung $\hat{y}$ mit

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(x_0) \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
k_s &= f(x_0 + \alpha_s h) \\
\tilde{y} &= h \sum_{i=0}^{s} \tilde{\gamma}_i k_i = \sum_{i=0}^{s} h \tilde{\gamma}_i f(x_0 + \alpha_i h) = \sum_{i=0}^{s} \tilde{A}_i f(x_i) \\
y &= h \sum_{i=0}^{s} \gamma_i k_i = \sum_{i=0}^{s} h \gamma_i f(x_0 + \alpha_i h) = \sum_{i=0}^{s} A_i f(x_i) \\
\hat{y} &= h \sum_{i=0}^{s} \hat{\gamma}_i k_i = \sum_{i=0}^{s} h \hat{c}_i f(x_0 + \alpha_i h) = \sum_{i=0}^{s} \hat{A}_i f(x_i)
\end{aligned}
$$

wobei die Quadraturformeln zur Berechnung von $\tilde{y}, y$ und $\hat{y}$ vom Grad p_1, p_2 und p_3 mit $p_1 < p_2 < p_3$ sind.
Diese Quadraturtripel haben den Vorteil, daß sie die durch die Basisformel bzw. Basisformeln vorgegebenen Stützstellen gemeinsam benutzen, also keinerlei Arbeit in die Berechnung zusätzlicher Funktionswerte investiert werden muß. Desweiteren bieten sie die Möglichkeit, neben einer Schrittweitensteuerung zusätzlich eine Ordnungssteuerung zu etablieren. Das Auswahlkriterium dafür, welche der Stützstellen gestrichen werden sollen, ist, daß der Koeffizient des führenden Restgliedterms möglichst klein wird, um so den lokalen Fehler, der i.a. durch den führenden Term des Restgliedes bestimmt ist, zu minimieren. Neben den Standard-Runge-Kutta-Formelpaaren werden wir später noch geschlossene und offene Newton-Cotes-Typ Quadraturformeln als Basis zur Konstruktion von Quadraturformeltripeln verwenden.

4.1.1.1 Ein Formeltripel vom Grad 6(7)8

Beschäftigen wir uns wieder mit dem Runge-Kutta-Formelpaar RK 7(8) zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen nach Fehlberg [26],

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(x_0, y_0) \\
k_i &= f(x_0 + \alpha_i\, h, y_0 + h \sum_{j=0}^{i-1} c_{i,j}\, k_j), \quad i = 1(1)12 \\
y &= y_0 + h \sum_{i=0}^{10} \gamma_i\, k_i \\
\tilde{y} &= y_0 + h \sum_{i=0}^{12} \tilde{\gamma}_i\, k_i\ .
\end{aligned}
$$

Dieses reduziert sich im Quadraturfall zu

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(x_0) \\
k_i &= f(x_0 + \alpha_i\, h), \quad i = 1(1)9 \\
y &= h \sum_{i=0}^{9} \gamma_i\, k_i = \sum_{i=0}^{9} A_i\, f(x_i) \\
\tilde{y} &= h \sum_{i=0}^{9} \tilde{\gamma}_i\, k_i = \sum_{i=0}^{9} \tilde{A}_i\, f(x_i)\ .
\end{aligned}
$$

Bei Integration über das Intervall $[a, b]$, Schrittweite $h = b - a$, besitzt es nachfolgende Stützstellen und zugehörige Gewichte,

i	x_i	$\tilde{A}_i$	A_i
0	a	$\frac{41\,h}{840}$	$\frac{41\,h}{840}$
1	$a+\frac{2\,h}{27}$	0	0
2	$a+\frac{h}{9}$	0	0
3	$a+\frac{h}{6}$	$\frac{9\,h}{35}$	$\frac{9\,h}{35}$
4	$a+\frac{h}{3}$	$\frac{9\,h}{280}$	$\frac{9\,h}{280}$
5	$a+\frac{5\,h}{12}$	0	0
6	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{34\,h}{105}$	$\frac{34\,h}{105}$
7	$a+\frac{2\,h}{3}$	$\frac{9\,h}{280}$	$\frac{9\,h}{280}$
8	$a+\frac{5\,h}{6}$	$\frac{9\,h}{35}$	$\frac{9\,h}{35}$
9	$a+h$	$\frac{41\,h}{840}$	$\frac{41\,h}{840}$

d.h. die beiden Quadraturformeln fallen identisch zusammen. Bezeichnet im folgenden j in $Q_{(j)}(f)$ den Grad einer Quadraturformel, so lautet unsere Formel

$$\begin{aligned} Q_{(7)}(f) = \quad & h\left(\frac{41}{840}f(a)+\frac{9}{35}f(a+\frac{h}{6})+\frac{9}{280}f(a+\frac{h}{3})+\frac{34}{105}f(a+\frac{h}{2})+\right. \\ & \left.\frac{9}{280}f(a+\frac{2\,h}{3})+\frac{9}{35}f(a+\frac{5\,h}{6})+\frac{41}{840}f(a+h)\right) \end{aligned}$$

mit dem Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|R| = \frac{h^9}{1567641600} \approx 6.37\cdot 10^{-10}h^9.$$

Verfährt man nun, wie von Shampine [50] vorgeschlagen, und verwendet die in $Q_{(7)}$ benutzten Stützstellen weiter, so findet man unter den 10 vorgegebenen Knoten noch drei, die bisher mit dem Gewicht Null versehen waren und wählt zwei von ihnen geeignet zur Konstruktion einer Quadraturformel, welche ein Polynom 8-ten Grades exakt integrieren soll, aus. Geeignete

Auswahl bedeutet, wie schon beschrieben, daß der Koeffizient des führenden Restgliedterms minimal wird. Es zeigt sich, daß dieses Kriterium gerade von den Stützstellen $a + \frac{2\,h}{27}$ und $a + \frac{5\,h}{12}$ erfüllt wird. Um die Gewichte $A_k = h \cdot \gamma_k$, $k = 0(1)8$ der gesuchten Quadraturformel zu bestimmen, führt man einen Tayler-Abgleich durch. Dies führt uns auf das Gleichungssystem

$$\mathbf{M}\,\vec{A} = \vec{b}$$

mit der Matrix $\mathbf{M}\ =$

$$\begin{pmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
0 & \frac{2h}{27} & \frac{h}{6} & \frac{h}{3} & \frac{5h}{12} & \frac{h}{2} & \frac{2h}{3} & \frac{5h}{6} & h \\
0 & \frac{2h^2}{729} & \frac{h^2}{72} & \frac{h^2}{18} & \frac{25h^2}{288} & \frac{h^2}{8} & \frac{2h^2}{9} & \frac{25h^2}{72} & \frac{h^2}{2} \\
0 & \frac{4h^3}{59049} & \frac{h^3}{1296} & \frac{h^3}{162} & \frac{125h^3}{10368} & \frac{h^3}{48} & \frac{4h^3}{81} & \frac{125h^3}{1296} & \frac{h^3}{6} \\
0 & \frac{2h^4}{1594323} & \frac{h^4}{31104} & \frac{h^4}{1944} & \frac{625h^4}{497664} & \frac{h^4}{384} & \frac{2h^4}{243} & \frac{625h^4}{31104} & \frac{h^4}{24} \\
0 & \frac{4h^5}{215233605} & \frac{h^5}{933120} & \frac{h^5}{29160} & \frac{625h^5}{5971968} & \frac{h^5}{3840} & \frac{4h^5}{3645} & \frac{625h^5}{186624} & \frac{h^5}{120} \\
0 & \frac{4h^6}{17433922005} & \frac{h^6}{33592320} & \frac{h^6}{524880} & \frac{3125h^6}{429981696} & \frac{h^6}{46080} & \frac{4h^6}{32805} & \frac{3125h^6}{6718464} & \frac{h^6}{720} \\
0 & \frac{8h^7}{3295011258945} & \frac{h^7}{1410877440} & \frac{h^7}{11022480} & \frac{15625h^7}{36118462464} & \frac{h^7}{645120} & \frac{8h^7}{688905} & \frac{15625h^7}{282175488} & \frac{h^7}{5040} \\
0 & \frac{2h^8}{88965303991515} & \frac{h^8}{67722117120} & \frac{h^8}{264539520} & \frac{78125h^8}{3467372396544} & \frac{h^8}{10321920} & \frac{2h^8}{2066715} & \frac{78125h^8}{13544423424} & \frac{h^8}{40320}
\end{pmatrix}$$

sowie den Vektoren

$$\vec{A}^{\,t} = (A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6, A_7, A_8)$$

und

$$\vec{b}^t = (h, \frac{h^2}{2}, \frac{h^3}{6}, \frac{h^4}{24}, \frac{h^5}{120}, \frac{h^6}{720}, \frac{h^7}{5040}, \frac{h^8}{40320}, \frac{h^9}{362880}).$$

Zur Lösung dieses und der bei der Konstruktion weiterer Quadraturformeltripel nachfolgend auftretenden Gleichungssysteme verwenden wir, wie auch später zur Erzeugung der Graphiken in der Auswertung das CA-Paket Mathematica [54], welches uns die entsprechenden Werkzeuge zur Verfügung stellt.

Wir erhalten schließlich die folgenden zu den vorgegebenen Knoten zugehörigen Gewichte

A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8
$-\frac{109\,h}{21000}$	$\frac{1162261467h}{4884740000}$	$-\frac{153\,h}{875}$	$\frac{333\,h}{280}$	$-\frac{55296\,h}{32375}$	$\frac{610\,h}{483}$	$-\frac{153\,h}{1120}$	$\frac{10359\,h}{35875}$	$\frac{4801\,h}{105000}$

und somit die Quadraturformel

$$Q_{(8)}(f) = \quad h\left(-\frac{109}{21000}f(a) + \frac{1162261467}{4884740000}f(a+\frac{2\,h}{27}) - \frac{153}{875}f(a+\frac{h}{6})+\right.$$
$$\frac{333}{280}f(a+\frac{h}{3}) - \frac{55296}{32375}f(a+\frac{5\,h}{12}) + \frac{610}{483}f(a+\frac{h}{2})-$$
$$\left.\frac{153}{1120}f(a+\frac{2\,h}{3}) + \frac{10359}{35875}f(a+\frac{5\,h}{6}) + \frac{4801}{105000}f(a+h)\right),$$

Schrittweite $h = b - a$, mit dem Koeffizienten des führenden Terms des Abbruchfehlers $|R| = \dfrac{11\,h^{10}}{304749527040} \approx 3.61 \cdot 10^{-11} h^{10}$.

Wir werden nun neben unseren Formeln 7-ten und 8-ten Grades nach Konstruktionsvorgabe eine Formel 6-ten Grades konstruieren. Um eine Formel 6-ten Grades zu bestimmen, benötigen wir 7 Knoten. Ausgehend von den 9 Knoten, die bisher fixiert sind, werden davon 7 geeignet ausgewählt, in anderen Worten, 2 der 9 Knoten sind geeignet zu streichen, allerdings nicht $a+\frac{2\,h}{27}$ und $a+\frac{5\,h}{12}$ zusammen, da wir sonst wieder bei unserer Formel $Q_{(7)}(f)$ anlangen. Es zeigt sich, daß die zu streichenden Stützstellen $a+\frac{2\,h}{27}$ und $a+\frac{h}{3}$ sind. Das nun zu lösende Gleichungssystem

$$\mathbf{M}\,\vec{A} = \vec{b}$$

mit der Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{h}{6} & \frac{5h}{12} & \frac{h}{2} & \frac{2h}{3} & \frac{5h}{6} & h \\ 0 & \frac{h^2}{72} & \frac{25h^2}{288} & \frac{h^2}{8} & \frac{2h^2}{9} & \frac{25h^2}{72} & \frac{h^2}{2} \\ 0 & \frac{h^3}{1296} & \frac{125h^3}{10368} & \frac{h^3}{48} & \frac{4h^3}{81} & \frac{125h^3}{1296} & \frac{h^3}{6} \\ 0 & \frac{h^4}{31104} & \frac{625h^4}{497664} & \frac{h^4}{384} & \frac{2h^4}{243} & \frac{625h^4}{31104} & \frac{h^4}{24} \\ 0 & \frac{h^5}{933120} & \frac{625h^5}{5971968} & \frac{h^5}{3840} & \frac{4h^5}{3645} & \frac{625h^5}{186624} & \frac{h^5}{120} \\ 0 & \frac{h^6}{33592320} & \frac{3125h^6}{429981696} & \frac{h^6}{46080} & \frac{4h^6}{32805} & \frac{3125h^6}{6718464} & \frac{h^6}{720} \end{pmatrix}$$

sowie den Vektoren

$$\vec{A}^t = (A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6)$$

und

$$\vec{b}^t = (h, \tfrac{h^2}{2}, \tfrac{h^3}{6}, \tfrac{h^4}{24}, \tfrac{h^5}{120}, \tfrac{h^6}{720}, \tfrac{h^7}{5040}),$$

liefert uns die Gewichte der Quadraturformel $Q_{(6)}(f)$, die sich schreibt als

$$Q_{(6)}(f) = h\left(\frac{127}{2625}f(a) + \frac{183}{700}f(a+\frac{h}{6}) + \frac{384}{6125}f(a+\frac{5\,h}{12}) + \frac{59}{210}f(a+\frac{h}{2}) + \frac{3}{70}f(a+\frac{2\,h}{3}) + \frac{891}{3500}f(a+\frac{5\,h}{6}) + \frac{361}{7350}f(a+h)\right),$$

Schrittweite $h = b - a$, mit dem Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|R| = \frac{h^8}{1828915200} \approx 5.47 \cdot 10^{-10} h^8.$$

Benutzt man jetzt wieder die für Quadraturformel übliche Darstellung

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \text{ mit } x_k = a + \alpha_k\, h,$$

so ergibt sich insgesamt das Formeltripel $Q_{(6)}(Q_{(7)})Q_{(8)}$ mit

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{127\,h}{2625}$	$\frac{41\,h}{840}$	$-\frac{109\,h}{21000}$
1	$a+\frac{2\,h}{27}$	0	0	$\frac{1162261467\,h}{4884740000}$
2	$a+\frac{h}{6}$	$\frac{183\,h}{700}$	$\frac{9\,h}{35}$	$-\frac{153\,h}{875}$
3	$a+\frac{h}{3}$	0	$\frac{9\,h}{280}$	$\frac{333\,h}{280}$
4	$a+\frac{5\,h}{12}$	$\frac{384\,h}{6125}$	0	$-\frac{55296\,h}{32375}$
5	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{59\,h}{210}$	$\frac{34\,h}{105}$	$\frac{610\,h}{483}$
6	$a+\frac{2h}{3}$	$\frac{3\,h}{70}$	$\frac{9\,h}{280}$	$-\frac{153\,h}{1120}$
7	$a+\frac{5h}{6}$	$\frac{891\,h}{3500}$	$\frac{9\,h}{35}$	$\frac{10359\,h}{35875}$
8	$a+h$	$\frac{361\,h}{7350}$	$\frac{41\,h}{840}$	$\frac{4801\,h}{105000}$

4.1.1.2 Ein Formeltripel vom Grad 5(6)7

An dieser Stelle wählen wir das Runge-Kutta-Formelpaar RK 6(7) nach Verner [52], welches gerade so konstruiert wurde, daß die Formeln dieses Formelpaares, hier vom Grad 5 bzw. vom Grad 6 im Quadraturfall nicht identisch zusammenfallen.

i	x_i	$\tilde{A}_i$	A_i
0	a	$\frac{7\,h}{90}$	$\frac{2881\,h}{40320}$
1	$a+\frac{h}{12}$	0	0
2	$a+\frac{h}{6}$	0	0
3	$a+\frac{h}{4}$	$\frac{16\,h}{45}$	$\frac{1216\,h}{2961}$
4	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{2\,h}{15}$	$-\frac{4\,h}{21}$
5	$a+\frac{2\,h}{3}$	0	$\frac{4131\,h}{3920}$
6	$a+\frac{3\,h}{4}$	$\frac{16\,h}{45}$	$-\frac{2624\,h}{4095}$
7	$a+\frac{16\,h}{17}$	0	$\frac{24137569\,h}{57482880}$
8	$a+h$	$\frac{7\,h}{90}$	$-\frac{157\,h}{1260}$

Ausgehend von diesem Formelpaar stellt man fest, daß Stützstellen, hier $a+\frac{h}{12}$ und $a+\frac{h}{6}$ im Quadraturfall nicht genutzt werden. Somit hat man auch hier die Möglichkeit, auf diese Stützstellen zurückzugreifen und eine Formel vom Grad 7 zu unserem Formelpaar vom Grad 5(6) hinzuzukonstruieren. Da zur Konstruktion einer Quadraturformel vom Grad 7 acht Knoten ausreichend sind, wählt man eine der beiden zur Verfügung stehenden Stützstellen aus, und zwar so, daß der Koeffizient des führenden Restgliedterms klein wird. Dies ist gerade im Falle des Knotens $a+\frac{h}{12}$ gegeben und man hat zur Bestimmung der Gewichte der Quadraturformel wiederum mittels Taylor-Abgleich das Gleichungssystem $\mathbf{M}\,\vec{A} = \vec{b}$ mit der Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{h}{12} & \frac{h}{4} & \frac{h}{2} & \frac{2h}{3} & \frac{3h}{4} & \frac{16h}{17} & h \\ 0 & \frac{h^2}{288} & \frac{h^2}{32} & \frac{h^2}{8} & \frac{2h^2}{9} & \frac{9h^2}{32} & \frac{128h^2}{289} & \frac{h^2}{2} \\ 0 & \frac{h^3}{10368} & \frac{h^3}{384} & \frac{h^3}{48} & \frac{4h^3}{81} & \frac{9h^3}{128} & \frac{2048h^3}{14739} & \frac{h^3}{6} \\ 0 & \frac{h^4}{497664} & \frac{h^4}{6144} & \frac{h^4}{384} & \frac{2h^4}{243} & \frac{27h^4}{2048} & \frac{8192h^4}{250563} & \frac{h^4}{24} \\ 0 & \frac{h^5}{29859840} & \frac{h^5}{122880} & \frac{h^5}{3840} & \frac{4h^5}{3645} & \frac{81h^5}{40960} & \frac{131072h^5}{21297855} & \frac{h^5}{120} \\ 0 & \frac{h^6}{2149908480} & \frac{h^6}{2949120} & \frac{h^6}{46080} & \frac{4h^6}{32805} & \frac{81h^6}{327680} & \frac{1048576h^6}{1086190605} & \frac{h^6}{720} \\ 0 & \frac{h^7}{180592312320} & \frac{h^7}{82575360} & \frac{h^7}{645120} & \frac{8h^7}{688905} & \frac{243h^7}{9175040} & \frac{16777216h^7}{129256681995} & \frac{h^7}{5040} \end{pmatrix}$$

sowie den Vektoren

$$\vec{A}^{\,t} = (A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6, A_7)$$

und

$$\vec{b}^t = (h, \frac{h^2}{2}, \frac{h^3}{6}, \frac{h^4}{24}, \frac{h^5}{120}, \frac{h^6}{720}, \frac{h^7}{5040}, \frac{h^8}{40320}),$$

zu lösen. Dies liefert uns schließlich die zu den vorgegebenen Knoten zugehörigen Gewichte

A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7
$-\frac{1021\,h}{43200}$	$\frac{60264\,h}{471675}$	$\frac{3104\,h}{14805}$	$\frac{148\,h}{525}$	$-\frac{243\,h}{5488}$	$\frac{1096\,h}{4095}$	$\frac{410338673\,h}{3353168000}$	$\frac{19\,h}{1980}$

sowie den Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|R| = \frac{11\,h^9}{331643289600} \approx 3.32 \cdot 10^{-11} h^9.$$

Insgesamt erhalten wir also das Formeltripel $Q_{(5)}(Q_{(6)})Q_{(7)}$ mit

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{7\,h}{90}$	$\frac{2881\,h}{40320}$	$\frac{1021\,h}{40320}$
1	$a+\frac{h}{12}$	0	0	$\frac{60264\,h}{471625}$
2	$a+\frac{h}{4}$	$\frac{16\,h}{45}$	$\frac{1216\,h}{2961}$	$\frac{3104\,h}{14805}$
3	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{2\,h}{15}$	$-\frac{4\,h}{21}$	$\frac{148\,h}{525}$
4	$a+\frac{2\,h}{3}$	0	$\frac{4131\,h}{3920}$	$-\frac{243\,h}{5488}$
5	$a+\frac{3\,h}{4}$	$\frac{16\,h}{45}$	$-\frac{2624\,h}{4095}$	$\frac{1096\,h}{4095}$
6	$a+\frac{16\,h}{17}$	0	$\frac{24137569\,h}{57482880}$	$\frac{410338673\,h}{3353168000}$
7	$a+h$	$\frac{7\,h}{90}$	$-\frac{157\,h}{1260}$	$\frac{19\,h}{1980}$

und den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^7}{1935360} \approx 5.16 \cdot 10^{-7} h^7,$$

$$|R| = \frac{31\,h^8}{690923520} \approx 4.49 \cdot 10^{-8} h^8,$$

$$|\hat{R}| = \frac{11\,h^9}{331643289600} \approx 3.32 \cdot 10^{-11} h^9.$$

4.1.1.3 Ein Formeltripel vom Grad 4(5)6

Wie schon beim Runge-Kutta-Formelpaar RK 7(8) sind auch die Formeln des Runge-Kutta-Formelpaares RK5(6) nach Fehlberg [26] im Quadraturfall identisch und man erhält die Quadraturformel

$$\begin{aligned} Q_{(5)}(f) = \quad & h\left(\frac{31}{384}f(a) + \frac{1125}{2816}f(a+\frac{4\,h}{15}) + \frac{9}{32}f(a+\frac{2\,h}{3}) + \right. \\ & \left. \frac{125}{768}f(a+\frac{4\,h}{5}) + \frac{5}{66}f(a+h)\right) \; . \end{aligned}$$

Wir werden wie im oben genannten Fall eine Formel höheren und niedrigeren Grades unter Verwendung noch nicht benutzter Stützstellen bzw. durch Streichen von Stützstellen konstruieren. Für die Quadraturformel vom Grad 6 verwenden wir den Knoten $a + \frac{h}{6}$ dem bisher das Gewicht 0 zugeordnet war, wobei zu beachten ist, daß 6 Knoten zur Konstruktion einer Formel 6.ten Grades nicht ausreichen, und wir einen Weiteren zusätzlich bestimmen müssen. Führt man dazu einen Taylorabgleich durch und verlangt, daß der Koeffizient des führenden Restgliedtermes möglichst klein wird, so bestimmt sich die zusätzliche Stützstelle zu $a + 0,5570175...\,h$, welche anschließend gerundet wird zu $a + \frac{5\,h}{9}$, um *einfache* Gewichte in der entstehenden Quadraturformel zu bekommen. Wiederum unter der Forderung, den Koeffizienten des führenden Restgliedes unter Beibehaltung der bisherigen Stützstellen möglichst klein zu halten, findet man, daß die Stützstelle $a + \frac{4\,h}{5}$ zur Bestimmung einer Quadraturformel vom Grad 4 zu streichen ist. Insgesamt ergibt sich das Formeltripel $Q_{(4)}(Q_{(5)})Q_{(6)}$ mit den nachfolgenden Stützstellen und Gewichten

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{h}{32}$	$\frac{31\,h}{384}$	$\frac{3373\,h}{67200}$
1	$a+\frac{h}{6}$	$\frac{4\,h}{15}$	0	$\frac{288\,h}{1225}$
2	$a+\frac{4\,h}{15}$	$\frac{125\,h}{1056}$	$\frac{1125\,h}{2816}$	$\frac{16875\,h}{256256}$
3	$a+\frac{5\,h}{9}$	0	0	$\frac{373977\,h}{700700}$
4	$a+\frac{2\,h}{3}$	$\frac{23\,h}{48}$	$\frac{9\,h}{32}$	$-\frac{369\,h}{1120}$
5	$a+\frac{4\,h}{5}$	0	$\frac{125\,h}{768}$	$\frac{23125\,h}{59136}$
6	$a+h$	$\frac{23\,h}{220}$	$\frac{5\,h}{66}$	$\frac{1237\,h}{23100}$

und den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{19\,h^6}{1944000} \approx 9.77 \cdot 10^{-6} h^6,$$

$$|R| = \frac{19\,h^7}{34020000} \approx 5.58 \cdot 10^{-7} h^7,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^8}{8573040000} \approx 1.17 \cdot 10^{-10} h^8.$$

