Computing 4, 304—315 (1969)

Fehlerabschätzungen für das Quadraturverfahren von Clenshaw und Curtis

Von

F. Locher, Tübingen

(Eingegangen am 18. Dezember 1968)

Zusammenfassung — Summary

Fehlerabschätzungen für das Quadraturverfahren von Clenshaw und Curtis. Das Quadraturverfahren von Clenshaw-Curtis benützt die Extremalstellen des Tschebyscheff-Polynoms $T_n(x)$ als Knoten. Durch Abschätzen des Interpolationsfehlers leiten wir bei ungerader Stützstellenzahl ziemlich scharfe Fehlerschranken her. Dabei zeigt es sich, daß ein modifiziertes (offenes) Verfahren, welches nur die inneren Extremalstellen von $T_n(x)$ als Knoten verwendet, günstigere Fehlerschranken liefert. Anschließend gewinnen wir mit Hilfe der algebraischen Approximationskonstanten verschiedene ableitungsfreie Fehlerschranken. Zum Schluß betrachten wir holomorphe Integranden; hier bietet uns die Tschebyscheff-Entwicklung der gegebenen Funktion einen günstigen Ausgangspunkt für Abschätzungen.

Error Estimates for the Quadrature Method of Clenshaw and Curtis. The Clenshaw-Curtis quadrature formula uses the extremal points of the Chebyshev polynomial $T_n(x)$ as nodes. By estimating the error of interpolation we derive rather sharp error estimates if the number of nodes is odd. Thereby it appears that a modified (open) method which uses only the inner extremal points of $T_n(x)$ as nodes gives better error estimates. In the following we gain some derivative-free estimates using the degree of approximation by algebraic polynomials. Finally we consider holomorphic integrands; here the Chebyshev series expansion of the given function offers a favourable starting point for estimates.

1. Einleitung

Von Clenshaw-Curtis (1960) wurde für die numerische Integration ein Verfahren vorgeschlagen, welches man als Interpolationsquadraturverfahren an den Tschebyscheff-Knoten $x_k^{(n)} = \cos \frac{k\pi}{n}$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$ deuten kann. Man verwendet folgende Quadraturmethode (vgl. Fraser-Wilson (1966))

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx = \int_{-1}^{1} L_n(f; x)\, dx + R_n(f), \tag{1.1}$$

wobei wir

$$L_n(f; x) = \sum_{i=0}^{n}{}'' \, b_i\, T_i(x) \tag{1.2}$$

mit

$$b_i = \sum_{k=0}^{n}{}'' \frac{2}{n} \cdot f(x_k^{(n)}) \cdot T_i(x_k^{(n)}) \tag{1.3}$$

gesetzt haben. (Die beiden Striche am Summenzeichen bedeuten, daß der erste und letzte Summand zu halbieren ist.) Aus (1.1) erhält man durch Integration

$$R_n(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n}{}'' a_k^{(n)} \cdot f(x_k^{(n)}), \tag{1.4}$$

wobei für gerades n

$$a_k^{(n)} = \frac{2}{n} \cdot \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}}{}'' \frac{(-2) \cdot T_{2i}(x_k^{(n)})}{4i^2 - 1} \tag{1.5}$$

gilt. Die Gewichte $a_k^{(n)}$ sind positiv (IMHOF (1963)).

Von verschiedenen Autoren wurden schon Fehlerabschätzungen für dieses Verfahren angegeben (CLENSHAW-CURTIS (1960), FRASER-WILSON (1966), CHAWLA (1968), O'HARA-SMITH (1968)). Die wichtigsten Hilfsmittel waren dabei TSCHEBYSCHEFF-Entwicklung des Integranden und Abschätzung des Interpolationsfehlers bei $(n+1)$-mal differenzierbaren und bei holomorphen Funktionen. Wir verschärfen durch eine Abschätzung des Interpolationsfehlers eine Fehlerschranke von FRASER-WILSON (1966). Außerdem leiten wir ableitungsfreie Fehlerschranken her, die ohne genaue Kenntnis der Ableitungen des Integranden angewendet werden können. Zum Schluß betrachten wir holomorphe Integranden und erhalten einige Verschärfungen der Ergebnisse von CHAWLA (1968).