4.1.1.4 Ein Formeltripel vom Grad 3(4)5

Ganz analog dem Vorherigem betrachten wir nun das Runge-Kutta-Formelpaar RK 4(5) nach Fehlberg [25]. Hier haben wir zu beachten, daß diese beiden Formeln im Quadraturfall nicht mehr identisch, sondern verschieden und vom Grad 3 und 4 sind. Zur Konstruktion verwendet Fehlberg sechs Stützstellen, von denen eine in beiden Formeln jeweils mit dem Gewicht Null versehen ist. Nutzt man alle vorgegebenen Stützstellen, so kann man wie üblich über einen Taylorabgleich eine Quadraturformel vom Grad 5 bestimmen und erhält somit ein Quadraturformeltripel vom Grad 3(4)5 mit den Stützstellen und Gewichten

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{25\,h}{216}$	$\frac{16\,h}{135}$	$\frac{11\,h}{180}$
1	$a+\frac{h}{4}$	0	0	$\frac{992\,h}{1575}$
2	$a+\frac{3\,h}{8}$	$\frac{1408\,h}{2565}$	$\frac{6656\,h}{12825}$	$-\frac{1024\,h}{1425}$
3	$a+\frac{h}{2}$	0	$\frac{2\,h}{55}$	$\frac{26\,h}{33}$
4	$a+\frac{12\,h}{13}$	$\frac{2197\,h}{4104}$	$\frac{28561\,h}{56430}$	$\frac{371293\,h}{1316700}$
5	$a+h$	$-\frac{h}{5}$	$-\frac{9\,h}{50}$	$-\frac{19\,h}{450}$

und den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^5}{49920} \approx 2 \cdot 10^{-5} h^5,$$

$$|R| = \frac{31\,h^6}{1497600} \approx 2.01 \cdot 10^{-5} h^6,$$

$$|\hat{R}| = \frac{59\,h^7}{251596800} \approx 2.34 \cdot 10^{-7} h^7.$$

4.1.1.5 Ein Formeltripel vom Grad 2(3)4

Ausgehend vom Runge-Kutta-Formelpaar RK 3(4) nach Fehlberg [25], welches wieder aus zwei im Quadraturfall verschiedene Formeln, hier vom Grad 2 und 3 besteht, die nicht alle fünf vorgegebenen Stützstellen nutzen, kann man unter Verwendung sämtlicher Knoten eine Quadraturformel vom Grad 4 und somit ein Quadraturformeltripel vom Grad 2(3)4 mit den Stützstellen und Gewichten

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{79\,h}{490}$	$\frac{229\,h}{1470}$	$\frac{629\,h}{5880}$
1	$a+\frac{2\,h}{7}$	0	0	$\frac{98441\,h}{385320}$
2	$a+\frac{7\,h}{15}$	$\frac{2175\,h}{3626}$	$\frac{1125\,h}{1813}$	$\frac{361125\,h}{1102304}$
3	$a+\frac{35\,h}{38}$	$\frac{2166\,h}{9065}$	$\frac{13718\,h}{81585}$	$\frac{2085136\,h}{4595955}$
4	$a+h$	0	$\frac{h}{18}$	$-\frac{23\,h}{160}$

und den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^4}{2565} \approx 3.89 \cdot 10^{-4} h^4,$$

$$|R| = \frac{41\,h^5}{164160} \approx 2.5 \cdot 10^{-4} h^5,$$

$$|\hat{R}| = \frac{233\,h^6}{14364000} \approx 1.62 \cdot 10^{-5} h^6$$

erzeugen.

4.1.1.6 Ein Formeltripel vom Grad 1(2)3

Analog zur Konstruktion der bisherigen Formeltripel verwenden wir das Runge-Kutta-Formelpaar RK 2(3) nach Fehlberg [25], nehmen die beiden im Quadraturfall unterschiedlichen Formeln vom Grad 1(2) und konstruieren unter Benutzung aller vorgegebenen Stützstellen eine weitere Formel vom Grad 3. Wir erhalten somit für das Quadraturformeltripel $Q_{(1)}(Q_{(2)})Q_{(3)}$ die Stützstellen und Gewichte

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{214\,h}{891}$	$\frac{229\,h}{1470}$	$\frac{13\,h}{162}$
1	$a+\frac{h}{4}$	$\frac{h}{33}$	0	$\frac{56\,h}{153}$
2	$a+\frac{27\,h}{40}$	$\frac{650\,h}{891}$	$\frac{8000\,h}{1053}$	$\frac{8000\,h}{17901}$
3	$a+h$	0	$-\frac{h}{78}$	$\frac{25\,h}{234}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^3}{2112} \approx 4.73 \cdot 10^{-4} h^3,$$

$$|R| = \frac{7\,h^4}{1440} \approx 4.86 \cdot 10^{-3} h^4,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^5}{23040} \approx 4.34 \cdot 10^{-5} h^5.$$

4.1.1.7 Ein Formeltripel vom Grad 0(1)3

Basis für dieses Formeltripel sind die Formeln des Runge-Kutta-Formelpaares RK 1(2) nach Fehlberg [25], welche Konstanten bzw. Polynome vom Grad 1 exakt integrieren. Zwar werden von dem Formelpaar alle Stützstellen verwendet, jedoch kann man bei 3 vorgegebenen Knoten eine Quadraturformel vom Grad mindestes gleich zwei konstruieren. Da die Stützstellen äquidistant gewählt wurden, ist die mittels Taylorabgleich zu bestimmende Quadraturformel eine geschlossene Newton-Cotes-Formel, nämlich die bekannte Simpsonregel (Keplersche Faßregel) vom Grad 3 (Siehe Satz 2). Die Stützstellen und Gewichte sind also gegeben durch

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{h}{256}$	$\frac{h}{512}$	$\frac{h}{6}$
1	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{255\,h}{256}$	$\frac{255\,h}{256}$	$\frac{4\,h}{6}$
2	$a+h$	0	$\frac{h}{512}$	$\frac{h}{6}$

wobei für die jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^2}{512} \approx 1.95 \cdot 10^{-3} h^2,$$

$$|R| = \frac{253\,h^3}{6144} \approx 4.12 \cdot 10^{-2} h^3,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^5}{2880} \approx 3.47 \cdot 10^{-4} h^5$$

gilt.

4.1.2 Quadraturformeltripel auf Basis von geschlossenen Newton-Cotes-Formeln

Als weitere Möglichkeit, Quadraturformeltripel zu konstruieren, erweist sich, geschlossene Newton-Cotes Quadraturformeln mit einer ungeraden Anzahl an Stützstellen als Basisformel auszuwählen. Eine ungerade Anzahl an Knoten, da nach Satz 2 der Grad einer Newton-Cotes Formel mit $2n+1$ Knoten gerade $(2n+1)$, für eine Newton-Cotes Formel mit $2n$ Knoten aber nur $(2n-1)$ ist, man bei einer ungeraden Anzahl an Stützstellen also einen Grad „geschenkt" bekommt. Mit der Forderung, daß bei Konstruktion von Formeln niedrigeren Grades die Intervallenden als Stützstellen erhalten bleiben, hat man durch die Wahl der geschlossenen Newton-Cotes-Formeln weiterhin den Vorteil, daß eine Funktionsauswertung einspart werden kann. Möglich wird dies dadurch, daß nach Abschluß eines Schrittes mit der Schrittweite h, der Funktionswert an der Stelle $a+h$ im nachfolgenden Schritt als Funktionswert des dann aktuellen Intervallanfangs nochmals verwendet werden kann. Ausgehend von einer geschlossenen Newton-Cotes-Formel werden wir wie schon bei der Konstruktion der Quadraturformeltripel auf Basis von Runge-Kutta-Formeln vorgeführt, durch sukzessives Streichen von Stützstellen Formeln niedrigeren Grades in die Basisformel einbetten. Unter Verwendung einer ungeraden Anzahl, d.h. von $2n+1$ Stützstellen, $n = 1, 2, \cdots$, werden die Quadraturformeln im Formeltripel vom Grad $(2n-2)(2n-1)(2n+1)$ sein.

4.1.2.1 Ein Formeltripel vom Grad 12(13)15

Auf Basis der geschlossenen Newton-Cotes-Formel vom Grad 15

$$\begin{aligned}
Q_{(15)}(f) = \quad & h\left(\frac{90241897}{5003856000}f(a) + \frac{44436679}{312741000}f(a+\frac{h}{14}) - \right.\\
& \frac{770720657}{5003856000}f(a+\frac{h}{7}) + \frac{109420087}{156370500}f(a+\frac{3\,h}{14}) - \\
& \frac{6625093363}{5003856000}f(a+\frac{2\,h}{7}) + \frac{789382601}{312741000}f(a+\frac{5\,h}{14}) - \\
& \frac{5600756791}{1667952000}f(a+\frac{3\,h}{7}) + \frac{101741867}{26061750}f(a+\frac{h}{2}) - \\
& \frac{5600756791}{1667952000}f(a+\frac{4\,h}{7}) + \frac{789382601}{312741000}f(a+\frac{9\,h}{14}) - \\
& \frac{6625093363}{5003856000}f(a+\frac{5\,h}{7}) + \frac{109420087}{156370500}f(a+\frac{11\,h}{14}) - \\
& \frac{770720657}{5003856000}f(a+\frac{6\,h}{7}) + \frac{44436679}{312741000}f(a+\frac{13\,h}{14}) + \\
& \left.\frac{90241897}{5003856000}f(a+h)\right)
\end{aligned}$$

konstruieren wir durch Streichen einer Stützstelle (d.h. durch Zuordnung des Gewichtes "0" zu dieser Stützstelle) unter der Forderung der Minimalität des Koeffizienten des führenden Restgliedterms eine Quadraturformel vom Grad 13, welche die gleichen Stützstellen wie die Basisformel benutzt, also in diese eingebettet ist. Legen wir nun die soeben konstruierte Formel zugrunde, so können wir durch Streichen eines weiteren Knotens, wiederum unter Beachtung der Minimalität des Koeffizienten des führenden Restgliedterms eine dritte Formel vom Grad 12, mit ebenfalls identischen Stützstellen erzeugen. Zur Konstruktion verwenden wir die Methode des Taylorabgleichs, d.h. wir haben bei vorgegebenen Stützstellen wieder ein lineares Gleichungssystem $\mathbf{M}\,\vec{A} = \vec{b}$ in den unbekannten Gewichten A_i zu lösen. Mit den oben vorgegeben Stützstellen berechnen sich die Gewichte als

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{756763247\,h}{39752856000}$	$\frac{190343047\,h}{9938214000}$	$\frac{90241897\,h}{5003856000}$
1	$a+\frac{h}{14}$	$\frac{169328677\,h}{1325095200}$	$\frac{3015653599\,h}{23851713600}$	$\frac{44436679\,h}{312741000}$
2	$a+\frac{h}{7}$	$-\frac{27202679\,h}{458686800}$	$-\frac{26640467\,h}{509652000}$	$-\frac{770720657\,h}{5003856000}$
3	$a+\frac{3\,h}{14}$	$\frac{119960393\,h}{382239000}$	$\frac{29838599\,h}{101930400}$	$\frac{109420087\,h}{156370500}$
4	$a+\frac{2\,h}{7}$	$-\frac{67661783\,h}{277992000}$	$-\frac{85361381\,h}{416988000}$	$-\frac{6625093363\,h}{5003856000}$
5	$a+\frac{5\,h}{14}$	$\frac{135181963\,h}{416988000}$	$\frac{79367113\,h}{277992000}$	$\frac{789382601\,h}{312741000}$
6	$a+\frac{3\,h}{7}$	0	0	$-\frac{5600756791\,h}{1667952000}$
7	$a+\frac{h}{2}$	0	$\frac{4608941\,h}{69498000}$	$\frac{101741867\,h}{26061750}$
8	$a+\frac{4\,h}{7}$	$\frac{32262587\,h}{277992000}$	0	$-\frac{5600756791\,h}{1667952000}$
9	$a+\frac{9\,h}{14}$	$\frac{23552263\,h}{138996000}$	$\frac{79367113\,h}{277992000}$	$\frac{789382601\,h}{312741000}$
10	$a+\frac{5\,h}{7}$	$-\frac{983311\,h}{7722000}$	$-\frac{85361381\,h}{416988000}$	$-\frac{6625093363\,h}{5003856000}$
11	$a+\frac{11\,h}{14}$	$\frac{59071201\,h}{229343400}$	$\frac{29838599\,h}{101930400}$	$\frac{109420087\,h}{156370500}$
12	$a+\frac{6\,h}{7}$	$-\frac{25516043\,h}{611582400}$	$-\frac{26640467\,h}{509652000}$	$-\frac{770720657\,h}{5003856000}$
13	$a+\frac{13\,h}{14}$	$\frac{2475404981\,h}{19876428000}$	$\frac{3015653599\,h}{23851713600}$	$\frac{44436679\,h}{312741000}$
14	$a+h$	$\frac{287819041\,h}{14907321000}$	$\frac{190343047\,h}{9938214000}$	$\frac{90241897\,h}{5003856000}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{10905911\, h^{14}}{113429879333263240687779840000} \approx 9.61 \cdot 10^{-23} h^{14},$$

$$|R| = \frac{16328737\, h^{15}}{162269635300686708867072000} \approx 1.01 \cdot 10^{-19} h^{15},$$

$$|\hat{R}| = \frac{4608941\, h^{17}}{13522469608390559072256000} \approx 3.41 \cdot 10^{-19} h^{17}.$$

4.1.2.2 Ein Formeltripel vom Grad 10(11)13

Ausgehend von der geschlossenen Newton-Cotes-Formel vom Grad 13 bestimmen wir wie oben beschrieben mittels Taylorabgleich je eine Quadraturformel 11-ten und 10-ten Grades. Zu den obigen vorgegebenen Stützstellen bestimmen sich die Gewichte zu

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{628981\,h}{26680500}$	$\frac{247021\,h}{10672200}$	$\frac{1364651\,h}{63063000}$
1	$a+\frac{h}{12}$	$\frac{79847\,h}{592900}$	$\frac{12358\,h}{88935}$	$\frac{12504\,h}{79625}$
2	$a+\frac{h}{6}$	$-\frac{821\,h}{404250}$	$-\frac{844\,h}{40425}$	$-\frac{105387\,h}{875875}$
3	$a+\frac{h}{4}$	$\frac{91151\,h}{485100}$	$\frac{28502\,h}{121275}$	$\frac{893128\,h}{1576575}$
4	$a+\frac{h}{3}$	0	$-\frac{7619\,h}{107800}$	$-\frac{1144251\,h}{1401400}$
5	$a+\frac{5\,h}{12}$	$\frac{18581\,h}{134750}$	$\frac{524\,h}{2695}$	$\frac{1215504\,h}{875875}$
6	$a+\frac{h}{2}$	0	0	$-\frac{552602\,h}{375375}$
7	$a+\frac{7\,h}{12}$	$\frac{33819\,h}{134750}$	$\frac{524\,h}{2695}$	$\frac{1215504\,h}{875875}$
8	$a+\frac{2\,h}{3}$	$-\frac{7619\,h}{53900}$	$-\frac{7619\,h}{107800}$	$-\frac{1144251\,h}{1401400}$
9	$a+\frac{3\,h}{4}$	$\frac{27373\,h}{97020}$	$\frac{28502\,h}{121275}$	$\frac{893128\,h}{1576575}$
10	$a+\frac{5\,h}{6}$	$-\frac{5353\,h}{134750}$	$-\frac{844\,h}{40425}$	$-\frac{105387\,h}{875875}$
11	$a+\frac{11\,h}{12}$	$\frac{36397\,h}{254100}$	$\frac{12358\,h}{88935}$	$\frac{12504\,h}{79625}$
12	$a+h$	$\frac{151531\,h}{6670125}$	$\frac{247021\,h}{10672200}$	$\frac{1364651\,h}{63063000}$

Die Koeffizienten der führenden Restgliedterme lauten

$$|\tilde{R}| = \frac{7619\,h^{12}}{6607944944713728000} \approx 1.15 \cdot 10^{-15} h^{12},$$

$$|R| = \frac{261301\,h^{13}}{1546259117063012352000} \approx 1.69 \cdot 10^{-16} h^{13},$$

$$|\hat{R}| = \frac{251\,h^{15}}{1124552085136736256000} \approx 2.23 \cdot 10^{-19} h^{15}.$$

4.1.2.3 Ein Formeltripel vom Grad 8(9)11

Als Basisformel legen wir die geschlossene Newton-Cotes-Formel vom Grad 11 zur Konstruktion weiterer Quadraturformeln vom Grad 9 bzw. 8 zugrunde. Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den durch die Basisformel vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte wie folgt

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{10859\,h}{381024}$	$\frac{167\,h}{5832}$	$\frac{16067\,h}{598752}$
1	$a+\frac{h}{10}$	$\frac{183125\,h}{1143072}$	$\frac{13025\,h}{81648}$	$\frac{26575\,h}{149688}$
2	$a+\frac{h}{5}$	0	0	$-\frac{16175\,h}{199584}$
3	$a+\frac{3\,h}{10}$	$\frac{7325\,h}{31752}$	$\frac{1625\,h}{6804}$	$\frac{5675\,h}{12474}$
4	$a+\frac{2\,h}{5}$	$-\frac{775\,h}{27216}$	$-\frac{775\,h}{13608}$	$-\frac{4825\,h}{11088}$
5	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{631\,h}{3024}$	$\frac{131\,h}{504}$	$\frac{17807\,h}{24948}$
6	$a+\frac{3\,h}{5}$	0	$-\frac{775\,h}{13608}$	$-\frac{4825\,h}{11088}$
7	$a+\frac{7\,h}{10}$	$\frac{18875\,h}{95256}$	$\frac{1625\,h}{6804}$	$\frac{5675\,h}{12474}$
8	$a+\frac{4\,h}{5}$	$\frac{775\,h}{42336}$	0	$-\frac{16175\,h}{199584}$
9	$a+\frac{9\,h}{10}$	$\frac{8425\,h}{54432}$	$\frac{13025\,h}{81648}$	$\frac{26575\,h}{149688}$
10	$a+h$	$\frac{4169\,h}{142884}$	$\frac{167\,h}{5832}$	$\frac{16067\,h}{598752}$

mit den jeweiligen Koeffizienten der führenden Restgliedterme

$$|\tilde{R}| = \frac{31\,h^{10}}{45722880000000} \approx 6.78 \cdot 10^{-13} h^{10},$$

$$|R| = \frac{647\,h^{11}}{3592512000000000} \approx 1.8 \cdot 10^{-13} h^{11},$$

$$|\hat{R}| = \frac{26927\,h^{13}}{65383718400000000000} \approx 4.12 \cdot 10^{-16} h^{13}.$$

4.1.2.4 Ein Formeltripel vom Grad 6(7)9

Ausgehend von der geschlossenen Newton-Cotes-Formel vom Grad 9 konstruieren wir weitere Quadraturformeln vom Grad 7 bzw. 6. Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte als

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{2311\,h}{66150}$	$\frac{53\,h}{1470}$	$\frac{989\,h}{28350}$
1	$a+\frac{h}{8}$	$\frac{2236\,h}{11025}$	$\frac{1312\,h}{6615}$	$\frac{2944\,h}{14175}$
2	$a+\frac{h}{4}$	0	0	$-\frac{464\,h}{14175}$
3	$a+\frac{3\,h}{8}$	$\frac{1292\,h}{4725}$	$\frac{32\,h}{105}$	$\frac{5248\,h}{14175}$
4	$a+\frac{h}{2}$	0	$-\frac{74\,h}{945}$	$-\frac{454\,h}{2835}$
5	$a+\frac{5\,h}{8}$	$\frac{332\,h}{1575}$	$\frac{32\,h}{105}$	$\frac{5248\,h}{14175}$
6	$a+\frac{3\,h}{4}$	$\frac{296\,h}{4725}$	0	$-\frac{464\,h}{14175}$
7	$a+\frac{7\,h}{8}$	$\frac{388\,h}{2205}$	$\frac{1312\,h}{6615}$	$\frac{2944\,h}{14175}$
8	$a+h$	$\frac{869\,h}{22050}$	$\frac{53\,h}{1470}$	$\frac{989\,h}{28350}$

wobei für den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{37\,h^8}{17340825600} \approx 2.13\cdot 10^{-9}h^8,$$

$$|R| = \frac{29\,h^9}{416179814400} \approx 6.97\cdot 10^{-11}h^9,$$

$$|\hat{R}| = \frac{37\,h^{11}}{62783697715200} \approx 5.89\cdot 10^{-13}h^{11}.$$

gilt.

4.1.2.5 Ein Formeltripel vom Grad 4(5)7

Auf Grundlage der geschlossenen Newton-Cotes-Formel vom Grad 7 konstruieren wir weitere Quadraturformeln vom Grad 5(4). Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte wie folgt

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{h}{60}$	$\frac{7\,h}{150}$	$\frac{41\,h}{840}$
1	$a+\frac{h}{6}$	$\frac{9\,h}{25}$	$\frac{27\,h}{100}$	$\frac{9\,h}{35}$
2	$a+\frac{h}{3}$	0	0	$\frac{9\,h}{280}$
3	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{h}{15}$	$\frac{11\,h}{30}$	$\frac{34\,h}{105}$
4	$a+\frac{2\,h}{3}$	$\frac{9\,h}{20}$	0	$\frac{9\,h}{280}$
5	$a+\frac{5\,h}{6}$	0	$\frac{27\,h}{100}$	$\frac{9\,h}{35}$
6	$a+h$	$\frac{8\,h}{75}$	$\frac{7\,h}{150}$	$\frac{41\,h}{840}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^6}{86400} \approx 1.16 \cdot 10^{-5} h^6,$$

$$|R| = \frac{h^7}{21772800} \approx 4.5 \cdot 10^{-8} h^7,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^9}{1567641600} \approx 6.38 \cdot 10^{-10} h^9.$$

4.1.2.6 Ein Formeltripel vom Grad 2(3)5

Hier legen wir nun die geschlossene Newton-Cotes-Formel vom Grad 5 zur Konstruktion weiterer Quadraturformeln vom Grad 3 bzw. 2 zugrunde. Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte wie folgt

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	$\frac{5\,h}{18}$	$\frac{h}{18}$	$\frac{7\,h}{90}$
1	$a+\frac{h}{4}$	0	$\frac{4\,h}{9}$	$\frac{16\,h}{45}$
2	$a+\frac{h}{2}$	0	0	$\frac{2\,h}{15}$
3	$a+\frac{3\,h}{4}$	$\frac{8\,h}{9}$	$\frac{4\,h}{9}$	$\frac{16\,h}{45}$
4	$a+h$	$-\frac{h}{6}$	$\frac{h}{18}$	$\frac{7\,h}{90}$

und die jeweiligen Koeffizienten der führenden Restgliedterme sind

$$|\tilde{R}| = \frac{h^4}{144} \approx 6.94 \cdot 10^{-3} h^4,$$

$$|R| = \frac{h^5}{11520} \approx 8.68 \cdot 10^{-5} h^5,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^7}{1935360} \approx 5.16 \cdot 10^{-7} h^7.$$

4.1.2.7 Ein Formeltripel vom Grad 0(1)3

Ausgehend von der Simpson-Regel (Keplersche Faßregel)

$$Q_{(3)}(f) = \quad h\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{2}{3}f(a+\frac{h}{2}) + \frac{1}{6}f(a+h)\right)$$

konstruieren wir weitere Quadraturformeln vom Grad 1 bzw. 0. Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm lauten die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	a	h	0	0
1	$a+\frac{h}{2}$	0	h	0
2	$a+h$	$\frac{h}{6}$	$\frac{2h}{3}$	$\frac{h}{6}$

mit den jeweiligen Koeffizienten der führenden Restgliedterme

$$|\tilde{R}| = \frac{h^2}{2},$$

$$|R| = \frac{h^3}{24} \approx 4.16 \cdot 10^{-2} h^3,$$

$$|\hat{R}| = \frac{h^5}{2880} \approx 3.47 \cdot 10^{-4} h^5.$$

4.1.3 Quadraturformeltripel auf Basis von offenen Newton-Cotes-Typ-Formeln

Eine weitere Möglichkeit, Quadraturformeltripel zu konstruieren, ist, als Basisformeln offene Newton-Cotes-Typ Quadraturformeln auszuwählen. Wir werden im Folgenden speziell die MacLaurin-Formeln mit einer ungeraden Anzahl an Stützstellen verwenden. Die Argumentation für eine ungerade Anzahl an Knoten läuft analog zu der bei den geschlossenen Newton-Cotes als Basisformeln. Durch die Wahl der MacLaurin-Formeln verliert man zwar den Vorteil, eine Funktionsauswertung am Intervallanfang einzusparen, vermeidet aber Probleme, die durch eine Anfangs- oder Endpunktsingularität auftreten können. Ausgehend von einer solchen offenen Formel werden wir analog zur bisherigen Konstruktionsstrategie durch sukzessives Streichen von Stützstellen Formeln niedrigeren Grades erzeugen. Unsere Quadraturformeln im Formeltripel werden dann analog zu den geschlossenen Newton-Cotes-Formeln unter Verwendung von $2n+1$ Stützstellen vom Grade $(2n-2)(2n-1)(2n+1)$ sein.

4.1.3.1 Ein Formeltripel vom Grad 12(13)15

Ausgehend von der MacLaurin-Formel vom Grad 15

$$\begin{aligned}Q_{(15)}(f) = \quad & h\left(\frac{22577434585}{235115905024}f(a+\frac{h}{30}) - \frac{146558704195}{1058021572608}f(a+\frac{h}{10})+\right.\\ & \frac{223958990659}{235115905024}f(a+\frac{h}{6}) - \frac{158615544415}{58778976256}f(a+\frac{7\,h}{30})+\\ & \frac{13869105594665}{2116043145216}f(a+\frac{3\,h}{10}) - \frac{1372294802885}{117557952512}f(a+\frac{11\,h}{30})+\\ & \frac{3932059852995}{235115905024}f(a+\frac{13\,h}{30}) - \frac{1642822255579}{88168464384}f(a+\frac{h}{2})+\\ & \frac{3932059852995}{235115905024}f(a+\frac{17\,h}{30}) - \frac{1372294802885}{117557952512}f(a+\frac{19\,h}{30})+\\ & \frac{13869105594665}{2116043145216}f(a+\frac{7\,h}{10}) - \frac{158615544415}{58778976256}f(a+\frac{23\,h}{30})+\\ & \frac{223958990659}{235115905024}f(a+\frac{5\,h}{6}) - \frac{146558704195}{1058021572608}f(a+\frac{9\,h}{10})+\\ & \left.\frac{22577434585}{235115905024}f(a+\frac{29\,h}{30})\right)\end{aligned}$$

konstruieren wir durch Streichen einer Stützstelle (d.h. durch Zuordnung des Gewichtes "0" zu dieser Stützstelle) unter der Forderung der Minimalität des Koeffizienten des führenden Restgliedterms eine Quadraturformel vom Grad 13, welche damit die gleichen Stützstellen wie die Formel vom Grad 15 benutzt. Legen wir im Folgenden die soeben konstruierte Formel zugrunde, so können wir durch weiteres Streichen eines Knotens, wiederum unter Beachtung der Minimalität des Koeffizienten des führenden Restgliedterms eine dritte Formel vom Grad 12 mit ebenfalls identischen Stützstellen erzeugen. Zur Konstruktion verwenden wir die Methode des Taylorabgleichs bzw. die Methode der Vergleichsfunktionen, d.h. wir haben jeweils ein lineares Gleichungssystem in den unbekannten Gewichten zu lösen. Bei obigen vorgegeben Stützstellen berechnen sich die Gewichte als

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{30}$	$\frac{1129913011891\,h}{12608090406912}$	$\frac{979083430547\,h}{10806934634496}$	$\frac{22577434585\,h}{235115905024}$
1	$a+\frac{h}{10}$	$-\frac{959949536405\,h}{18912135610368}$	$-\frac{591133681927\,h}{9456067805184}$	$-\frac{146558704195\,h}{1058021572608}$
2	$a+\frac{h}{6}$	$\frac{574379089783\,h}{1454779662336}$	$\frac{2668046071547\,h}{5819118649344}$	$\frac{223958990659\,h}{235115905024}$
3	$a+\frac{7\,h}{30}$	$-\frac{62864333923\,h}{121231638528}$	$-\frac{65674736063\,h}{90923728896}$	$-\frac{158615544415\,h}{58778976256}$
4	$a+\frac{3\,h}{10}$	$\frac{185009811977\,h}{264505393152}$	$\frac{592337451403\,h}{529010786304}$	$\frac{13869105594665\,h}{2116043145216}$
5	$a+\frac{11\,h}{30}$	$-\frac{32256237131\,h}{132252696576}$	$-\frac{53181089807\,h}{66126348288}$	$-\frac{1372294802885\,h}{117557952512}$
6	$a+\frac{13\,h}{30}$	0	$\frac{74105942483\,h}{176336928768}$	$\frac{3932059852995\,h}{235115905024}$
7	$a+\frac{h}{2}$	0	0	$-\frac{1642822255579\,h}{88168464384}$
8	$a+\frac{17\,h}{30}$	$\frac{74105942483\,h}{88168464384}$	$\frac{74105942483\,h}{176336928768}$	$\frac{3932059852995\,h}{235115905024}$
9	$a+\frac{19\,h}{30}$	$-\frac{60156040699\,h}{44084232192}$	$-\frac{53181089807\,h}{66126348288}$	$-\frac{1372294802885\,h}{117557952512}$
10	$a+\frac{7\,h}{10}$	$\frac{203663819713\,h}{132252696576}$	$\frac{592337451403\,h}{529010786304}$	$\frac{13869105594665\,h}{2116043145216}$
11	$a+\frac{23\,h}{30}$	$-\frac{336804886735\,h}{363694915584}$	$-\frac{65674736063\,h}{90923728896}$	$-\frac{158615544415\,h}{58778976256}$
12	$a+\frac{5\,h}{6}$	$\frac{506429297327\,h}{969853108224}$	$\frac{2668046071547\,h}{5819118649344}$	$\frac{223958990659\,h}{235115905024}$
13	$a+\frac{9\,h}{10}$	$-\frac{200655027329\,h}{2701733658624}$	$-\frac{591133681927\,h}{9456067805184}$	$-\frac{146558704195\,h}{1058021572608}$
14	$a+\frac{29\,h}{30}$	$\frac{865961244539\,h}{9456067805184}$	$\frac{979083430547\,h}{10806934634496}$	$\frac{22577434585\,h}{235115905024}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{74105942483\, h^{14}}{73613410114083840000000000000} \approx 1.01 \cdot 10^{-18} h^{14},$$

$$|R| = \frac{1642822255579\, h^{15}}{8833609213690060800000000000000} \approx 1.86 \cdot 10^{-19} h^{15},$$

$$|\hat{R}| = \frac{139537186433\, h^{17}}{720102409427681280000000000000000} \approx 1.94 \cdot 10^{-22} h^{17}.$$

4.1.3.2 Ein Formeltripel vom Grad 10(11)13

Auf Basis der MacLaurin-Formel vom Grad 13 konstruieren wir, wie üblich durch Streichen einer Stützstelle, wiederum unter der Forderung der Minimalität des Koeffizienten des führenden Restgliedterms, eine Quadraturformel vom Grad 11 und von dieser ausgehend ganz analog eine dritte Formel vom Grad 10 mit zur Basisformel identischen Stützstellen. Die zu den vorgegeben Stützstellen zugehörigen Gewichte sind

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{26}$	$\frac{1905495395777\,h}{18884159078400}$	$\frac{181308696049\,h}{1798491340800}$	$\frac{22169902131481\,h}{206009008128000}$
1	$a+\frac{3\,h}{26}$	$-\frac{15491286557\,h}{472103976960}$	$-\frac{1076450401\,h}{33721712640}$	$-\frac{1949826242741\,h}{17167417344000}$
2	$a+\frac{5\,h}{26}$	$\frac{146071511407\,h}{429185433600}$	$\frac{82567333069\,h}{245248819200}$	$\frac{26979393054211\,h}{34334834688000}$
3	$a+\frac{7\,h}{26}$	$-\frac{133948787737\,h}{429185433600}$	$-\frac{517621481\,h}{1703116800}$	$-\frac{18550541141639\,h}{10300450406400}$
4	$a+\frac{9\,h}{26}$	$\frac{228316053521\,h}{572247244800}$	$\frac{63729654781\,h}{163499212800}$	$\frac{5734798919473\,h}{1525992652800}$
5	$a+\frac{11\,h}{26}$	0	0	$-\frac{15419966424551\,h}{2861236224000}$
6	$a+\frac{h}{2}$	0	$\frac{140326981\,h}{8174960640}$	$\frac{15462064518851\,h}{2452488192000}$
7	$a+\frac{15\,h}{26}$	$\frac{140326981\,h}{4768727040}$	0	$-\frac{15419966424551\,h}{2861236224000}$
8	$a+\frac{17\,h}{26}$	$\frac{207267006371\,h}{572247244800}$	$\frac{63729654781\,h}{163499212800}$	$\frac{5734798919473\,h}{1525992652800}$
9	$a+\frac{19\,h}{26}$	$-\frac{61712132081\,h}{214592716800}$	$-\frac{517621481\,h}{1703116800}$	$-\frac{18550541141639\,h}{10300450406400}$
10	$a+\frac{21\,h}{26}$	$\frac{141861701977\,h}{429185433600}$	$\frac{82567333069\,h}{245248819200}$	$\frac{26979393054211\,h}{34334834688000}$
11	$a+\frac{23\,h}{26}$	$-\frac{28877668399\,h}{944207953920}$	$-\frac{1076450401\,h}{33721712640}$	$-\frac{1949826242741\,h}{17167417344000}$
12	$a+\frac{25\,h}{26}$	$\frac{271612226621\,h}{2697737011200}$	$\frac{181308696049\,h}{1798491340800}$	$\frac{22169902131481\,h}{206009008128000}$

und die jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms lauten

$$|\tilde{R}| = \frac{140326981\, h^{12}}{1128114732500091159183360} \approx 1.24 \cdot 10^{-16} h^{12},$$

$$|R| = \frac{91242404879\, h^{13}}{312401002846179090235392000} \approx 2.92 \cdot 10^{-16} h^{13},$$

$$|\hat{R}| = \frac{595091402839\, h^{15}}{1497480007097575551811977216000} \approx 3.97 \cdot 10^{-19} h^{15}.$$

4.1.3.3 Ein Formeltripel vom Grad 8(9)11

Hier legen wir nun die MacLaurin-Formel vom Grad 11 zur Konstruktion weiterer Quadraturformeln vom Grad 9 bzw. 8 zugrunde. Ganz analog dem Vorangegangenen bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte zu

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{22}$	$\frac{6716243627\,h}{58525286400}$	$\frac{1344790619\,h}{11705057280}$	$\frac{1372676393\,h}{11147673600}$
1	$a+\frac{3\,h}{22}$	0	$-\frac{1927367\,h}{1828915200}$	$-\frac{465490993\,h}{5573836800}$
2	$a+\frac{5\,h}{22}$	$\frac{565794613\,h}{2167603200}$	$\frac{191168027\,h}{722534400}$	$\frac{2362001191\,h}{3715891200}$
3	$a+\frac{7\,h}{22}$	$-\frac{60465673\,h}{609638400}$	$-\frac{64320407\,h}{609638400}$	$-\frac{508623137\,h}{464486400}$
4	$a+\frac{9\,h}{22}$	$\frac{102910453\,h}{464486400}$	$\frac{316440827\,h}{1393459200}$	$\frac{404360099\,h}{206438400}$
5	$a+\frac{h}{2}$	0	0	$-\frac{1930391873\,h}{928972800}$
6	$a+\frac{13\,h}{22}$	$\frac{9261437\,h}{39813120}$	$\frac{316440827\,h}{1393459200}$	$\frac{404360099\,h}{206438400}$
7	$a+\frac{15\,h}{22}$	$-\frac{22725047\,h}{203212800}$	$-\frac{64320407\,h}{609638400}$	$-\frac{508623137\,h}{464486400}$
8	$a+\frac{17\,h}{22}$	$\frac{11861501\,h}{44236800}$	$\frac{191168027\,h}{722534400}$	$\frac{2362001191\,h}{3715891200}$
9	$a+\frac{19\,h}{22}$	$-\frac{1927367\,h}{914457600}$	small $-\frac{1927367\,h}{1828915200}$	$-\frac{465490993\,h}{5573836800}$
10	$a+\frac{21\,h}{22}$	$\frac{747862507\,h}{6502809600}$	$\frac{1344790619\,h}{11705057280}$	$\frac{1372676393\,h}{11147673600}$

Die Koeffizienten der führenden Restgliedterme lauten:

$$|\tilde{R}| = \frac{1927367\,h^{10}}{1724994549149921280 0} \approx 1.12 \cdot 10^{-13} h^{10},$$

$$|R| = \frac{1930391873\,h^{11}}{6071980813007722905600} \approx 3.18 \cdot 10^{-13} h^{11},$$

$$|\hat{R}| = \frac{43923779533\,h^{13}}{6946346050080835004006400 0} \approx 6.32 \cdot 10^{-16} h^{13}.$$

4.1.3.4 Ein Formeltripel vom Grad 6(7)9

Zur Konstruktion des Quadraturformeltripels vom Grad 6(7)9 benutzen wir die MacLaurin-Formel vom Grad 9 als Basisformel. Wie üblich, durch Streichen von Stützstellen und unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte der Formeln niedrigeren Grades zu

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{18}$	$\frac{282057\,h}{2007040}$	$\frac{39981\,h}{286720}$	$\frac{832221\,h}{5734400}$
1	$a+\frac{h}{6}$	0	0	$-\frac{32601\,h}{716800}$
2	$a+\frac{5\,h}{18}$	$\frac{22689\,h}{71680}$	$\frac{24879\,h}{71680}$	$\frac{725787\,h}{1433600}$
3	$a+\frac{7\,h}{18}$	$-\frac{219\,h}{1792}$	$-\frac{219\,h}{896}$	$-\frac{403407\,h}{716800}$
4	$a+\frac{h}{2}$	$\frac{41093\,h}{143360}$	$\frac{73943\,h}{143360}$	$\frac{523979\,h}{573440}$
5	$a+\frac{11\,h}{18}$	0	$-\frac{219\,h}{896}$	$-\frac{403407\,h}{716800}$
6	$a+\frac{13\,h}{18}$	$\frac{13929\,h}{71680}$	$\frac{24879\,h}{71680}$	$\frac{725787\,h}{1433600}$
7	$a+\frac{5\,h}{6}$	$\frac{657\,h}{12544}$	0	$-\frac{32601\,h}{716800}$
8	$a+\frac{17\,h}{18}$	$\frac{37791\,h}{286720}$	$\frac{39981\,h}{287620}$	$\frac{832221\,h}{5734400}$

Die jeweiligen Koeffizienten der führenden Restgliedterme sind:

$$|\tilde{R}| = \frac{73\,h^8}{39998375424} \approx 1.83 \cdot 10^{-9} h^8,$$

$$|R| = \frac{10867\,h^9}{82282372300800} \approx 1.32 \cdot 10^{-10} h^9,$$

$$|\hat{R}| = \frac{441827\,h^{11}}{586508749760102400} \approx 7.53 \cdot 10^{-13} h^{11}.$$

4.1.3.5 Ein Formeltripel vom Grad 4(5)7

Ausgehend von der MacLaurin-Formel vom Grad 7 als Basisformel, konstruieren wir analog Vorherigem weitere Quadraturformeln vom Grad 4(5). Die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte lauten

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{14}$	$\frac{10663\,h}{57600}$	$\frac{6223\,h}{34560}$	$\frac{4949\,h}{27648}$
1	$a+\frac{3\,h}{14}$	0	0	$-\frac{49\,h}{7680}$
2	$a+\frac{5\,h}{14}$	$\frac{3977\,h}{11520}$	$\frac{539\,h}{1280}$	$\frac{6223\,h}{15360}$
3	$a+\frac{h}{2}$	0	$-\frac{437\,h}{2160}$	$-\frac{6257\,h}{34560}$
4	$a+\frac{9\,h}{14}$	$\frac{743\,h}{3840}$	$\frac{539\,h}{1280}$	$\frac{6223\,h}{15360}$
5	$a+\frac{11\,h}{14}$	$\frac{437\,h}{3600}$	0	$\frac{49\,h}{7680}$
6	$a+\frac{13\,h}{14}$	$\frac{1783\,h}{11520}$	$\frac{6223\,h}{34560}$	$\frac{4949\,h}{27648}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{437\,h^6}{242020800} \approx 1.81 \cdot 10^{-6} h^6,$$

$$|R| = \frac{h^7}{110638080} \approx 9.04 \cdot 10^{-9} h^7,$$

$$|\hat{R}| = \frac{35069\,h^9}{54646360473600} \approx 56.42 \cdot 10^{-10} h^9.$$

4.1.3.6 Ein Formeltripel vom Grad 2(3)5

Aufbauend auf der MacLaurin-Formel vom Grad 5 als Basisformel, konstruieren wir Quadraturformeln vom Grad 2(3), wie bekannt, durch Streichen von durch die Basisformel vorgegebenen Stützstellen. Wie üblich fordert man einen minimalen Koeffizienten des führenden Restgliedterms und erhält mittels Taylorabgleich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{10}$	$\frac{49\,h}{144}$	$\frac{25\,h}{96}$	$\frac{275\,h}{1152}$
1	$a+\frac{3\,h}{10}$	0	0	$\frac{25\,h}{288}$
2	$a+\frac{h}{2}$	0	$\frac{23\,h}{48}$	$\frac{67\,h}{192}$
3	$a+\frac{7\,h}{10}$	$\frac{23\,h}{36}$	0	$\frac{25\,h}{288}$
4	$a+\frac{9\,h}{10}$	$\frac{h}{48}$	$\frac{25\,h}{96}$	$\frac{275\,h}{1152}$

mit den jeweiligen Koeffizienten der führenden Restgliedterme

$$|\tilde{R}| = \frac{23\,h^4}{9000} \approx 2.56\cdot 10^{-3}h^4,$$

$$|R| = \frac{h^5}{28800} \approx 3.47\cdot 10^{-5}h^5,$$

$$|\hat{R}| = \frac{223\,h^7}{604800000} \approx 3.68\cdot 10^{-7}h^7.$$

4.1.3.7 Ein Formeltripel vom Grad 0(1)3

Hier legen wir nun die MacLaurin-Formel vom Grad 3

$$Q_{(3)}(f) = \quad h\left(\frac{3}{8}f(a+\frac{h}{6}) + \frac{1}{4}f(a+\frac{h}{2}) + \frac{3}{8}f(a+\frac{5\,h}{6})\right)$$

zur Konstruktion weiterer Quadraturformeln vom Grad 0 bzw. 1 zugrunde. Unter der Forderung nach einem minimalen Koeffizienten im führenden Restgliedterm bestimmen sich die zu den vorgegebenen Stützstellen zugehörigen Gewichte folgendermaßen

k	x_k	$\tilde{A}_k$	A_k	$\hat{A}_k$
0	$a+\frac{h}{6}$	0	$\frac{h}{2}$	$\frac{3\,h}{8}$
1	$a+\frac{h}{2}$	0	0	$\frac{h}{4}$
2	$a+\frac{5\,h}{6}$	h	$\frac{h}{2}$	$\frac{3\,h}{8}$

mit den jeweiligen Koeffizienten des führenden Restgliedterms

$$|\tilde{R}| = \frac{h^2}{3},$$

$$|R| = \frac{h^3}{72} \approx 1.38 \cdot 10^{-2} h^3,$$

$$|\hat{R}| = \frac{7\,h^5}{51840} \approx 1.35 \cdot 10^{-4} h^5.$$

4.2 Schrittweiten- und Ordnungssteuerung

Die in 4.1 konstruierten Quadraturformeltripel haben gegenüber den Formelpaaren bei der adaptiven Quadratur den schon genannten Vorteil, daß nicht nur eine Variation der Schrittweite, sondern auch der Ordnung möglich ist. Dazu wird man das Tripel der Ordnung $p_1(p_2)p_3$ als zwei separate Formelpaare der Ordnungen $p_1(p_2)$ und $p_2(p_3)$ betrachten, wobei nach dem Prinzip von Dormand/Prince [12] [13], die Formel höherer Ordnung maßgeblich für die Rechnung und das Ergebnis ist.

4.2.1 Schrittweitensteuerung

Die übliche Vorgehensweise zur Schrittweitensteuerung in der Quadratur ist, einen Schritt mit der Länge h mittels eines Formelpaares zu berechnen und den Fehler als Differenz der beiden erhaltenen Näherungen zu betrachten. Bleibt dieser Fehler unter der vorgegebenen Schranke, so fährt man fort mit der Schrittweite h, bzw. mit der doppelten Schrittweite $2h$, falls der Fehler wesentlich kleiner als die geforderte Genauigkeit ist. Anderenfalls wird der ausgeführte Schritt verworfen und mit halbierter Schrittweite $\frac{h}{2}$ wiederholt. Damit wird natürlich keine Rücksicht auf die Aufgabenstellung genommen und die neue Schrittweite unabhängig vom vorliegenden Problem bestimmt. Adäquater ist es, problembezogen vorzugehen. Wir verwenden im Folgenden das Quadraturformeltripel der Ordnung $p_1(p_2)p_3$ und rechnen oBdA mit dem Formelpaar der Ordnung $p_1(p_2)$, $p_1 < p_2 = p$. D.h. maßgebliche Formel im aktuellen Formelpaar ist die Formel der Ordnung $p_2 = p$. Sei bei Integration über das aktuelle Teilintervall I_1 die Näherung für den Integralwert unter Verwendung der Quadraturformel der Ordnung p_1, I_2 die Näherung für den Integralwert unter Verwendung der Quadraturformel von der Ordnung p_2. Dann berechnet sich der lokale Fehler *err*, wie in Kap. 3 angedeutet als $err = |I_2 - I_1|$. Desweiteren sei *tol* die vom Benutzer geforderte Genauigkeit. Vergleicht man nun den gemachten Fehler *err* mit der geforderten Genauigkeit *tol*, so kann man in Anlehnung an Hairer oder Deuflhard, wie schon seit langem üblich, eine optimale Schrittweite wie folgt berechnen:

$$h_{n+1} = h_n \left(\frac{tol}{err} \right)^{\frac{1}{p}}$$

(Vgl. Hairer [33], S. 168, Deuflhard [9], S. 333). Um eine *gute* Schrittweitensteuerung zu erhalten, muß man diese Formel allerdings noch modifizieren. Man multipliziert die rechte Seite der Formel mit einem Sicherheitsfaktor, z.B. $fac = 0.8,\ 0.9,\ (0.25)^{\frac{1}{p}}$ oder $(0.38)^{\frac{1}{p}}$ (Vgl. Hairer [33],

S. 168), damit der Fehler im nächsten Schritt mit hoher Wahrscheinlichkeit akzeptabel bleibt. Weiterhin muß verhindert werden, daß die Schrittweite zu stark ansteigt bzw. abfällt. Dazu führt man zwei weitere Sicherheitsfaktoren *facmax* und *facmin* ein, um die Schrittweite nach oben, bzw. nach unten zu begrenzen. Eine übliche Wahl für *facmax* ist zum Beispiel $1.5 \leq facmax \leq 5$ (Vgl. Hairer [33], S. 168). Damit berechnet sich die neue Schrittweite schließlich als

$$h_{neu} = h_{alt}\ min\left(facmax,\ max\left(facmin,\ fac\left(\frac{tol}{err}\right)^{\frac{1}{p}}\right)\right).$$

Es hat sich dabei als numerisch günstig erwiesen, $fac = 0.8$, $facmax = 5.0$ und $facmin = 0.1$ zu wählen. Weiterhin ist zu beachten, daß die Integration nicht über das Intervallende hinaus fortgeführt wird. Angenommen, man ist bei der Berechnung der Näherung des Integrals $I = \int_a^b f(x)\,dx$ nach n erfolgreichen Schritten am Punkt $a_{end} = a + \sum_{i=1}^{n} h_i$, h_i ist Schrittweite im Schritt i, angelangt und mit der für den nächsten Schritt berechneten Schrittweite h_{n+1} gilt $a_{end} + h_{n+1} = a + \sum_{i=1}^{n+1} h_i > b$, so setzt man für diesen letzten Schritt $h_{n+1} = h_{end} = b - a_{end}$. D.h. die Abschlußschrittweite h_{end} bestimmt sich als Differenz zwischen dem Integrationsintervallende und dem Endpunkt des letzten verwendeten Teilintervalls.