2. Interpolationsfehler

Mit einer Interpolationsmethode haben FRASER-WILSON (1966) die Abschätzung

$$|R_n(f)| \leq \frac{1}{2^{n-1}(n+1)!} \cdot \max_{x \in [-1,1]} |f^{(n+1)}(x)| \tag{2.1}$$

hergeleitet. Wir verschärfen für gerades n diese Ungleichung mit einem Verfahren, wie es ähnlich auch bei der Untersuchung der NEWTON-COTES-Formeln verwendet wird (vgl. KRYLOV (1962), S. 79ff.).

Lemma 2.1. *Es sei $n > 2$, gerade. Dann wechselt die Funktion $\Omega(x) = 2^{-n+1} \cdot \int_0^x (t^2 - 1) \cdot U_{n-1}(t)\,dt$ im Intervall $[-1, 1]$ das Vorzeichen nicht, und es gilt*

$$\Omega(-1) = \Omega(1) = \begin{cases} \dfrac{4n}{2^{n+1} \cdot (n^2 - 4)}, \; \textit{falls } n \equiv 0 \ (4) \\ -\dfrac{4}{2^{n+1} n}, \; \textit{falls } n \equiv 2 \ (4) \end{cases}$$
$$= (-1)^{\frac{n}{2}} \cdot \frac{1}{2^{n-1} \cdot n} \cdot \{1 + o(1)\} \textit{ für } n \to \infty. \tag{2.2}$$

$$\int_{-1}^{1} \Omega(t)\,dt = 2^{-n} \cdot \left\{ -\frac{1}{(n+2) \cdot [(n+2)^2 - 1]} + \frac{2}{n \cdot (n^2 - 1)} \right.$$
$$\left. - \frac{1}{(n-2) \cdot [(n-2)^2 - 1]} + (-1)^{\frac{n}{2}} \cdot \left[\frac{2n}{n^2 - 4} + \frac{2}{n} \right] \right\} \tag{2.3}$$
$$= (-1)^{\frac{n}{2}} \cdot \frac{1}{2^{n-2} \cdot n} \cdot \{1 + o(1)\} \textit{ für } n \to \infty.$$

Beweis. Aus der Darstellung

$$w(x) = 2^{-n+1} \cdot (x^2 - 1) \cdot U_{n-1}(x) \tag{2.4}$$

folgt mit der Rekursionsformel für die TSCHEBYSCHEFF-Polynome zweiter Art $U_n(x)$

$$w(x) = 2^{-n-1} \cdot [U_{n+1}(x) - 2 \cdot U_n(x) + U_{n-1}(x)]. \tag{2.5}$$

Verwendet man nun die Relation $U_n(x) = \frac{1}{n+1} \cdot T'_{n+1}(x)$, so erhält man

$$\Omega(x) = 2^{-n-1} \cdot \left\{ \frac{T_{n+2}(x) + (-1)^{\frac{n}{2}}}{n+2} + \frac{2 \cdot [-T_n(x) + (-1)^{\frac{n}{2}}]}{n} \right.$$
$$\left. + \frac{T_{n-2}(x) + (-1)^{\frac{n}{2}}}{n-2} \right\}. \tag{2.6}$$

Nun gilt $|T_m(x)| \leqq 1$ für $x \in [-1, 1]$. Also gilt in diesem Intervall

$$\Omega(x) \begin{cases} \geqq 0 \text{ für } n \equiv 0 \ (4) \\ \leqq 0 \text{ für } n \equiv 2 \ (4) \end{cases}. \tag{2.7}$$

Aus (2.6) erhält man für $x = 1$ die Behauptung (2.2). Durch Integration folgt unter Verwendung von $\int_{-1}^{1} T_{2m}(t)\,dt = -\frac{2}{4m^2 - 1}$ die Beziehung

$$\int_{-1}^{1} \Omega(t)\,dt = 2^{-n-1} \cdot \left\{ -\frac{2}{(n+2) \cdot [(n+2)^2 - 1]} + \frac{4}{n \cdot (n^2 - 1)} \right.$$
$$\left. - \frac{2}{(n-2) \cdot [(n-2)^2 - 1]} + (-1)^{\frac{n}{2}} \cdot \left[\frac{2}{n+2} + \frac{4}{n} + \frac{2}{n-2} \right] \right\}. \tag{2.8}$$