4.2.2 Ordnungssteuerung

Neben der Schrittweitensteuerung wollen wir nun zusätzlich eine Ordnungssteuerung etablieren, dabei wird sich unser Vorgehen hauptsächlich an Deuflhard [9] bzw. Hairer [33] orientieren. Zur Auswahl einer optimalen Ordnung benötigen wir ein Maß für die zu leistende Arbeit. Die Arbeit, die im k-ten Schritt geleistet werden muß, ist im wesentlichen die Berechnung der in den Quadraturformeln benötigten n_k Funktionswerte an den vorgegebenen Stützstellen. Allerdings kann eine große Anzahl an Funktionsauswertungen durch eine entsprechend große Schrittweite kompensiert werden. Daher verwenden wir nach dem Vorbild von Hairer bzw. Deuflhard als Maß für die Arbeit

$$W_k = \frac{n_k}{h_k}$$

mit n_k = Anzahl der Funktionsauswertungen und h_k = Schrittweite im Schritt Nummer k (Vgl. Deuflhard [9], S.334, Hairer [33], S.233).

Ist nun p die Ordnung der maßgeblichen Formel des aktuellen Formelpaares im k-ten Schritt, so bestimmt sich die Ordnung für den nachfolgenden Schritt folgendermaßen:

$$p_{neu} = \begin{cases} p^- & falls \quad W_{k-1} < 0.9 \cdot W_k \\ p^+ & falls \quad W_k < 0.9 \cdot W_{k-1} \\ p & sonst \end{cases}$$

mit den angepaßten zugehörigen Schrittweiten

$$h = \begin{cases} h_{neu} & falls \quad p_{neu} \leq p \\ max\left\{1.5 \cdot h_{alt}\left(\frac{n_{k+1}}{n_k}\right), h_{neu}\right\} & falls \quad p_{neu} = p^+. \end{cases}$$

und p^-, p^+ ist die Ordnung der maßgeblichen Formel des nächstniedrigeren bzw. nächsthöheren Formelpaares im Formeltripel. (Vgl. Hairer [33], S.233) Da man aber im Formeltripel die Ordnung jeweils nur einmal erhöhen bzw. erniedrigen, also nur sehr eingeschränkt variieren kann, ist vorgesehen, daß man im Programmablauf nach vorhergehender Prüfung (man verlangt z.B. mehrmaliges aufeinanderfolgendes Fordern nach Ordnungserhöhung bzw. Ordnungserniedrigung) auch das Formeltripel wechseln kann. Bei den numerischen Tests hat es sich als günstig herausgestellt, daß man nach dreimaliger Forderung nach Ordnungserhöhung zum Tripel der nächsthöheren Ordnung aufsteigt (Ordungserniedrigung analog). Damit steht dann das gesamte Spektrum der möglichen Ordnungen zur Verfügung. Das Starttripel wird dabei in Abhängigkeit von der vom Benutzer geforderten Genauigkeit tol bestimmt. Ist die geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-\alpha}$, so wählt man als Starttripel dasjenige, welches als mittlere bzw. untere Formel die Quadraturformel der Ordnung α enthält.

4.3 Die Quadraturroutinen QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN

QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN sind global adaptive Quadraturroutinen auf der Basis von Quadraturtripeln. Die Routinen starten mit einem Quadraturformelpaar der Ordnung $p_1(p_2)$ aus dem, bedingt durch die Genauigkeitsforderung, geeignet vorgegebenen Quadraturformeltripel der Ordnung $p_1(p_2)p_3$. Ebenfalls vorgegebene ist die Startschrittweite h_0, (Voreinstellung $h_0 = \frac{(b-a)}{10}$). Auf jedem sodann durch die aktuelle Schrittweite vorgegebenen Teilintervall wird das im vorhergehenden Schritt bestimmte

Formelpaar der Ordnung $p_1(p_2)$ bzw. $p_2(p_3)$ des aktuellen Formeltripels verwendet. Wird die vorgegebene Genauigkeit nicht erreicht, so wird der Schritt verworfen und mit neu berechneter Schrittweite wiederholt. Verwendet man das Formelpaar der Ordnung $p_2(p_3)$ und wird während des Programmablaufs eine Ordnungserhöhung gefordert, so steigt man wie vorher beschrieben zum nächsthöheren Formeltripel auf (Abstieg zum nächstniedrigeren Formeltripel analog). Um ein Überschreiten des Integrationsintervalls zu verhindern, bestimmt sich die Abschlußschrittweite h_{end}, wie beschrieben, als Differenz zwischen dem Integrationsintervallende und dem Endpunkt des letzten verwendeten Teilintervalls. Somit werden also sowohl Schrittweite als auch Ordnung dem vorliegenden Problem angepaßt.

Die Routinen sind im einzelnen:

QUADTRIP
Global adaptive Quadraturroutine auf Basis von Quadraturformeltripeln, aufbauend auf Runge-Kutta-Formelpaaren. (Vgl. 4.1.1.1 - 4.1.1.7)

NCTRIP
Global adaptive Quadraturroutine auf Basis von Quadraturtripeln, aufbauend auf geschlossenen Newton-Cotes-Formeln. (Vgl. 4.1.2.1 - 4.1.2.7)

NCOPEN
Global adaptive Quadraturroutine auf Basis von Quadraturtripeln, aufbauend auf offenen Newton-Cotes-Typ-Formeln. (Vgl. 4.1.3.1 - 4.1.3.7)

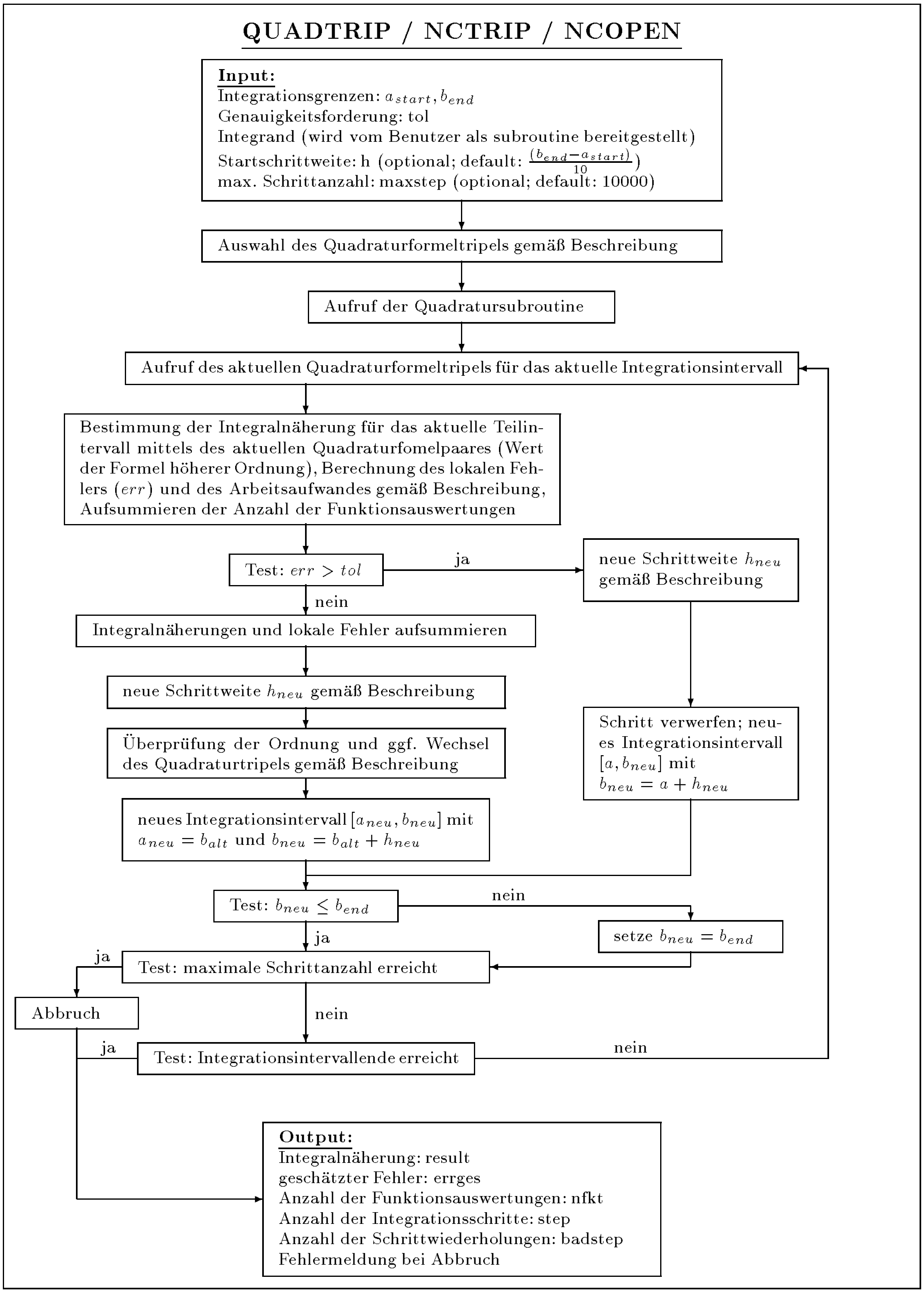

Abbildung 4.1: Die Quadraturroutinen QUADTRIP / NCTRIP / NCOPEN

Kapitel 5

Numerische Auswertung

Mit Hilfe einiger Testbeispiele werden die in dieser Arbeit hergeleiteten Quadraturroutinen auf der Basis von Quadraturformeltripeln mit in Softwarebibliotheken enthaltenen, bewährten Verfahren verglichen. Die Vergleichsverfahren stammen dabei aus der am Hochschulrechenzentrum der Justus-Liebig-Universität Giessen (JLU Giessen) installierten NAG-Programmbibliothek (The **N**umerical **A**lgorithms **G**roup Limited, Mark 16), sowie aus der Numerik-Bibliothek des Lehrstuhls für Numerische und Instrumentelle Mathematik der JLU-Giessen. Die Programme sind sämtlich in FORTRAN77, in DOUBLE PRECISION, geschrieben und auf dem Compute-Server „Justus" (Firma SGI, Typ: Power Challenge) getestet worden. Die zugehörigen Programmlisten stehen am Lehrstuhl für Numerische und Instrumentelle Mathematik der JLU Giessen, Heinrich-Buff-Ring 44, 35394 Giessen zur Verfügung.

5.1 Vergleichsroutinen aus der NAG-Library und der Numerik-Bibliothek des Lehrstuhls für Numerische und Instrumentelle Mathematik der Justus-Liebig-Universität Giessen

5.1.1 NAG-Routinen

D01AHF
Global automatisches Quadraturverfahren nach Patterson [42] mit nachgeschalteter Intervallhalbierung. Es werden optimal erweiterte Quadraturformeln mit nachfolgender Anzahl an Stützstellen und zugeordnetem Grad verwendet.

Anzahl der Stützstellen	3	7	15	31	63	127	255
zugehöriger Grad	5	11	23	47	95	191	383

Die Integration geht wie geschildert über das Gesamtintervall; sind alle Formeln ausgeschöpft, d.h. ist der maximale Grad erreicht ohne die geforderte Genauigkeit erreicht zu haben, so wird eine Intervallunterteilung durchgeführt und die Integration auf jedem dieser Teilintervalle wiederholt, zusätzlich wird während der Rechnung geprüft, ob beim Übergang zur Formel nächsthöheren Grades Konvergenz zu erwarten ist und in Abhängigkeit davon eine Intervallunterteilung evtl. schon vor Erreichen der Formel maximalen Grades durchgeführt, usw.
(Vgl. Piessens u.a. [46], NAG Introductory Guide [57])

D01ARF
Global automatisches Quadraturverfahren nach Patterson [42]. Es werden optimal erweiterte Quadraturformeln mit nachfolgender Anzahl an Stützstellen und zugeordnetem Grad verwendet.

Anzahl der Stützstellen	3	7	15	31	63	127	255	511
zugehöriger Grad	5	11	23	47	95	191	383	767

Sind alle Formeln ausgeschöpft, d.h. ist den maximalen Grad erreicht ohne die geforderte Genauigkeit erreicht zu haben, so bricht das Verfahren ab.
(Vgl. Piessens u.a. [46], NAG Introductory Guide [57])

D01AJF
Adaptives Quadraturverfahren nach Kronrod. Man verwendet das Gauß-Kronrod 10/21-Punkt Quadraturformelpaar. Ist die geforderte Genauigkeit nach Integration über das Gesamtintervall noch nicht erreicht, so wird eine Intervallhalbierung durchgeführt, das Formelpaar auf jedem Teilintervall erneut angewandt. Eine weitere Unterteilung erfolgt dann nur noch auf denjenigen Teilintervallen, auf denen die geforderte Genauigkeit noch nicht erreicht wurde.
(Vgl. Piessens u.a. [46], NAG Introductory Guide [57])

D01AKF
Wie D01AJF, allerdings verwendet man hier das Gauß-Kronrod 30/61-Punkt Quadraturformelpaar.
(Vgl. Piessens u.a. [46], NAG Introductory Guide [57])

5.1.2 Routinen der Numerik-Bibliothek des Lehrstuhls für Numerische und Instrumentelle Mathematik

ROMBRG
Klassische Richardson-Romberg Quadratur.
(Vgl. Davis/Rabinowitz [8], Engels [16], Stroud [51])

TRAPEX
Global adaptives Quadraturverfahren nach Deuflhard [9], [10]. Richardson-Romberg Quadratur mit Schrittweiten und Ordnungssteuerung. Auf jedem durch die aktuelle Schrittweite vorgegebenen Teilintervall wird unter Verwendung der Bulirsch-Folge nach Richardson-Romberg extrapoliert.

5.2 Auswertung mit Hilfe von Testbeispielen

Da die entwickelten Quadraturroutinen den Anspruch auf Allgemeingültigkeit erheben, muß die Auswahl der Testfunktionen so gestaltet werden, daß ein möglichst breites Spektrum an Eigenschaftstypen abdeckt wird; auch ist es zweckmäßig, Integrale zu berechnen, deren exakter Wert bekannt ist, um später die Qualität der Näherungen einschätzen zu können. Da in der Vergangenheit schon viele Autoren entsprechende Tests durchgeführt haben (Vgl. Berntsen [3], Deuflhard [10], Favati [23], Piessens [46], Robinson [48]), können wir auf den so entstandenen Fundus von Testfunktionen zurückgreifen. Die ausgewählten Integranden kann man wie folgt beschreiben:

a) glatte Funktionen.

b) Funktionen die entweder selbst, oder deren Ableitungen unstetig im Integrationsintervall sind.

c) stark oszillierende Funktionen.

d) Funktionen mit einem oder mehreren scharfen peaks bzw. einer Singularität im Integrationsintervall.

Es ist an dieser Stelle anzumerken, daß es gerade die schwierigen Integranden b), c) und d) sind, die häufig z.B. in der Physik auftreten. So tauchen unstetige Integranden beispielsweise auf, wenn man ein physikalisch-technisches System in verschiedenen Bereichen mit unterschiedlichen Modellen beschreibt, die an den Nahtstellen nicht ganz zusammenpassen. Bei Peakfunktionen/Nadelimpulsen denke man z.B. an das Spektrum eines Sterns, dessen Gesamtstrahlung berechnet werden soll.
Um nun die einzelnen Routinen möglichst zuverlässig beurteilen zu können, sind Testreihen erstellt worden, die nachfolgend in Form von Tabellen dargestellt werden. Angegeben werden bei jedem Beispiel der Integrand und ein auf 15 Nachkommastellen exakter Wert des Integrals im gegebenen Integrationsintervall $[a, b]$. Die Tabellen enthalten jeweils die zu einem bestimmten Verfahren zugehörige Anzahl an Funktionsauswertungen (f-Werte) sowie die berechnete Näherung des Integralwertes (I) zu verschiedenen vorgegebenen Genauigkeitsforderungen (tol). Die mit dem exakten Integralwert übereinstimmenden Ziffern sind dabei durch Unterstreichung hervorgehoben. Auf eine Betrachtung der Rechenzeit wurde verzichtet, da sie zu sehr von der zugrundeliegenden Programmiertechnik, der verwendeten Rechenanlage sowie deren Auslastung zum Zeitpunkt der Berechnung abhängt. Ein Anzeichen, wie schnell oder langsam eine Routine ist, kann man sicherlich aus der

Anzahl, der von ihr benötigten Funktionsauswertungen, ableiten. Von den Quadraturroutinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN erwarten wir, daß sie, um ihrem general-purpose-Anspruch gerecht zu werden, für jeden Typ von Testfunktion die geforderte Genauigkeit erreichen. Desweiteren sollten sie für jede einzelne Testfunktion nur entsprechend viele Funktionsberechnungen verwenden wie die Vergleichsroutinen der NAG-Library bzw. der Numeik-Bibliothek, im Allgemeinen aber eine Verminderung der Anzahl der Funktionsauswertungen verwirklichen.

Bemerkung:

1) Für alle nachfolgenden Testbeispiele gilt bzgl. der Routinen QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN:
   Startschrittweite: $h_0 = 0.1$.
   Maximale Anzahl an Integrationsschritten: 1000 .

2) Bei der Quadraturroutine QUADTRIP ist das Tripel mit dem höchsten Grad vom Grad 6(7)8. Wird bei hoher Genauigkeitsforderung (tol) mit großer Schrittweite gerechnet, so ist zu erwarten, daß die Anzahl der verworfenen Integrationsschritte ansteigt und folglich mit einer höheren Anzahl an Funktionsauswertungen zu rechnen ist.

3) Rechnerspezifische Werte:
   machine precision: $1.1102230246251568\, e^{-16}$.
   precision in decimal digits: 15 .

5.2.1 Glatte Funktionen

Wie zu erwarten, stellen glatte Funktionen für die getesteten Routinen kein Problem dar. Es wird von allen Routinen, mit Ausnahme von D01AJF und D01AKF (Bsp. 2, $tol = 10^{-14}$), die vorgegebene Genauigkeit erreicht. Da die NAG-Routinen D01$***$ die Integration über das Gesamtintervall ausführen, die Integranden glatt, also problemlos zu integrieren sind, zeigt sich, daß sie nahezu ohne Intervallunterteilung auskommen, wobei D01AHF, D01ARF an die geforderte Genauigkeit angepaßten Formeln aus der Folge der optimal erweiterten Quadraturformeln verwenden, die Routinen D01AJF und D01AKF das Problem haben, daß die von ihnen verwendeten Quadraturformeln schon mindestens 21 bzw. 61 Stützstellen benötigen, was sich insbesondere bei niedrigen geforderten Genauigkeiten nachteilig bemerkbar macht (Vgl. Tab. 5.1, Abb. 5.1). Integriert man über längere Intervalle, so verschwindet dieser Nachteil (Vgl. Tab. 5.2). Während die global adaptiven Routinen (TRAPEX, QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN) die Integration glatter Funktionen über kurze Intervalle ebenso souverän und schnell durchführen wie die vorgenannten NAG-Routinen (Vgl. Tab. 5.1), zeigt sich bei Integration über längere Intervalle mit wachsender Genauigkeitsforderung ein im Vergleich zu den NAG-Routinen starkes Anwachsen der Anzahl der Funktionsauswertungen (Vgl. Tab. 5.2, bis zu 100% mehr Funktionsauswertungen bei $tol = 10^{-6}$, ca. 150% mehr Funktionsauswertungen bei $tol = 10^{-14}$), dies ist hauptsächlich darauf zurückzuführen, daß mit Quadraturformeln hoher Ordnung gerechnet wird, diese Ordnung für glatte Integranden nur unwesentlich variiert, die Schrittweite für jeden nachfolgenden Schritt aber nicht beliebig anwachsen kann (Vgl. 4.2.1), somit relativ viele Integrationsschritte bis zum Erreichen des Intervallendes nötig sind (Vgl. Abb. 5.2). Die Richardson-Romberg-Integration (ROMBRG) wurde als klassisches Verfahren und aufgrund der Tatsache, daß es Basis der Routine TRAPEX ist, als Vergleichsverfahren in die Tests mit einbezogen. Während es bei Integration über kurze Intervalle und bei niedrigen geforderten Genauigkeiten durchaus konkurrenzfähig ist (Vgl. Tab. 5.1, Tab. 5.2), erweist es sich bei Integration über längere Intervalle und hoher geforderter Genauigkeit als nicht rentabel (Vgl. Tab. 5.2 , $tol = 10^{-14}$, über 1600% mehr Funktionsauswertungen im Vergleich zu D01AJF). Vorteil der global adaptiven Verfahren und der Routine ROMBRG ist, daß sie in allen Fällen die geforderte Genauigkeit erreichen und nicht vorzeitig abbrechen (Vgl. Tab. 5.2). Insgesamt stellen die in dieser Arbeit konstruierten Quadraturroutinen bei der Integration glatter Funktionen also durchaus eine Alternative zu den NAG-Routinen sowie zu ROMBRG und TRAPEX dar.

Beispiel Nr. 1 :

$$f(x) = e^x$$

$$I \approx \int_0^1 f(x)\,dx = 1.718\,281\,828\,459\,045$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	7 1.718281828459047	15 1.718281828459045	15 1.718281828459045	f-Werte I
D01ARF	7 1.718281828459048	7 1.718281828459046	15 1.718281828459045	f-Werte I
D01AJF	21 1.718281828459045	21 1.718281828459045	21 1.718281828459045	f-Werte I
D01AKF	61 1.718281828459045	61 1.718281828459045	61 1.718281828459045	f-Werte I
ROMBRG	5 1.71831	9 1.718281842	65 1.718281828459045	f-Werte I
TRAPEX	9 1.718281852	13 1.718281828468	25 1.718281828459047	f-Werte I
QUADTRIP	4 1.71868	8 1.7182818295	46 1.718281828459045	f-Werte I
NCTRIP	6 1.71828175	10 1.71828182845934	14 1.718281828459045	f-Werte I
NCOPEN	8 1.7182855	16 1.7182818284581	28 1.718281828459045	f-Werte I

Tabelle 5.1: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

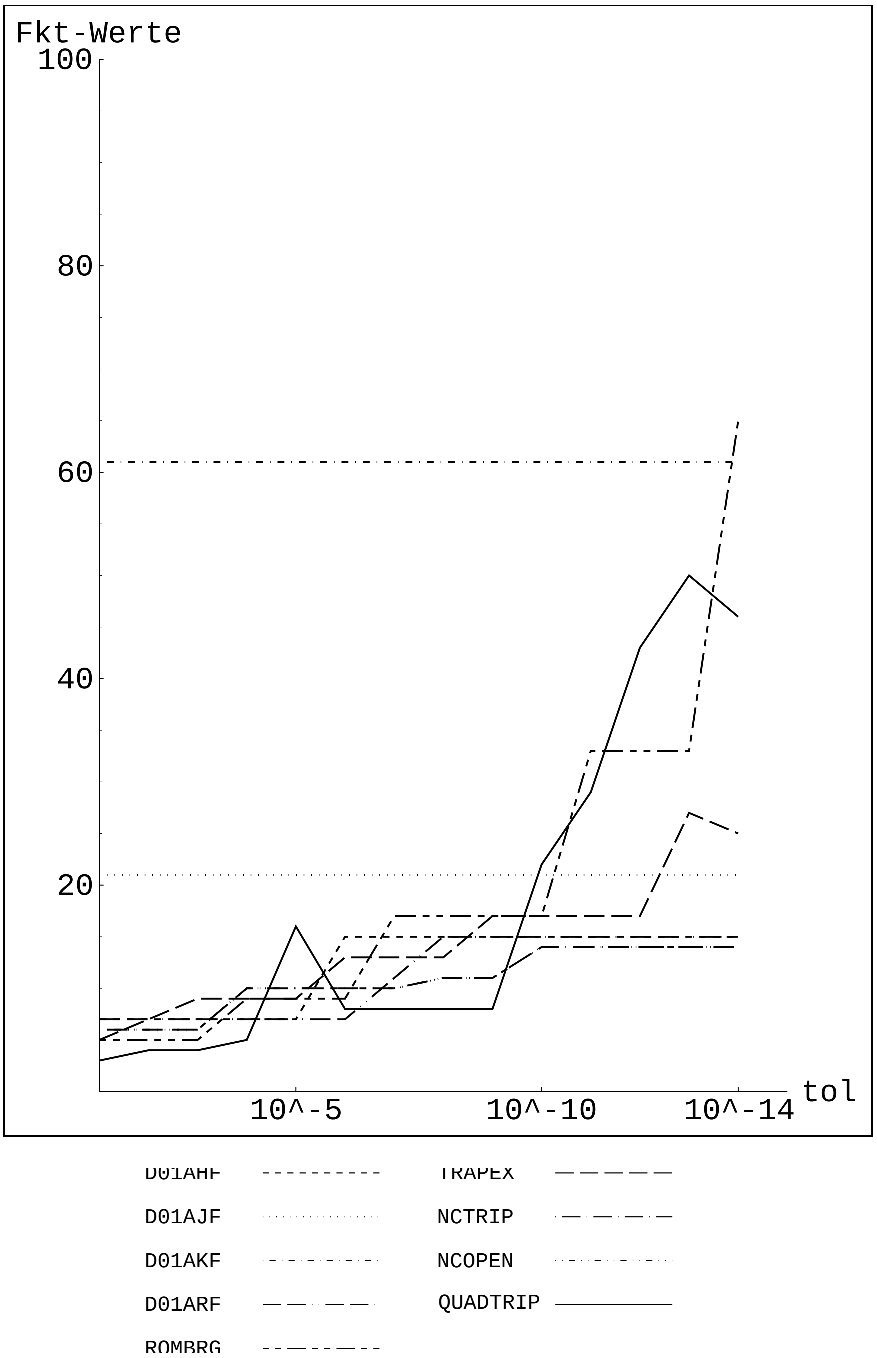

Abbildung 5.1: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 1)

Beispiel Nr. 2 :

$$f(x) = \cos(\cos(x) + 3\,\sin(x) + 2\,\cos(2\,x) + 3\,\sin(2\,x) + 3\,\cos(3\,x))$$

$$I \approx \int_0^{3.14159} f(x)\,dx = 0.838\,677\,446\,987\,031$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	63 0.838677446987031	63 0.838677446987031	127 0.838677446987031	f-Werte I
D01ARF	63 0.838677446987031	63 0.838677446987031	127 0.838677446987031	f-Werte I
D01AJF	105 0.83867744698992	147 0.838677446987034	—	f-Werte I
D01AKF	61 0.838677446987030	61 0.838677446987030	—	f-Werte I
ROMBRG	129 0.83867728	257 0.8386774470	2049 0.838677446987031	f-Werte I
TRAPEX	81 0.83846	87 0.838680	311 0.838677446987031	f-Werte I
QUADTRIP	52 0.8374	123 0.8386781	916 0.838677446987029	f-Werte I
NCTRIP	46 0.83880	97 0.83867762	347 0.838677446987031	f-Werte I
NCOPEN	56 0.83887	114 0.83867727	308 0.838677446987031	f-Werte I

Tabelle 5.2: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

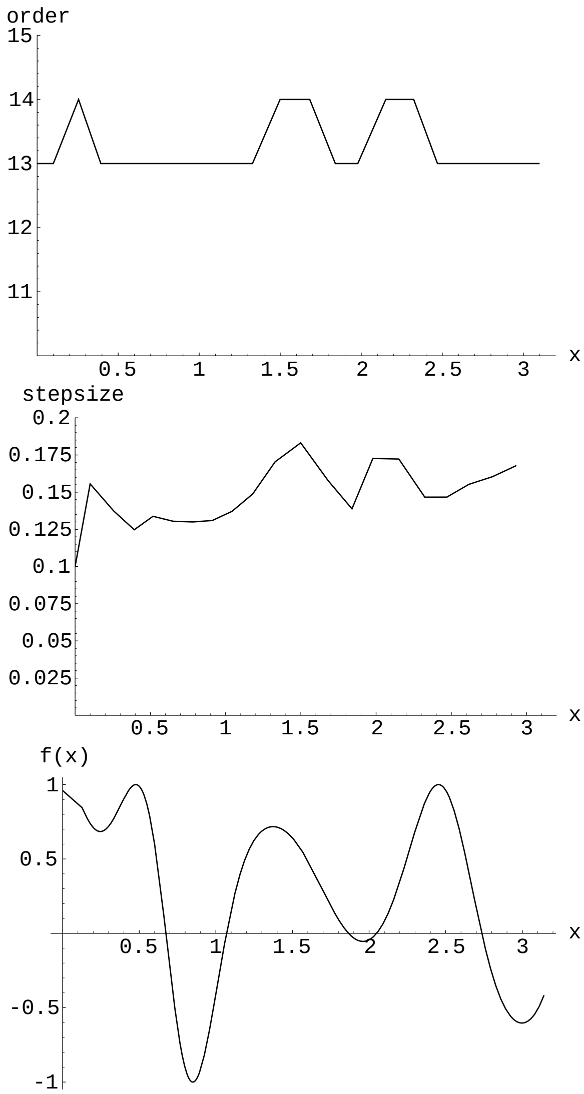

Abbildung 5.2: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 2), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

5.2.2 Funktionen die entweder selbst oder deren Ableitungen Unstetigkeitsstellen enthalten

Betrachten wir zunächst die Anzahl der Funktionsauswertungen. Bei niedriger und mittlerer Genauigkeitsforderung zeigen sich in fast allen Fällen die in dieser Arbeit auf Basis von Quadraturformeltripeln konstruierten Routinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN der Routine TRAPEX gleichwertig (ROMBRG ist nur bei geringer Genauigkeit eine Alternative, sonst meist hoffnungslos unterlegen), sowie den NAG-Routinen überlegen. Fordert man höhere Endgenauigkeit ($tol = 10^{-14}$), ändert sich dieses Verhalten zunächst. TRAPEX versagt zumeist und man bemerkt Vorteile auf Seiten der NAG-Routinen D01AHF und D01AJF. Allerdings treten diese Vorteile nur dann auf, wenn die Unstetigkeitsstelle in der Intervallmitte bzw. so im Intervall positioniert ist, daß sie sich nach einer respektive wenigen Intervallunterteilungen auf dem Rand zweier erhaltener, benachbarter Teilintervalle befindet (Vgl. Tabellen 5.3, 5.4, 5.6, 5.8, Abbildungen 5.3, 5.4, 5.6, 5.8). Der Umstand, den obige NAG-Routinen ausnutzen, ist, daß sie Gauß-Kronrod-Formelpaare bzw. optimal erweiterte Formeln auf Basis der 3-Punkt Gauß-Formel verwenden. Somit ist eine Häufung der Stützstellen zum Rand d.h. zur Problemstelle hin zu beobachten, wobei die Unstetigkeitsstelle selbst nicht unter den Knoten zu finden ist. Verschiebt man das Integrationsintervall nun etwa um $\varepsilon = 0.01$ nach rechts, so wird vorgenannter Vorteil zerstört und man erhält sofort, daß unsere, auf Quadraturformeltripeln beruhenden Routinen, sämtliche NAG-Routinen bei allen geforderten Genauigkeiten übertreffen. Man beobachtet eine Verringerung der Anzahl der Funktionsauswertungen von ca. 20% bis 75%, in Einzelfällen sogar von 90% (Vgl. Tabellen 5.5, 5.7, 5.9, Abbildungen 5.5, 5.7, 5.9). Gut zu erkennen ist die Wirkung der Schrittweiten- und Ordnungssteuerung. So nimmt die Schrittweite zunehmend ab, d.h. die Integrationsintervalle werden kleiner, je mehr man sich der Problemstelle (hier Unstetigkeit) nähert und ebenso wieder zu, wenn man diese überschritten hat und sich von ihr entfernt. Analog zu klassischen adaptiven Quadratur werden also in der Nähe der Problemstelle viele kleine Teilintervalle ausgewertet. Bedingt durch die Reduktion der Schrittweite beobachtet man nun aber zusätzlich eine Verminderung der Ordnung, was dazu führt, daß die Anzahl der Funktionsauswertungen nicht ins Unermeßliche steigt (Vgl. Abbildungen 5.3, 5.4, 5.6, 5.8). Mit der in dieser Arbeit verwendeten Schrittweiten- und Ordnungssteuerung erreicht man also den gewünschten Effekt, daß sich sowohl Schrittweite als auch Ordnung dem Funktionenverlauf anpassen, d.h. die Routinen QUADTRIP; NCTRIP; NCOPEN problembezogen arbeiten (Vgl. 4.2). In Bezug auf die geforderten Genauigkeiten bemerkt man, daß diese bis auf einen Fall von den soeben genannten Routinen erreicht werden. Lediglich NCTRIP läuft sich an der Unstetigkeitsstelle fest und bricht mit Erreichen der vorgegebenen maximalen Anzahl an Integrationsschritten mit einer Fehlermeldung (mit Angabe des Teilintervallendpunktes) ab (Vgl. Tab. 5.4, Tab. 5.5). Im Gegensatz dazu zeigen sich von den Vergleichsroutinen nur D01AHF, D01AJF und D01AKF verläßlich. D01ARF versagt dagegen häufig schon bei geforderter Genauigkeit von $tol = 10^{-6}$ (Vgl. Tabellen 5.3, 5.4, 5.5, 5.8, 5.9), was daran liegt, daß bei dieser Routine keine Intervallunterteilung vorgesehen ist und selbst die hohe Anzahl der verwendeten Stützstellen bzw. die dadurch bedingte hohe Ordnung der Quadraturformel nicht ausreichend ist, die Vorgabe zu erfüllen. D01ARF (wie übrigens alle betrachteten NAG-Routinen) gibt dabei jeweils die Fehlermeldung aus, daß die gewünschte Genauigkeit nicht erreicht werden konnte. (Bei den anderen NAG-Routinen kommt dann, wie schon in 5.2.1 geschehen, zusätzlich hinzu, daß keine weiteren Intervallunterteilungen mehr durchgeführt werden können (Maximalwert erreicht).) Bei hoher geforderter Genauigkeit versagen schließlich die Routinen D01ARF, TRAPEX (einzige Ausnahme vgl. Bsp. Nr. 5) und ROMBRG gänzlich. TRAPEX und ROMBRG brechen in diesem Fall ab, da die vorgegebene max. Anzahl an Integrationsschritten bzw. an Funktionsauswertungen erreicht wird. Kommen wir abschließend nochmals zu den in dieser Arbeit vorgestellten Routinen zurück. Insgesamt ist festzuhalten, daß es für einen Benutzer, der Funktionen, die selbst oder deren Ableitungen eine Unstetigkeitsstelle besitzen, integrieren will, vorteilhaft ist, die Routinen QUADTRIP, NCTRIP oder NCOPEN zu verwenden. Diese werden in aller Regel das erwünschte Ergebnis garantieren. Desweiteren werden sie bei niedrigen und mittleren geforderten Genauigkeiten durchweg mit weniger, im Einzelfall höchstens vergleichbar vielen Funktionsauswertungen auskommen. Diese Eigenschaft wird wohl auch in den meisten Fällen bei hohen geforderten Genauigkeiten erfüllt sein, denn das Auftreten einer Unstetigkeit in der (Teil-) Intervallmitte und die damit verbundene Begünstigung der NAG-Routinen, mit Ausnahme von D01ARF, ist sicher nicht als Standardfall anzusehen.

Beispiel Nr. 3 :

$$f(x) = \exp^{2|x-\frac{1}{2}|}$$

$$I \approx \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = 10.401\,909\,375\,823\,356$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	31	565	1599	f-Werte
	$\underline{10.40}33$	$\underline{10.401909}50$	$\underline{10.40190937582}45$	I
D01ARF	63	—	—	f-Werte
	$\underline{10.40}21$			I
D01AJF	105	105	105	f-Werte
	$\underline{10.40190937582335}2$	$\underline{10.40190937582335}2$	$\underline{10.40190937582335}2$	I
D01AKF	305	305	305	f-Werte
	$\underline{10.40190937582335}3$	$\underline{10.40190937582335}3$	$\underline{10.40190937582335}3$	I
ROMBRG	33	65	513	f-Werte
	$\underline{10.4019}10$	$\underline{10.401909375}19$	$\underline{10.401909375823356}$	I
TRAPEX	21	51	—	f-Werte
	$\underline{10.40}69$	$\underline{10.401}65$		I
QUADTRIP	30	114	536	f-Werte
	$\underline{10.4}14$	$\underline{10.40191}57$	$\underline{10.401909375823}29$	I
NCTRIP	186	157	534	f-Werte
	$\underline{10.40}72$	$\underline{10.4019}77$	$\underline{10.4019093758233}7$	I
NCOPEN	36	117	714	f-Werte
	$\underline{10.39}92$	$\underline{10.40190}01$	$\underline{10.401909375823}57$	I

Tabelle 5.3: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

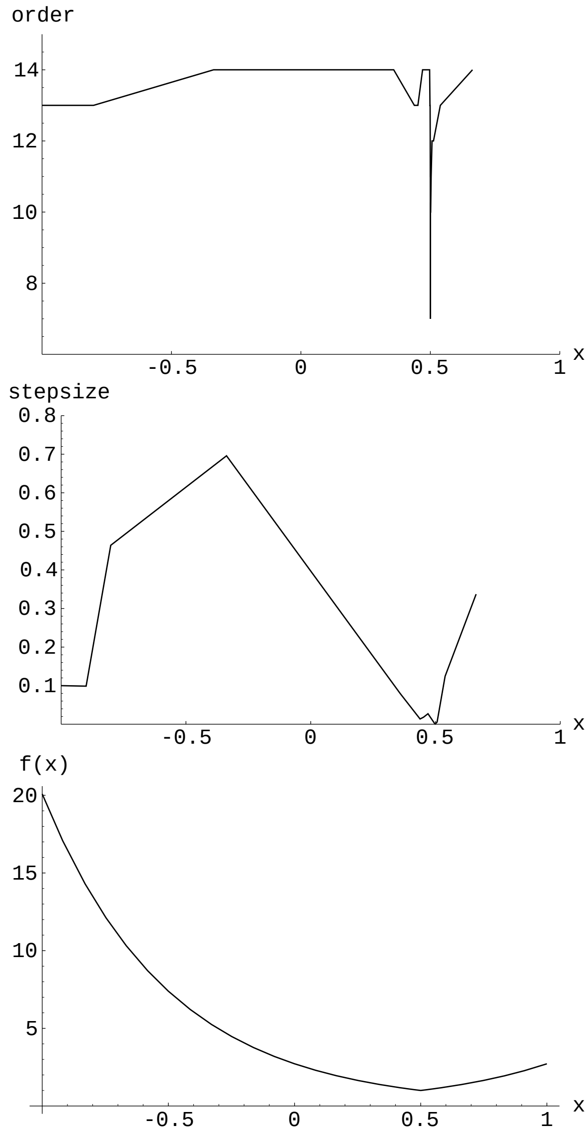

Abbildung 5.3: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 3), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 4 :

$$f(x) = \sqrt{|x|}$$

$$I \approx \int_{-1}^{1} f(x)\, dx = 1.333\,333\,333\,333\,333$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	338 $\underline{1.33333}59$	137 $\underline{1.3333333333333333}$	169 $\underline{1.3333333333333333}$	f-Werte I
D01ARF	511 $\underline{1.333}08$	—	—	f-Werte I
D01AJF	231 $\underline{1.33333}45$	483 $\underline{1.333333333333333}2$	483 $\underline{1.333333333333333}2$	f-Werte I
D01AKF	183 $\underline{1.333333}72$	1159 $\underline{1.333333333}94$	5795 $\underline{1.3333333333333333}$	f-Werte I
ROMBRG	129 $\underline{1.333}06$	8193 $\underline{1.33333}28$	—	f-Werte I
TRAPEX	37 $\underline{1.33}01$	145 $\underline{1.33333}23$	—	f-Werte I
QUADTRIP	32 $\underline{1.3}24$	175 $\underline{1.33333}85$	4266 $\underline{1.3333333333333}25$	f-Werte I
NCTRIP	28 $\underline{1.33}94$	98 $\underline{1.333}45$	—	f-Werte I
NCOPEN	33 $\underline{1.33333}98$	143 $\underline{1.3333}41$	1400 $\underline{1.3333333333333}51$	f-Werte I

Tabelle 5.4: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

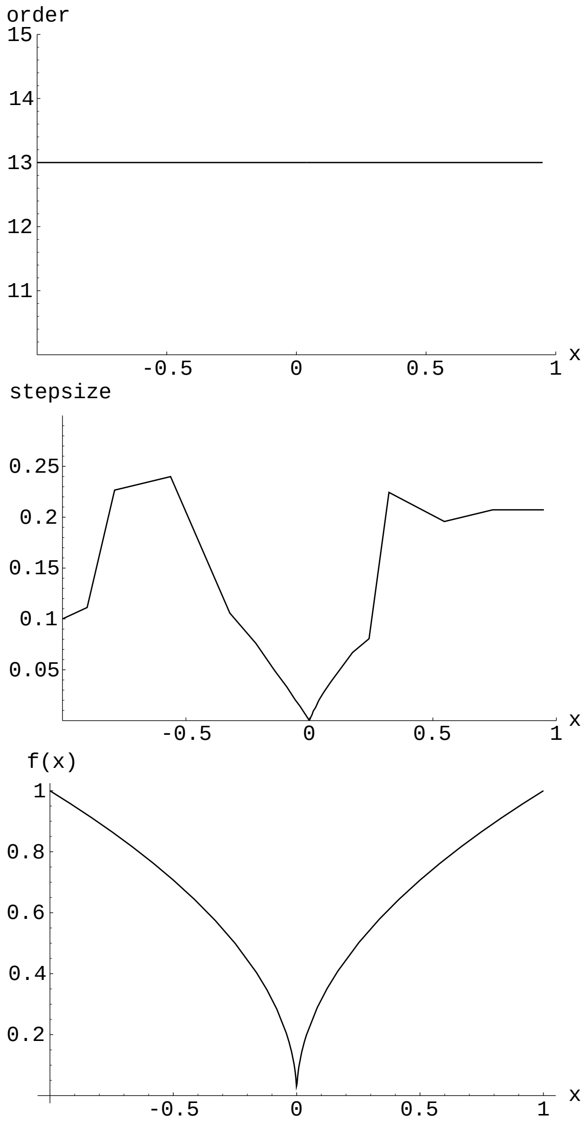

Abbildung 5.4: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 4), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCOPEN)

Beispiel Nr. 4a :

$$f(x) = \sqrt{|x|}$$

$$I \approx \int_{-0.99}^{1.01} f(x)\, dx = 1.333\,383\,333\,645\,842$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	351 1.33338351	468 1.333383375	1334 1.333383333645843	f-Werte I
D01ARF	127 1.33342	—	—	f-Werte I
D01AJF	105 1.33350	651 1.33338333370	1659 1.333383333645842	f-Werte I
D01AKF	183 1.33342	1403 1.333383344	3599 1.333383333645843	f-Werte I
ROMBRG	33 1.3347	32769 (max. Anz.) 1.333383373	—	f-Werte I
TRAPEX	27 1.3360	127 1.33338326	—	f-Werte I
QUADTRIP	37 1.3385	141 1.333366	1172 1.33338333364557	f-Werte I
NCTRIP	29 1.3370	166 1.333403	—	f-Werte I
NCOPEN	43 1.3345	143 1.333325	1456 1.333383333645847	f-Werte I

Tabelle 5.5: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

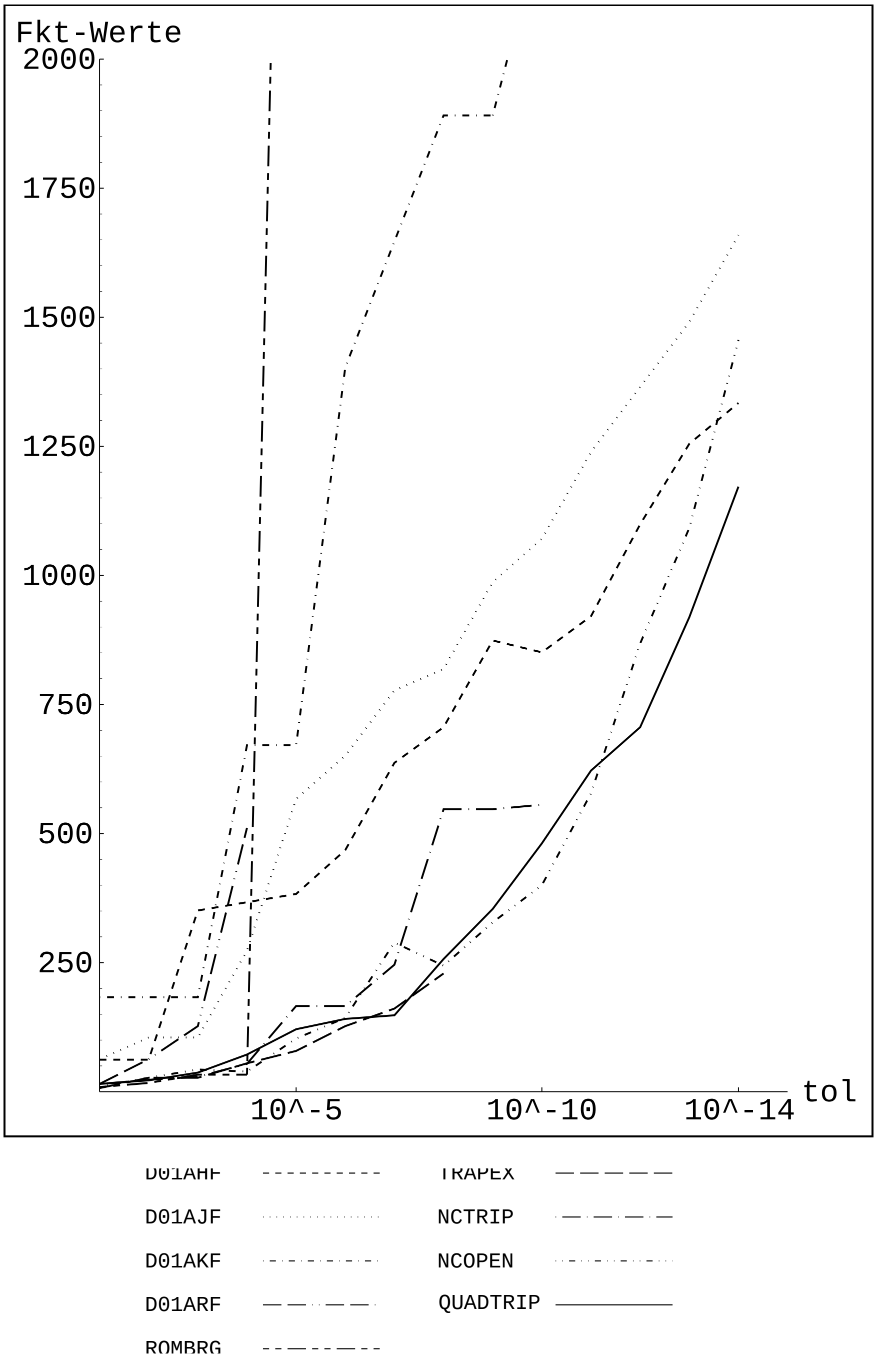

Abbildung 5.5: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 4a)