Satz 2.2. *Die Funktion $f(x)$ sei $(n+2)$-mal stetig differenzierbar im Intervall $[-1, 1]$. Dann läßt sich der Fehler $R_n(f)$ darstellen in der Form*

$$R_n(f) = 2 \cdot \Omega(1) \cdot \frac{f^{(n+2)}(\xi_1)}{(n+2)!} - \frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!} \cdot \int_{-1}^{1} \Omega(t)\, dt \tag{2.9}$$

mit geeigneten Punkten $\xi_1, \xi_2 \in [-1, 1]$.

Beweis. Für den Fehler einer Interpolationsquadraturformel gilt (vgl. KRYLOV (1962), S. 79ff.)

$$R_n(f) = \int_{-1}^{1} w(t) \cdot [t, x_0, \ldots, x_n]\, dt, \tag{2.10}$$

wobei $[t, x_0, \ldots, x_n]$ die n-te dividierte Differenz an der Stelle t für den Integranden $f(t)$ und die Knoten $x_0, \ldots, x_n$ bezeichnet. Für $x \in [-1, 1]$ gilt bekanntlich

$$\frac{d}{dx}[x, x_0, \ldots, x_n] = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \tag{2.11}$$

mit geeignetem $\xi \in [-1, 1]$. Aus (2.10) erhalten wir durch partielle Integration

$$\begin{aligned} R_n(f) &= [t, x_0, \ldots, x_n]\, \Omega(t) \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} \frac{d}{dt}[t, x_0, \ldots, x_n]\, \Omega(t)\, dt \\ &= 2 \cdot \Omega(1) \frac{f^{(n+2)}(\xi_1)}{(n+2)!} - \int_{-1}^{1} \frac{d}{dt}[t, x_0, \ldots, x_n]\, \Omega(t)\, dt. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Wegen (2.7) können wir auf das Integral den Mittelwertsatz der Integralrechnung anwenden und erhalten die Behauptung (2.9).

In der Abschätzung (2.9) würde man gern die beiden i. a. verschiedenen Punkte ξ_1, ξ_2 durch einen einzigen Punkt ersetzen. Dies ließe sich z. B. erreichen, wenn die Koeffizienten von $f^{(n+2)}$ gleiches Vorzeichen hätten oder wenn der PEANO-Kern von einheitlichem Vorzeichen wäre. Die erste Bedingung ist sicher nicht erfüllt, wie man an (2.2) und (2.3) sieht. Aber auch der PEANO-Kern braucht nicht immer einheitliches Vorzeichen zu haben, wie das Beispiel $n = 4$ zeigt. Es gilt nämlich

$$R_4(f) = \frac{1}{5!} \cdot \int_{-1}^{1} K_4(t) \cdot f^{(6)}(t)\, dt \tag{2.13}$$

mit dem PEANO-Kern

$$K_4(t) = \begin{cases} \dfrac{(1-t)^6}{6} - \dfrac{(1-t)^5}{15} \text{ für } \dfrac{\sqrt{2}}{2} \leqslant t \leqslant 1 \\[2ex] \dfrac{(1-t)^6}{6} - \dfrac{(1-t)^5}{15} - \dfrac{8\left(\dfrac{\sqrt{2}}{2} - t\right)^5}{15} \text{ für } 0 \leqslant t \leqslant \dfrac{\sqrt{2}}{2} \\[2ex] \text{symmetrisch zu } t = 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

Hieraus erhält man $K_4(0) = \frac{1}{6} - \frac{1}{15} - \frac{\sqrt{2}}{2 \cdot 15} > 0$.