Beispiel Nr. 5 :

$$f(x) = |x|^{\frac{3}{2}}$$

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx = 0.8$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	31 $\underline{0.79999}48$	543 $\underline{0.8000000}11$	539 $\underline{0.800000000000000}13$	f-Werte I
D01ARF	63 $\underline{0.7999}61$	511 $\underline{0.799999}78$	—	f-Werte I
D01AJF	63 $\underline{0.79999999}43$	189 $\underline{0.799999999}40$	483 $\underline{0.799999999999999}$	f-Werte I
D01AKF	183 $\underline{0.7999999999}72$	183 $\underline{0.7999999999}72$	2153 $\underline{0.799999999999999}$	f-Werte I
ROMBRG	17 $\underline{0.800}99$	257 $\underline{0.8000000}94$	32769 (max. Anz.) $\underline{0.800000000000}51$	f-Werte I
TRAPEX	33 $\underline{0.799}89$	35 $\underline{0.8000}15$	455 $\underline{0.8000000000000}49$	f-Werte I
QUADTRIP	26 $\underline{0.80}14$	67 $\underline{0.8000}40$	546 $\underline{0.8000000000000}97$	f-Werte I
NCTRIP	23 $\underline{0.800}76$	66 $\underline{0.79999}44$	550 $\underline{0.8000000000000}15$	f-Werte I
NCOPEN	22 $\underline{0.8000}15$	102 $\underline{0.799999}76$	714 $\underline{0.8000000000000}30$	f-Werte I

Tabelle 5.6: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

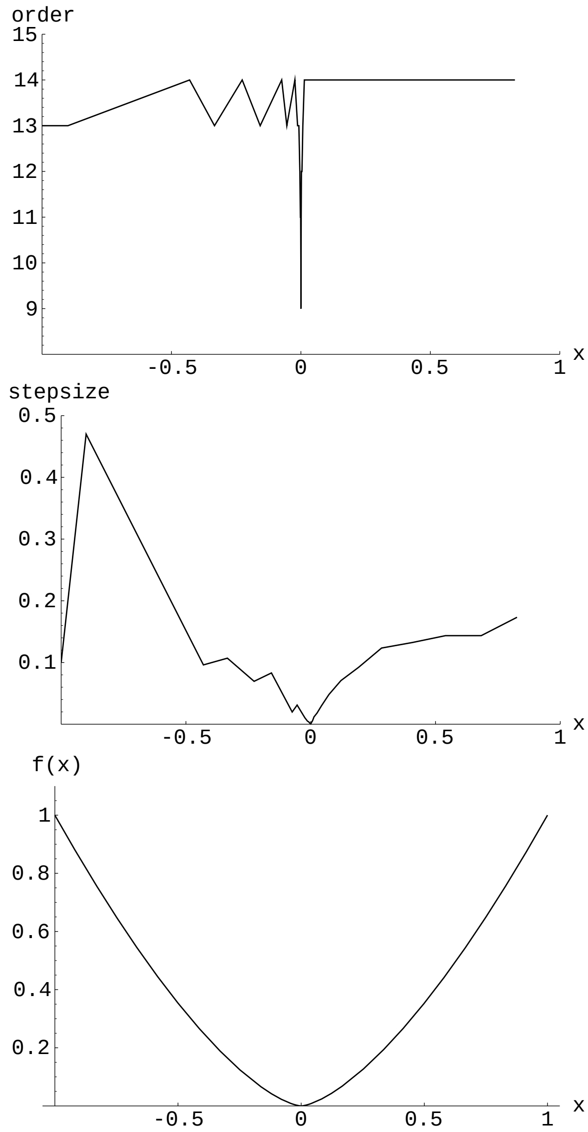

Abbildung 5.6: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 5), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 5a :

$$f(x) = |x|^{\frac{3}{2}}$$

$$I \approx \int_{-0.99}^{1.01} f(x)\,dx = 0.800\,149\,999\,687\,496$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	31 $\underline{0.8001}85$	406 $\underline{0.800150}03$	1935 $\underline{0.800149999687496}$	f-Werte I
D01ARF	31 $\underline{0.800}00$	511 $\underline{0.800150}12$	—	f-Werte I
D01AJF	63 $\underline{0.800149}43$	231 $\underline{0.800150}01$	903 $\underline{0.800149999687496}$	f-Werte I
D01AKF	183 $\underline{0.800150}05$	183 $\underline{0.800150}05$	1891 $\underline{0.800149999687496}$	f-Werte I
ROMBRG	17 $\underline{0.800}29$	257 $\underline{0.800149}84$	32769 (max. Anz.) $\underline{0.80014999968}82$	f-Werte I
TRAPEX	33 $\underline{0.799}99$	35 $\underline{0.8001}80$	—	f-Werte I
QUADTRIP	26 $\underline{0.80}14$	73 $\underline{0.8001}81$	595 $\underline{0.800149999687}65$	f-Werte I
NCTRIP	29 $\underline{0.800}48$	66 $\underline{0.80015}6$	560 $\underline{0.800149999687}521$	f-Werte I
NCOPEN	22 $\underline{0.799}92$	102 $\underline{0.800149}21$	728 $\underline{0.800149999687}523$	f-Werte I

Tabelle 5.7: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

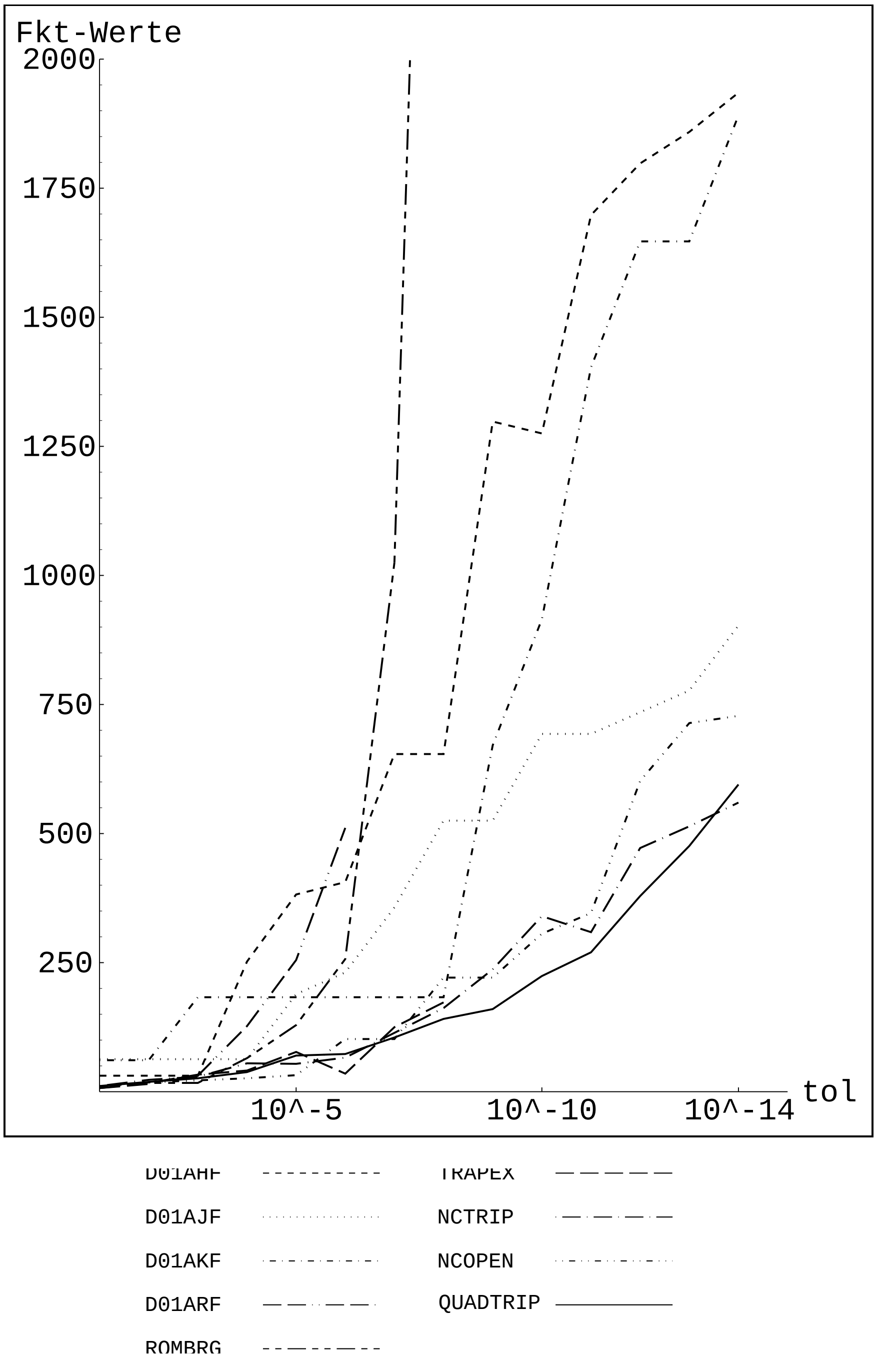

Abbildung 5.7: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 5a)

Beispiel Nr. 6 :

$$f(x) = \sqrt{|x + \tfrac{1}{2}|}$$

$$I \approx \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = 1.460\,447\,131\,787\,104$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	300 1.460451	453 1.4604471379	1164 1.460447131787104	f-Werte I
D01ARF	127 1.46075	—	—	f-Werte I
D01AJF	189 1.4604483	441 1.460447131787104	525 1.460447131787104	f-Werte I
D01AKF	305 1.46044727	1037 1.4604471379	5673 1.460447131787104	f-Werte I
ROMBRG	129 1.46017	8193 1.4604466	—	f-Werte I
TRAPEX	33 1.4621	159 1.4604461	—	f-Werte I
QUADTRIP	34 1.4638	122 1.46035	4830 1.46044713178700	f-Werte I
NCTRIP	68 1.46072	136 1.460410	1479 1.460447131787104	f-Werte I
NCOPEN	51 1.4610	180 1.46044738	1162 1.460447131787137	f-Werte I

Tabelle 5.8: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

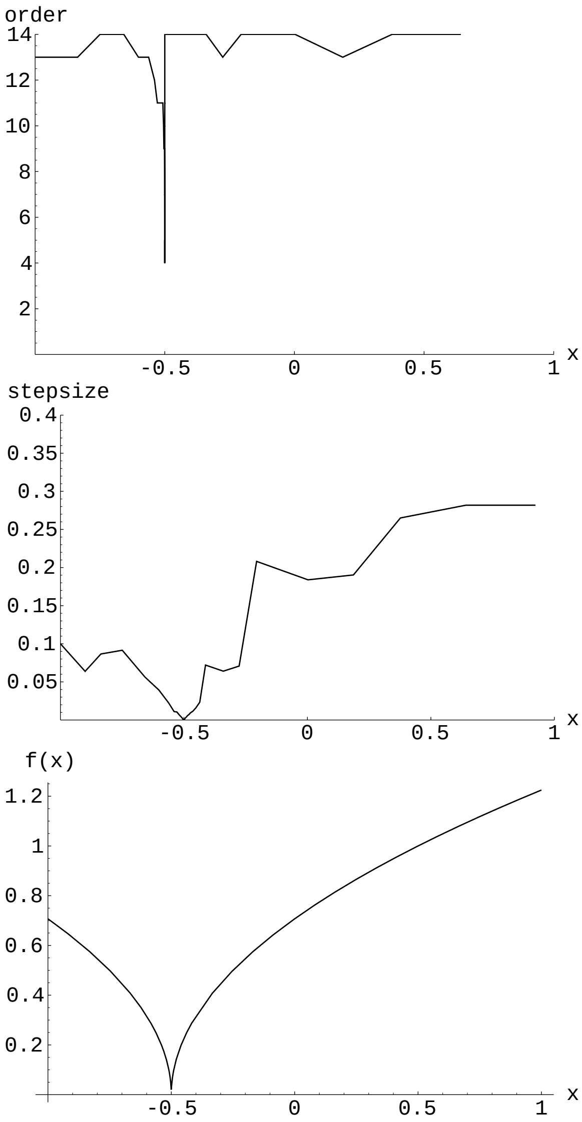

Abbildung 5.8: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 6), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 6a :

$$f(x) = \sqrt{|x + \tfrac{1}{2}|}$$

$$I \approx \int_{-0.99}^{1.01} f(x)\,dx = 1.465\,679\,376\,562\,746$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	191 1.465696	437 1.4656793789	1334 1.465679376562748	f-Werte I
D01ARF	63 1.46692	—	—	f-Werte I
D01AJF	105 1.46580	609 1.46567937662	1617 1.465679376562747	f-Werte I
D01AKF	549 1.465686	1403 1.465679387	3477 1.465679376562748	f-Werte I
ROMBRG	33 1.4670	32769 (max. Anz.) 1.46567941	—	f-Werte I
TRAPEX	31 1.4665	151 1.46567929	—	f-Werte I
QUADTRIP	43 1.46523	203 1.46568016	1162 1.46567937656259	f-Werte I
NCTRIP	40 1.4620	132 1.465681	1406 1.46567937656383	f-Werte I
NCOPEN	40 1.4677	172 1.46567940	1148 1.465679376562709	f-Werte I

Tabelle 5.9: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

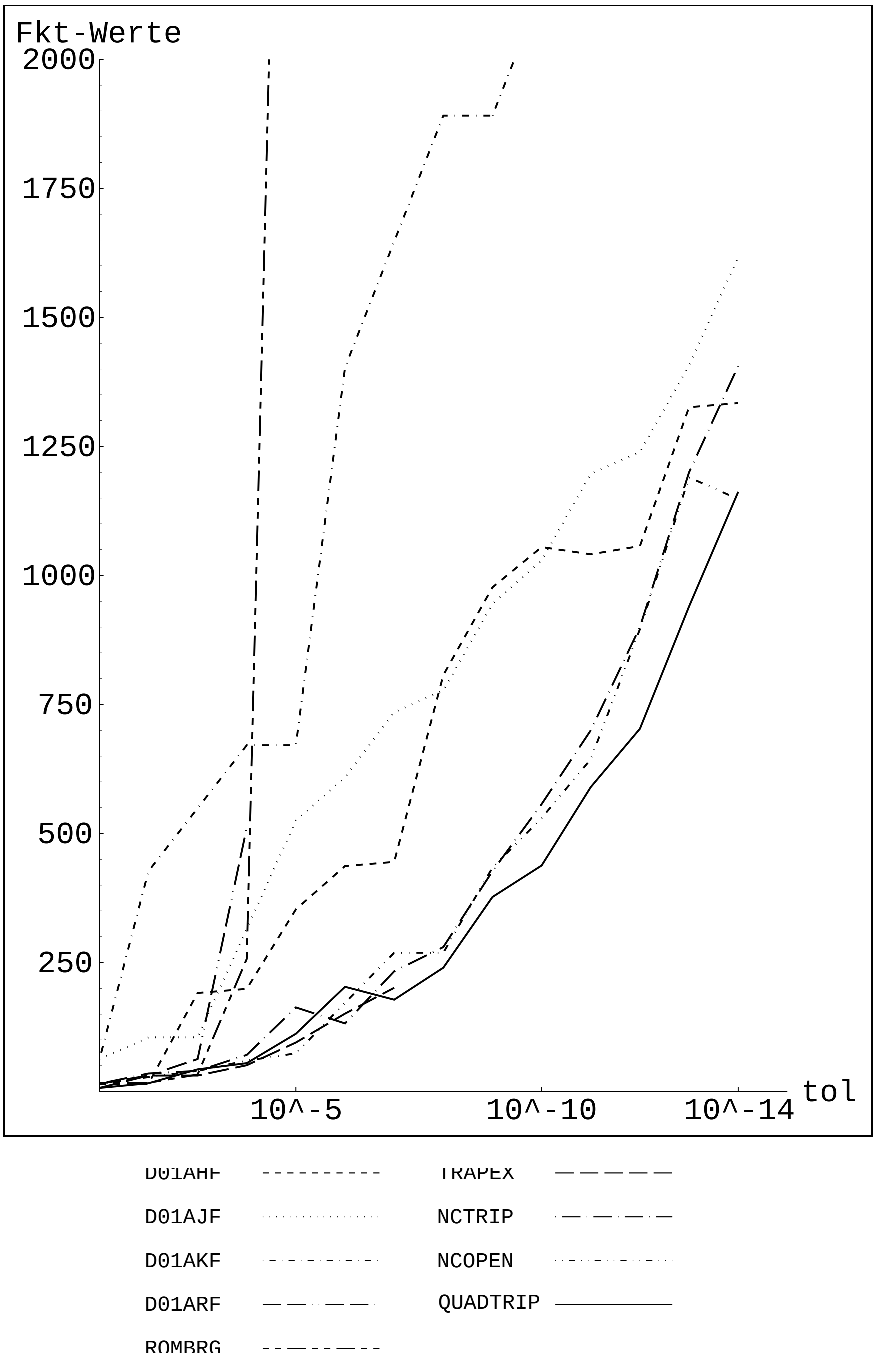

Abbildung 5.9: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 6a)

5.2.3 Stark oszillierende Funktionen

Ebenso wie bei den glatten Funktionen, stellen stark oszillierende Funktionen für sämtliche Routinen kein Problem dar. Ohne Ausnahme wird jeweils die geforderte Genauigkeit erreicht. Zeigen sich die in dieser Arbeit vorgestellten global adaptiven Routinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN bei geringen ($tol = 10^{-3}$) und mittleren Genauigkeitsforderungen ($tol = 10^{-6}$) im Vorteil und bieten eine Einsparung von bis zu 75% bzw. 60% der Funktionsauswertungen, so ändert sich dieses Bild bei hohen Genauigkeitsforderungen ($tol = 10^{-14}$). Hier zeigen sich die NAG-Vergleichsroutinen als die eindeutig Stärkeren (Ausnahme: D01AJF, vgl. Tab. 5.10). Sie bieten Einsparungen von 35%, in Einzelfällen sogar bis zu 85% der Funktionsauswertungen gegenüber den vorgenannten Verfahren (Vgl. Tab. 5.10, Tab. 5.11, Abb. 5.11; QUADTRIP ausgenommen, siehe 5.2, Bem. 2). Erklären läßt sich dieses Verhalten dadurch, daß wie bei den glatten Funktionen auch, bei Behandlung stark oszillierender Funktionen nur eine unwesentliche Variation der Ordnung, aber ein der Oszillation angepaßtes Schrittweitenverhalten zu beobachten ist. Dies führt dazu, daß bei hohen Genauigkeitsforderungen in den Bereichen starker Oszillation mit geringen Schrittweiten aber hoher Anzahl an Funktionsauswertungen gearbeitet wird (Vgl. Abb. 5.10, Abb. 5.12). Quadraturformeln hoher Ordnung finden zwar auch bei den NAG-Routinen Verwendung, dort aber zur Integralwertberechnung über das Gesamtintervall. Keine, bzw. nur eine untergeordnete Rolle spielen ROMBRG und TRAPEX. Diese beiden Routinen erfüllen zwar die vorgegebenen Genauigkeitsforderungen, benötigen aber in aller Regel mehr Funktionsauswertungen als die im vorangegangenen betrachteten NAG-Routinen und global adaptiven Verfahren (Vgl. Tab. 5.10, Tab. 5.11). Einem Benutzer, der nur an geringen bis mittleren Genauigkeiten interessiert ist, ist somit die Verwendung unserer global adaptiven Routinen nahezulegen, bei ausschließlichem Interesse an hoher Rechengenauigkeit aber davon abzuraten. Insgesamt betrachtet, sind die Routinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN durchaus konkurenzfähig mit den etablierten Verfahren und somit für Anwender sicherlich eine Alternative.

Beispiel Nr. 7 :

$$f(x) = x^9 \sin(100\,x)$$

$$I \approx \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = -0.018\,029\,093\,298\,623$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	437	469	533	f-Werte
	−0.0180290955	−0.018029093298623	−0.018029093298623	I
D01ARF	127	127	255	f-Werte
	−0.018029093298623	−0.018029093298623	−0.018029093298623	I
D01AJF	483	567	1155	f-Werte
	−0.018029093298623	−0.018029093298623	−0.018029093298623	I
D01AKF	427	427	427	f-Werte
	−0.018029093298627	−0.018029093298625	−0.018029093298625	I
ROMBRG	33	1025	8193	f-Werte
	−0.092	−0.0180290928	−0.018029093298623	I
TRAPEX	383	327	1491	f-Werte
	−0.0180283	−0.01802919	−0.018029093298623	I
QUADTRIP	92	263	2317	f-Werte
	−0.0167	−0.0180258	−0.018029093298607	I
NCTRIP	99	238	858	f-Werte
	−0.0197	−0.018049	−0.018029093298623	I
NCOPEN	119	315	854	f-Werte
	−0.0170	−0.018035	−0.018029093298653	I

Tabelle 5.10: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

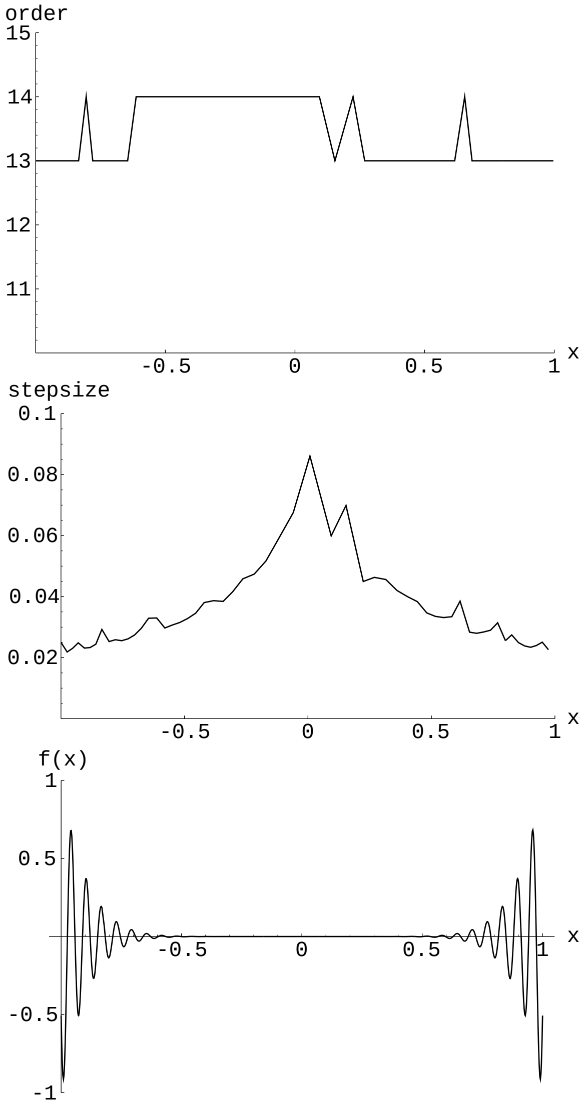

Abbildung 5.10: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 7), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

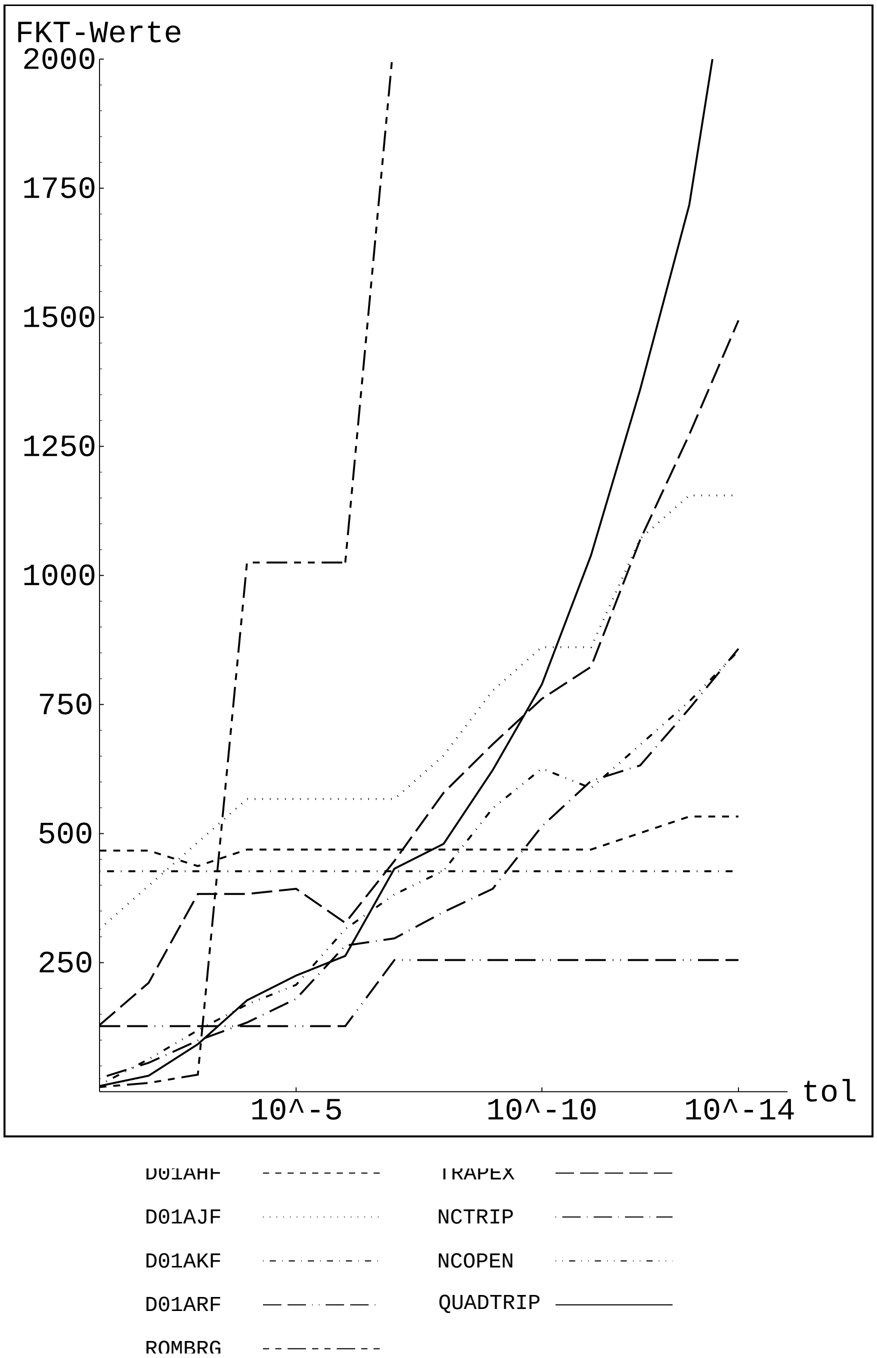

Abbildung 5.11: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 7)

Beispiel Nr. 8 :

$$f(x) = e^x \sin(e^x)$$

$$I \approx \int_0^4 f(x)\,dx = 0.910\,964\,039\,265\,932$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	171 $\underline{0.9109640}49$	203 $\underline{0.9109640}49$	283 $\underline{0.9109640392659}20$	f-Werte I
D01ARF	127 $\underline{0.9109640392659}81$	127 $\underline{0.9109640392659}81$	255 $\underline{0.9109640392659}76$	f-Werte I
D01AJF	189 $\underline{0.9109640392659}13$	273 $\underline{0.9109640392659}13$	273 $\underline{0.9109640392659}13$	f-Werte I
D01AKF	183 $\underline{0.9109640392659}57$	183 $\underline{0.9109640392659}57$	183 $\underline{0.9109640392659}57$	f-Werte I
ROMBRG	1025 $\underline{0.91096403}76$	2049 $\underline{0.91096403926}91$	8193 $\underline{0.910964039265932}$	f-Werte I
TRAPEX	523 $\underline{0.910}87$	369 $\underline{0.910964}28$	931 $\underline{0.910964039265}85$	f-Werte I
QUADTRIP	227 $\underline{0.910}27$	265 $\underline{0.910963}2$	2598 $\underline{0.910964039265}89$	f-Werte I
NCTRIP	179 $\underline{0.91}59$	271 $\underline{0.910963}8$	703 $\underline{0.91096403926593}18$	f-Werte I
NCOPEN	217 $\underline{0.91}36$	312 $\underline{0.910963}5$	1428 $\underline{0.9109640392659}45$	f-Werte I

Tabelle 5.11: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

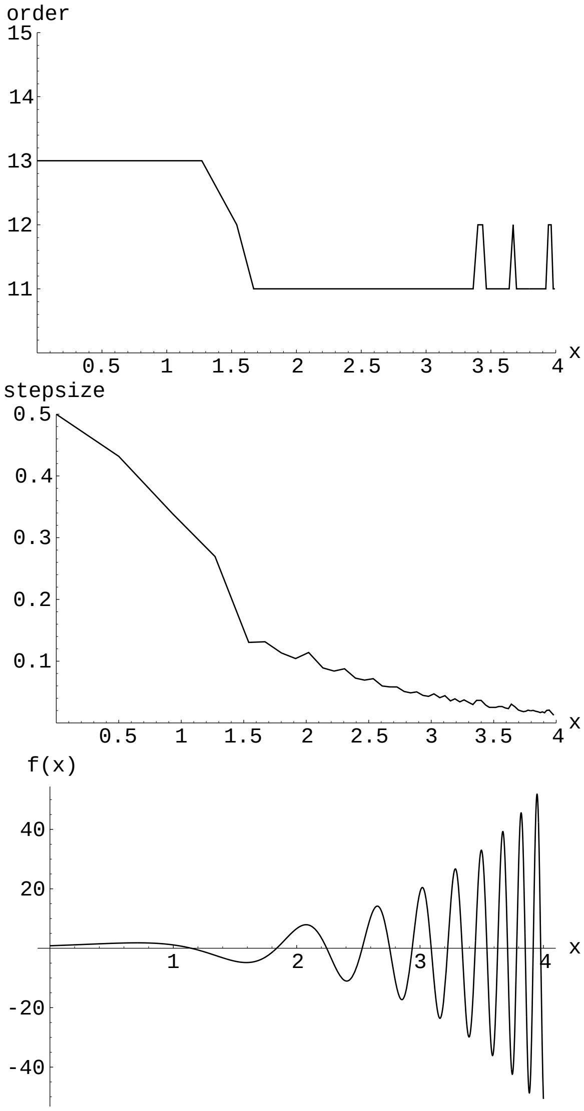

Abbildung 5.12: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 8), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

5.2.4 Peakfunktionen, Funktionen mit Singularität

Peak- bzw. Nadelfunktionen oder Funktionen mit Sinularitäten sind seit jeher als Testobjekte für Quadraturverfahren beliebt. Sie nehmen daher in unserer numerischen Auswertung (wie auch die Funktionen mit Unstetigkeitsstellen in der Funktion selbst oder einer ihrer Ableitungen, vgl. 5.2) einen etwas breiteren Raum ein. Auch hier wollen wir die Anzahl der Funktionsauswertungen und die jeweils erreichte Genauigkeit vergleichen. Betrachten wir in diesem Abschnitt zuerst die erreichten Genauigkeiten. An erster Stelle sei das Versagen der NAG-Routine D01ARF für alle Testbeispiele, für alle, selbst der geringen Genauigkeitsforderung ($tol = 10^{-3}$) angeführt. Die Routine ROMBRG versagt, wie schon in 5.2.2, in den meisten Fällen bei hoher geforderter Genauigkeit ($tol = 10^{-14}$), aufgrund des Erreichens der vorgegebenen maximalen Anzahl an Funktionsauswertungen. Sie erreicht daher die Vorgabe nicht. Nehmen wir nun zunächst Beispiel Nr. 13 aus der Betrachtung heraus. Dann erreichen von den restlichen Verfahren sowohl QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN und TRAPEX, als auch D01AHF, D01AJF und D01AKF alle geforderten Genauigkeiten (Vgl. Tabellen 5.12, 5.13, 5.14 und 5.15), mit Ausnahme von TRAPEX und QUADTRIP bei $tol = 10^{-14}$ in Beispiel Nr. 10 (Vgl. Tab. 5.13). Beide Routinen laufen sich an der Problemstelle fest und brechen nach Überschreiten der vorgegebenen max. Anzahl an Integrationsschritten ab, QUADTRIP analog NCTRIP (Vgl. 5.2.2) mit einer Fehlermeldung. Insgesamt scheinen Peak- bzw. Nadelfunktionen i.a. kein Problem für die gegesteten Verfahren, außer D01ARF und ROMBRG, darzustellen. Doch dieser Schein trügt. Variieren wir dazu jetzt im Beispiel Nr. 13 die Breite der Peaks/Nadeln (Vgl. Abb. 5.17). Es zeigt sich, daß, falls eine Nadel schmal genug ist, diese von den NAG-Routinen nicht mehr erkannt wird und daraus resultierend, ohne Fehlermeldung, ein falsches Resultat geliefert wird (Vgl. Tab. 5.16). Aufgrund der adaptiven Schrittweiten- und Ordnungssteuerung, womit eine problemangepaßte Arbeitsweise ermöglicht wird (Vgl. Abbildungen 5.15, 5.16 und 5.17), sind die Verfahren QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN und ebenso TRAPEX in der Lage, alle Nadelspitzen zu erkennen und haben somit den entscheidenden Vorteil gegenüber den NAG-Routinen D01$* * *$. Denn in der Praxis wird die Lage und die Breite eines Peaks einem Benutzer in aller Regel nicht bekannt sein, so daß er darauf vertrauen muß, daß diese Problemstellen von der von ihm verwendeten Quadraturroutine erkannt wird. In Bezug auf die Anzahl der Funktionsauswertungen erwarten wir wiederum Vorteile der NAG-Routinen D01AHF und D01AJF bei hoher geforderter Genauigkeit, wenn die Lage des Peaks/Singularität analog 5.2.2 für diese Verfahren günstig ist (Vgl. Abbildungen 5.14, 5.15 und 5.16). Diese Erwartung bestätigt sich (Vgl. Tabellen 5.13, 5.14 und 5.15). So findet man zunächst zwischen 30% und 60% weniger Funktionsauswertungen bei niedriger geforderter Genauigkeit ($tol = 10^{-3}$) bei QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN und TRAPEX. Sind sie bei mittleren Genauigkeiten ($tol = 10^{-6}$) vom Arbeitsaufwand her noch gleichwertig, so liegen die Vorteile von D01AHF und D01AJF eindeutig bei hoher Genauigkeitsforderung ($tol = 10^{-14}$). Etwa 50% der Funktionsauswertungen werden durchschnittlich eingespart. (QUADTRIP sei hierbei nach 5.2, Bemerkung 2, vom Vergleich ausgeschlossen.) Ist die Lage der Peaks für diese beiden Routinen aber nicht mehr so vorteilhaft, so zeigen sich die in dieser Arbeit hergeleiteten Verfahren sofort als konkurrenzfähig und benötigen, wie auch TRAPEX, von 90% ($tol = 10^{-3}$) bis 30% ($tol = 10^{-14}$) weniger Funktionsauswertungen (Vgl. Abb. 5.14). D01AKF stellt sich von den NAG-Routinen als diejenige heraus, die zwar die vorgegebenen Genauigkeiten, wie schon erwähnt, erreicht, sich aber in Bezug auf die Anzahl der Funktionsauswertungen mit keiner der oben erwähnten Routinen messen kann. Bis zu 400% mehr Auswertungen im Vergleich zu NCTRIP oder NCOPEN sind zu beobachten (Vgl. Tab. 5.13). ROMBRG bricht, wie schon beschrieben, meist vorzeitig wegen Überschreiten der vorgegebenen max. Anzahl an Funktionsauswertungen ab und ist somit verständlicherweise kaum eine Alternative zu den restlichen Verfahren. Insgesamt ist also festzustellen, daß im allgemeinen Fall, d.h. wenn über die Lage und Breite von Peaks nichts bekannt ist, es ratsam erscheint, die Routinen QUADTRIP, NCTRIP, NCOPEN und TRAPEX anzuwenden. Sie garantieren, wie schon in 5.2.2, das gewünschte Ergebnis. Dabei benötigen sie bei niedrigen und mittleren Genauigkeitsforderungen durchweg, und in vielen Fällen auch bei hohen geforderten Genauigkeiten weniger Funktionsauswertungen, als die NAG-Vergleichsroutinen, für die auch hier günstig gelegene Peaks die Ausnahme sein werden.

Beispiel Nr. 9 :

$$f(x) = \sqrt{50}\, e^{-50 \cdot 3.14159\, x^2}$$

$$I \approx \int_0^{10} f(x)\, dx = 0.500\,000\,211\,166\,100$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	295 0.500000211166100	295 0.500000211166100	295 0.500000211166100	f-Werte I
D01ARF	—	—	—	f-Werte I
D01AJF	231 0.500000211166100	231 0.500000211166100	315 0.500000211166100	f-Werte I
D01AKF	183 0.50000021100	305 0.500000211166102	549 0.50000021116609	f-Werte I
ROMBRG	1025 0.50000034	2049 0.50000021108	16385 0.500000211166100	f-Werte I
TRAPEX	21 0.4923	41 0.5000022	145 0.500000211166100	f-Werte I
QUADTRIP	31 0.50081	62 0.4999977	353 0.500000211166122	f-Werte I
NCTRIP	80 0.5014	69 0.500000278	190 0.500000211166100	f-Werte I
NCOPEN	50 0.5000075	82 0.500000226	196 0.50000021116609	f-Werte I

Tabelle 5.12: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

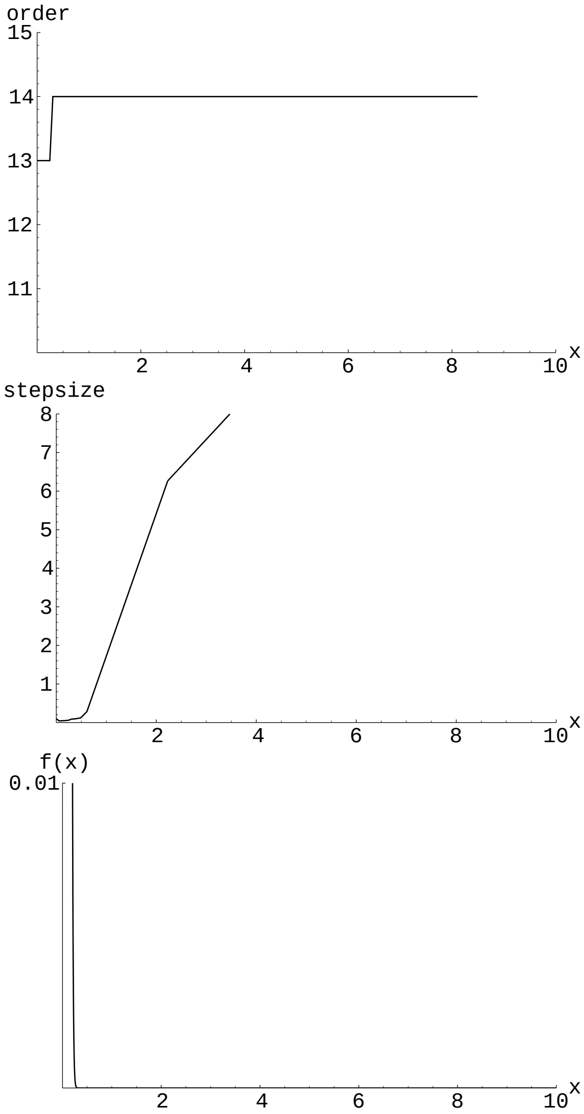

Abbildung 5.13: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 9), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

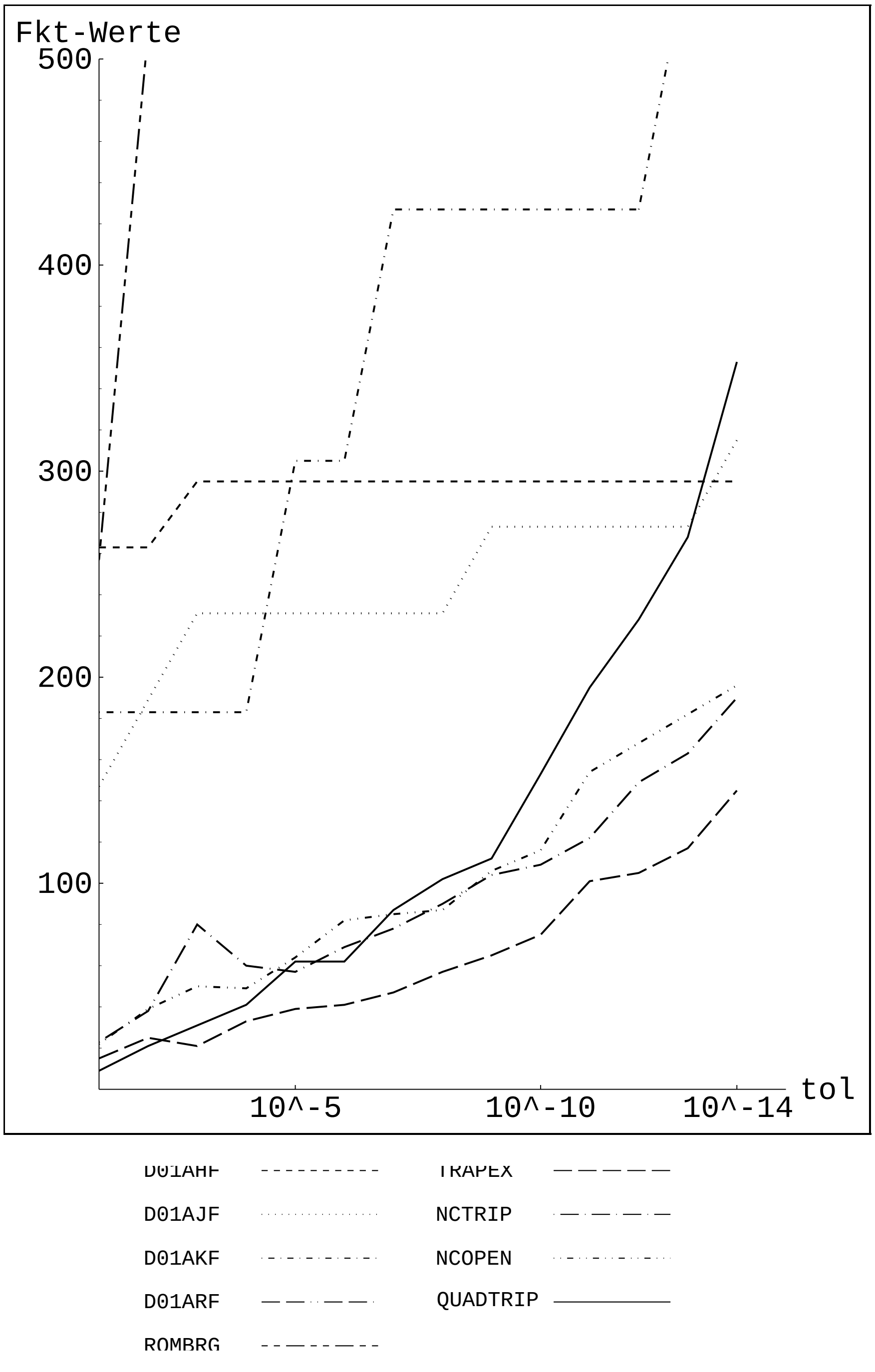

Abbildung 5.14: Geforderte Genauigkeit, Anzahl der Funktionsauswertungen (Bsp. 9)

Beispiel Nr. 10 :

$$f(x) = \begin{cases} \ln\left(10^{-15}\right) & f\ddot{u}r\ |x| \leq 10^{-15} \\ \ln\left(|x|\right) & sonst \end{cases}$$

$$I \approx \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = -1.999\,999\,999\,999\,998$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	155 −1.999977	185 −1.9999999978	1105 −1.999999999999998	f-Werte I
D01ARF	—	—	—	f-Werte I
D01AJF	399 −2.000000000000001	483 −2.000000000000000	483 −2.000000000000000	f-Werte I
D01AKF	1647 −1.9999968	4087 −1.9999999969	9699 −1.999999999999998	f-Werte I
ROMBRG	32769 (max. Anz.) −2.00082	32769 (max. Anz.) −2.00082	—	f-Werte I
TRAPEX	71 −2.00045	209 −1.9999953	—	f-Werte I
QUADTRIP	48 −1.971	342 −1.9999915	—	f-Werte I
NCTRIP	112 −1.9961	393 −2.00000041	2734 −1.9999999999988	f-Werte I
NCOPEN	98 −1.99908	425 −1.99999913	2422 −1.999999999999905	f-Werte I

Tabelle 5.13: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

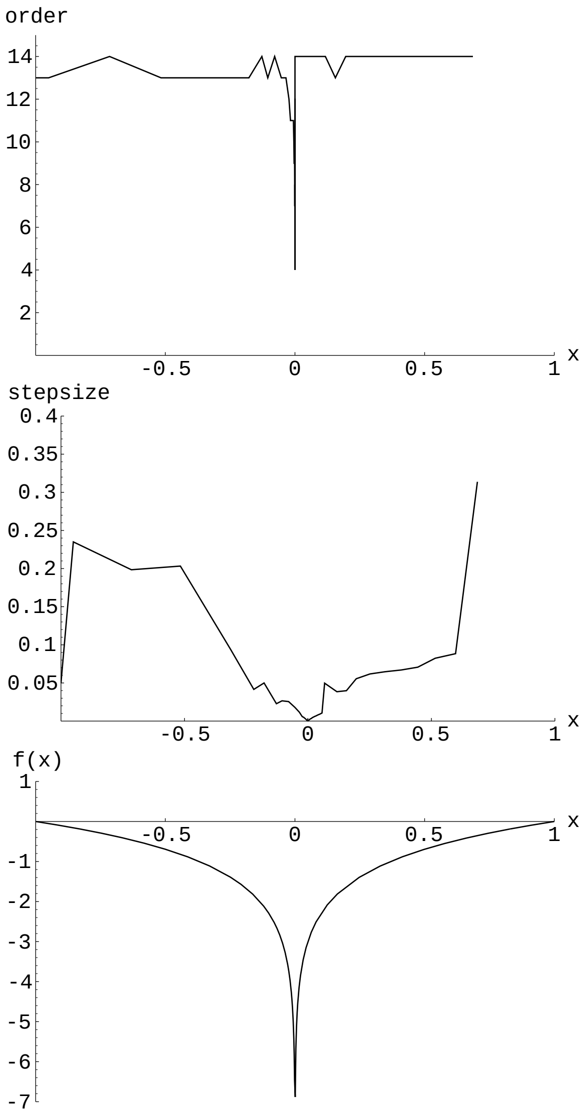

Abbildung 5.15: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 10), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 11 :

$$f(x) = \frac{10^{-3}}{(x-1.5)^2+10^{-6}}$$

$$I \approx \int_1^2 f(x)\,dx = 3.137\,592\,658\,923\,113$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	185 $\underline{3.137}588$	249 $\underline{3.137592}50$	409 $\underline{3.1375926589231}02$	f-Werte I
D01ARF	—	—	—	f-Werte I
D01AJF	567 $\underline{3.137592}53$	693 $\underline{3.13759265892}23$	819 $\underline{3.13759265892311}6$	f-Werte I
D01AKF	1037 $\underline{3.13759265}98$	1159 $\underline{3.13759265892}26$	1647 $\underline{3.137592658923}10$	f-Werte I
ROMBRG	8193 $\underline{3.137}588$	32769 (max. Anz.) $\underline{3.1375926589}35$	—	f-Werte I
TRAPEX	221 $\underline{3.137}66$	245 $\underline{3.13759}35$	1007 $\underline{3.137592658923}04$	f-Werte I
QUADTRIP	149 $\underline{3.13}86$	411 $\underline{3.13759}18$	1469 $\underline{3.137592658923}83$	f-Werte I
NCTRIP	214 $\underline{3.1}41$	388 $\underline{3.137592}71$	1004 $\underline{3.1375926589231}93$	f-Werte I
NCOPEN	213 $\underline{3.137}49$	449 $\underline{3.137592}26$	2240 $\underline{3.13759265892}29$	f-Werte I

Tabelle 5.14: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

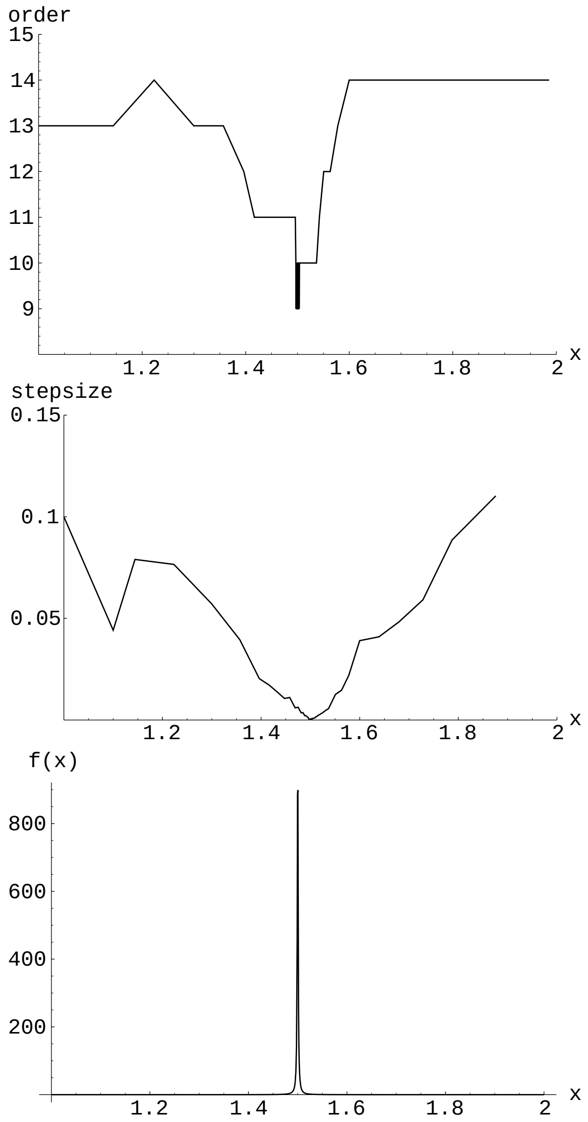

Abbildung 5.16: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 11), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 12 :

$$f(x) = \frac{10^{-3}}{(x-1.2)^2+10^{-6}} + \frac{10^{-3}}{(x-1.8)^2+10^{-6}}$$

$$I \approx \int_1^2 f(x)\,dx = 6.270\,685\,391\,813\,7$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	557 $\underline{6.2706}74$	717 $\underline{6.27068539}35$	1101 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I
D01ARF	—	—	—	f-Werte I
D01AJF	651 $\underline{6.270685391}28$	735 $\underline{6.2706853918137}$	1407 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I
D01AKF	1525 $\underline{6.2706853}81$	1647 $\underline{6.2706853918137}$	1891 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I
ROMBRG	8193 $\underline{6.27068}05$	32769 (max. Anz.) $\underline{6.270685391}74$	—	f-Werte I
TRAPEX	273 $\underline{6.27}98$	419 $\underline{6.27068}95$	1633 $\underline{6.27068539181}22$	f-Werte I
QUADTRIP	347 $\underline{6.270}29$	627 $\underline{6.27068}94$	3018 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I
NCTRIP	363 $\underline{6.271}01$	702 $\underline{6.270685}11$	1741 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I
NCOPEN	390 $\underline{6.27}11$	725 $\underline{6.270685}71$	3528 $\underline{6.2706853918137}$	f-Werte I

Tabelle 5.15: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

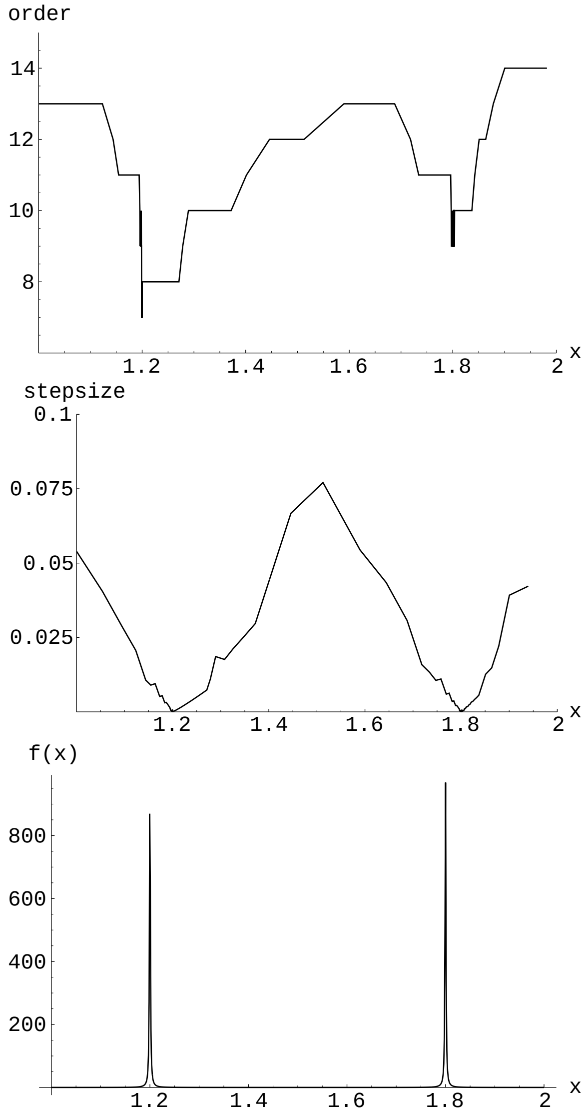

Abbildung 5.17: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 12), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

Beispiel Nr. 13 :

$$f(x) = \left(\frac{1}{\cosh(10\,x-2)}\right)^2 + \left(\frac{1}{\cosh(100\,x-40)}\right)^4 + \left(\frac{1}{\cosh(1000\,x-600)}\right)^6$$

$$I \approx \int_0^1 f(x)\,dx = 0.210\,802\,735\,500\,55$$

tol	10^{-3}	10^{-6}	10^{-14}	
D01AHF	185 $\underline{0.20}97$	265 $\underline{0.20}97$	313 $\underline{0.20}97$	f-Werte I
D01ARF	511 $\underline{0.20}97$	—	—	f-Werte I
D01AJF	231 $\underline{0.20}97$	273 $\underline{0.20}97$	525 $\underline{0.20}97$	f-Werte I
D01AKF	427 $\underline{0.20}97$	549 $\underline{0.20}97$	671 $\underline{0.20}97$	f-Werte I
ROMBRG	1025 $\underline{0.210}59$	16385 $\underline{0.210802735}37$	32769 (max. Anz.) $\underline{0.21080273550}070$	f-Werte I
TRAPEX	35 $\underline{0.1}96$	151 $\underline{0.20}97$	789 $\underline{0.21080273550}063$	f-Werte I
QUADTRIP	22 $\underline{0.1}96$	146 $\underline{0.20}97$	1179 $\underline{0.21080273550}066$	f-Werte I
NCTRIP	40 $\underline{0.20}97$	143 $\underline{0.20}97$	795 $\underline{0.21080273550055}$	f-Werte I
NCOPEN	42 $\underline{0.1}97$	130 $\underline{0.20}97$	924 $\underline{0.210802735500}529$	f-Werte I

Tabelle 5.16: Anzahl der Funktionsauswertungen, Näherung des Integralwertes, markierte richtige Ziffern bei vorgegebener Genauigkeitsforderung

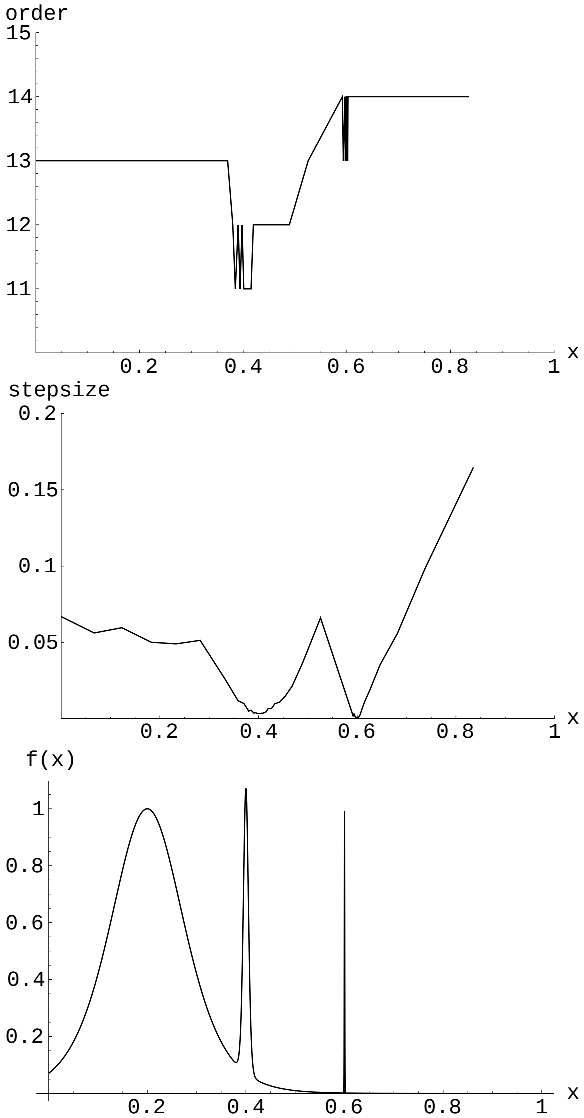

Abbildung 5.18: Ordnung, Schrittweite und Funktion (Beispiel Nr. 13), geforderte Genauigkeit $tol = 10^{-14}$ (NCTRIP)

5.3 Schlußbemerkungen und Ausblick

Betrachten wir die Gesamtheit der in den vorangegangenen 13 Beispielen vorgestellten Integranden, so bemerkt man, daß von allen verwendeten Verfahren einzig die Routinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN das Erreichen der vorgegebenen Genauigkeit garantieren. Da im Falle eines vorzeitigen Abbruchs eine Fehlermeldung (im Gegensatz zu den NAG-Routinen mit Angabe des Endpunktes des aktuellen Teilintervalls samt des bis zu diesem Punkt berechneten Integralwertes) ausgegeben wird, kann ein Benutzer eine Intervallunterteilung an der so lokalisierten Problemstelle vornehmen und erneut die Routinen für das verbliebene Teilintervall starten. Somit stellen die wenigen Abbruchfälle (Vgl. Tabellen 5.4, 5.5 und 5.13) keine wirkliche Einschränkung der soeben gemachten Aussage dar. Man kann nun anführen, daß andere Verfahren existieren, die speziell auf Probleme wie Unstetigkeitsstellen, starke Oszillation oder Peaks/Nadeln zugeschnitten sind. Bei ihnen hat der Benutzer, unter Kenntnis der Problemstellen, die Möglichkeit, diese vorweg der Routine mitzuteilen. Annahme war aber gerade die Unkenntnis des Benutzers über Lage und Art der Problemstelle, und Aufgabe der jeweils verwendeten Routine, diese selbstständig zu erkennen und entsprechend, z.B. durch Anhäufung von Stützstellen, oder, falls alle vorgesehenen Maßnahmen versagen, durch Abbruch mit Fehlermeldung zu reagieren. Es werden also, im Gegensatz zu den in vielen komerziellen Programmpaketen implementierten Vergleichsverfahren, nur die in dieser Arbeit konstruierten Routinen dem general purpose Anspruch gerecht und erweisen sich daher als die Besseren. Auch im Vergleich der Anzahl der Funktionsauswertungen sind die Routinen QUADTRIP, NCTRIP und NCOPEN in allen Beispielen den Vergleichsroutinen bei niedrigen ($tol = 10^{-3}$) und mittleren Genauigkeiten ($tol = 10^{-6}$) überlegen oder im Fall TRAPEX zumindest ebenbürtig. Es sind Einsparungen von etwa 30% bis 60%, in Einzelfällen sogar bis zu 90% der Funktionsauswertungen zu beobachten. Bei hoher Genauigkeitsforderung ($tol = 10^{-14}$) scheint sich dieses Verhalten zunächst nicht fortzusetzen, können die NAG-Vergleichsroutinen doch hier noch von für sie günstigen Integranden profitieren. Im allgemeinen Fall sind aber auch hier Einsparungen von etwa 30% der Funktionsauswertungen ein überzeugendes Argument zugunsten der in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren. Abschließend ist festzustellen, daß sich unsere Verfahren, die eine adaptive Schrittweitensteuerung in Kombination mit einer Ordnungssteuerung realisieren, gegenüber den heute in vielen Programmpaketen (z.B. NAG-Library, deren amerikanischen Pendant IMSL oder MATHEMATICA) enthaltenen general purpose Routinen durchsetzen und diese sowohl in Bezug auf Sicherheit (erreichte Genauigkeit) als auch Wirtschaftlichkeit (Anzahl der Funktionsauswertungen) übertreffen. Sie stellen somit eine echte Alternative zu diesen Verfahren dar und es ist sicherlich auch das begründete Interesse daraus abzuleiten, den in dieser Arbeit eingeschlagenen Weg weiter zu verfolgen. Findet man doch schon ähnliche Ansätze z.B. bei Favati [24]. Sie schlägt allerdings die Verwendung von Extrapolationsalgorithmen zur Variation der Ordnung vor. Weitere Anwendungsmöglichkeiten erschließen sich, wenn man von der Quadratur zur Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen übergeht. Entsprechende Ansätze, die noch ein genaueres Studium fordern, finden sich z.B. bei Dormand/Prince [15] oder Ranft [47]. Aber auch in der Quadratur sind noch nicht alle Möglichkeiten ausgeschöpft. So scheint hier unter anderem das Studium hermitescher Quadraturformeln zur Erzeugung weiterer Quadraturformeltripel interessant zu sein. Ein weiterer interessanter Aspekt könnte die Verwendung von neueren Programmiersprachen sein, die speziell auf das wissenschaftliche Rechnen zugeschnitten sind und somit zusätzliche Verbesserungen in Bezug auf Rechengenauigkeit und Rechenzeit erwarten lassen.

Literaturverzeichnis

[1] Alexander Apelblat: *Tables of Integrals and Series.*
Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main (1996)

[2] Jarle Berntsen, Terje O. Espelid: *Error Estimation in Automatic Quadrature Routines.*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.17, No.2, 233-252 (1991)

[3] Jarle Berntsen, Terje O. Espelid, Tor Sørevik: *On the subdivision strategy in adaptive quadrature algorithms.*
J. Comput. Appl. Math. 35, 119-132 (1991)

[4] D.G. Bettis: *Efficient Embedded Runge-Kutta Methods.*
Texas Institute for Computational Mechanics Report Series,
The University of Texas at Austin (1976)

[5] Helmut Brass: Quadraturverfahren.
Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen (1977)

[6] Bronstein-Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik.*
Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main (1979)

[7] Lothar Collatz: *Numerische Behandlung von Differentialgleichungen.*
Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg (1955)

[8] Philip J. Davis, Philip Rabinowitz: *Numerical Integration.*
Blaisdell Publishing Company, Waltham (Massachusetts), Toronto, London (1967)

[9] Peter Deuflhard, Andreas Hohmann: *Numerische Mathematik I.*
de Gruyter, Berlin, New York (1993)

[10] P. Deuflhard, H.J. Bauer: *A Note on Romberg Quadrature.*
Preprint Nr. 169, Inst. für angew. Math., Universität Heidelberg (1982)

[11] P.Deuflhard: Order and Stepsize Control in Extrapolation Methods. Numerische Mathematik 41, 399-422 (1983)

[12] J.R. Dormand, P.J. Prince: *A family of embedded Runge-Kutta formulae.*
Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.6, No.1, 19-26 (1980)

[13] J.R. Dormand, P.J. Prince: *High order embedded Runge-Kutta formulae.*
Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.7, No.1, 67-75 (1981)

[14] J.R. Dormand, P.J. Prince: *A reconsideration of some embedded Runge-Kutta formulae.*
Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.15, 203-211 (1986)

[15] J.R. Dormand, P.J. Prince: *Runge-Kutta Triples.*
Comp. and Maths. with Appls., Vol.12 A, No.9, 1007-1017 (1986)

[16] H. Engels: *Numerical Quadrature and Cubatur.*
Academic Press, London, New York, Toronto, Sydney, San Francisco (1980)

[17] H. Engels, B. Ley-Knieper, R.Schwelm: *Kronrod-Erweiterungen Wilfscher Quadraturformeln.*
RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, Bericht Nr. 64 (1991)

[18] H. Engels, B. Ley-Knieper: *Patterson-Erweiterungen von Wilf-Typ-Quadraturformeln.*
RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, Bericht Nr. 67 (1991)

[19] H. Engels, U. Karabek, T. Merschen: *Patterson-Erweiterungen spezieller Quadraturformeln.*
RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, Bericht Nr. 76 (1992)

[20] H. Engels: *Runge-Kutta Verfahren auf der Basis von Quadraturformeln.*
ISNM 19, 83-102 (1974)

[21] Paola Favati, Grazia Lotti, Francesco Romani: *Interpolatory Integration Formulas for Optimal Composition.*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.17, No.2, 207-217 (1991)

[22] Paola Favati, Grazia Lotti, Francesco Romani: *ALGORITHM 691, Improving QUADPACK Automatic Integration Routines.*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.17, No.2, 218-232 (1991)

[23] Paola Favati, Grazia Lotti, Francesco Romani: *Theoretical and practical efficiency measures for symmetric interpolatory quadrature formulas.*
BIT 34, 546-557 (1994)

[24] P. Favati, G. Fiorentino, G. Lotti, F. Romani: *Local error estimates and regularity tests for the implementation of double adaptive quadrature*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.23, No.1, 16-31 (1997)

[25] Erwin Fehlberg: *Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitprobleme.*
Computing 6, 61-71 (1970)

[26] Erwin Fehlberg: *Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle.*
Computing 4, 93-106 (1969)

[27] Erwin Fehlberg: *Classical fifth-, sixth-, seventh- and eighth- order Runge-Kutta formulas with stepsize control.*
NASA Tech. Rep. No.287, Huntsville, Alabama (1968)

[28] S. Filippi: *Unterlagen zur Numerischen Mathematik I und II.*
Umdruck Justus-Liebig-Universität Giessen (1987)

[29] S. Filippi, U. Buchacker: *Stepsize control for delay differential equations using a pair of formulae.*
J. Comput. Appl. Math. 26, No.3, 339-343 (1989)

[30] S. Filippi: *Konstruktion von expliziten Runge-Kutta-Formelpaaren nach dem Prinzip von Stimberg.*
Mitt. Math. Seminar Giessen 148, 39-55 (1981)

[31] S. Filippi: *Neue Hermitesche Quadraturformeln.*
Monatsh. Math. 71, 123-142 (1967)

[32] S. Filippi: *Eine einfache Integrationsformel hoher Genauigkeit.*
Elem. Math. 18, 61-63 (1963)

[33] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner: *Solving Ordinary Differental Equations I.*
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest (1987)

[34] Günther Hämmerlin, Karl-Heinz Hoffmann: *Numerische Mathematik.*
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo (1989)

[35] Günther Hämmerlin: *Zur numerischen Integration periodischer Funktionen.*
ZAMM 39, 80-82 (1959)

[36] Günther Hämmerlin: *Über ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler.*
Numerische Mathematik 5, 226-233 (1963)

[37] Günther Hämmerlin: *Über ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler; II. Ergänzungen und Möglichkeiten zur Verbesserung.*
Numerische Mathematik 7, 232-237 (1965)

[38] Eugene Isaacson, Herbert Bishop Keller: *Analysis of Numerical Methods.*
John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sydney (1966)

[39] Norbert Köckler: *Numerische Algorithmen in Softwaresystemen.*
B.G. Teubner, Stuttgart (1990)

[40] A.S. Kronrod: *Nodes and Weights of Quadrature Formulas.*
Consultants Bureau, New York (1965)

[41] V.I. Krylov: *Approximate calculation of integrals.*
transl. A.H. Stroud, The Macmillan company, New York, London (1962)

[42] T.N.L. Patterson: *The Optimum Addition of Points to Quadrature Formulae.*
Math. Comp. 22, 847-856 (1968)

[43] T.N.L. Patterson: *On Some Gauss and Lobatto Based Integration Formulae.*
Math. Comp. 22, 877-881 (1968)

[44] T.N.L. Patterson: *An Algorithm for Generating Interpolatory Quadrature Rules of the Highest Degree of Precision with Preassigned Nodes for General Weight Functions.*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.15, No.2, 123-136 (1989)

[45] T.N.L. Patterson: *Algorithm 672, Generation of Interpolatory Quadrature Rules of the Highest Degree of Precision with Preassigned Nodes for General Weight Functions.*
ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.15, No.2, 137-143 (1989)

[46] R. Piessens, E. deDoncker-Kapenga, C.W. Überhuber, D.K. Kahaner: *QUADPACK, a subroutine package for automatic integration.*
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo (1983)

[47] M.B. Ranft: *RKN Formelpaare und Formeltripel für* $y'' = f(x, y, y')$.
Dissertation, Justus-Liebig-Universität Gießen (1992)

[48] I. Robinson: *A Comparison of Numerical Integration Programs.*
Journal of Comp. and Appl. Math. 5, 207-233 (1979)

[49] Hans Rudolf Schwarz: *Numerische Mathematik.*
B.G. Teubner, Stuttgart (1986)

[50] L.F. Shampine: *Quadrature and Runge-Kutta Formulas.*
Applied Mathematics and Computation 2, 161-171 (1976)

[51] A.H. Stroud: *Numerical quadrature and solution of ordinary differential equations.*
Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin (1974)

[52] J.H. Verner: *Explicit Runge-Kutta methods with estimates of the local truncation error.*
SIAM Journal of Numer. Anal. 15, No.4, 772-790 (1978)

[53] Guido Walz: *Asymptotics and Extrapolation.*
Akademie Verlag GmbH Berlin (1996)

[54] Wolfram, Stephen: *Das Mathematica Buch, 3. Auflage.*
Addison Wesley Longman Verlag GmbH (1997)

[55] R. Zurmühl: *Praktische Mathematik für Ingenieure und Physiker.*
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1965)

[56] Daniel Zwillinger: *Handbook of integration.*
Jones and Bartlett Publishers, Boston, London (1992)

[57] The NAG Fortran Library Introductory Guide, Mark 16
NAG (The Numerical Algorithms Group Limited), Oxford (1993)