Andererseits gilt für $\frac{\sqrt{2}}{2} \leqslant t \leqslant 1$:

$$K_4(t) = \frac{(1-t)^5}{30} \cdot \{5 \cdot (1-t) - 2\} \leqslant 0. \tag{2.15}$$

Bemerkung 2.3. Man kann versuchen, die Abschätzung (2.9) durch die Wahl einer günstigeren Stammfunktion $\widetilde{\Omega}(x)$ von $w(x)$ zu verbessern. Der einfachste Fall $\widetilde{\Omega}(x) = \int\limits_{-1}^{x} w(t)\,dt$ scheidet aus; zwar verschwindet $\widetilde{\Omega}$ an den Intervallenden, aber $\widetilde{\Omega}(x)$ wechselt das Vorzeichen in $[-1, 1]$. Die optimale Stammfunktion $\Omega^*(x)$ erhält man durch $\Omega^*(x) = \Omega(x) - \Omega(x^{(n)}_{\frac{n}{2}-1})$. Denn $\Omega(x)$ nimmt in $x^{(n)}_{\frac{n}{2}-1}$ seinen Extremwert an, wie man durch Vergleich der relativen Extrema $\Omega(x_k^{(n)})$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$ erkennt. Man erhält so etwas günstigere Werte für die Konstanten in (2.9): Es sei $n \equiv 0$ (4). Dann gilt

$$\Omega^*(1) = 2^{-n} \cdot \left\{\frac{n}{n^2-4} \cdot \left[1 - \cos\frac{2\pi}{n}\right] - \frac{2}{n}\right\}, \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}\int\limits_{-1}^{1} \Omega^*(t)\,dt = 2^{-n} \cdot \Big\{&-\frac{1}{(n+2)\cdot[(n+2)^2-1]} + \frac{2}{n(n^2-1)} \\ &- \frac{1}{(n-2)\cdot[(n-2)^2-1]} - \frac{2}{n^2-4}\cdot\cos\frac{2\pi}{n} - \frac{2}{n}\Big\}.\end{aligned} \tag{2.17}$$

Für große Werte von n gewinnt man aber nur wenig gegenüber der Abschätzung (2.9).

Bemerkung 2.4. Im Sinne der Abschätzungsmethode

$$|R_n(f)| \leqslant \frac{1}{(n+1)!} \cdot \int\limits_{-1}^{1} |w(x)|\,dx \cdot \sup_{x\in[-1,1]} |f^{(n+1)}(x)| \tag{2.18}$$

ist das Polynom $w(x) = 2^{-n-1} \cdot U_{n+1}(x)$ optimal (TODD (1962)).

Das Verfahren von CLENSHAW-CURTIS ist nur um einen Faktor 2 ungünstiger als dieses optimale Verfahren (FRASER-WILSON (1966)). Die optimale Formel im Sinne unseres oben verwendeten Abschätzungsverfahrens erhält man mit den Nullstellen eines Polynoms $w(x) = P'_{n+2}(x)$ als Knoten, wobei $P_{n+2}(x)$ den folgenden Bedingungen genügt:

a) $P_{n+2}(-1) = P_{n+2}(1) = 0$.
b) $P_{n+2}(x) \geqslant 0$ für $|x| \leqslant 1$.
c) $P'_{n+2}(x_k) = 0$ für $n+1$ Punkte x_k: $-1 \leqslant x_0 < x_1 \ldots < x_n \leqslant 1$.
d) $\int\limits_{-1}^{1} P_{n+2}(x)\,dx = \text{Min}$.

Das Polynom $\bar{\Omega}(x) = 2^{-n-1} \cdot \int\limits_{-1}^{x} U_{n+1}(t)\,dt = 2^{-n-1} \cdot \frac{T_{n+2}(x) - 1}{n+2}$ genügt den Bedingungen a), b) und c). Da $\bar{\Omega}(x)$ außerdem gleichförmig zwischen 0 und $2^{-n-1} \cdot (n+2)^{-1}$ oszilliert, kommt $\bar{\Omega}(x)$ auch dem in d) geforderten Minimum sehr nahe. Für dieses Verfahren erhält man mit $\int\limits_{-1}^{1} \bar{\Omega}(x)\,dx = \frac{-2^{-n-1}}{n+2} \cdot \left\{2 + \frac{2}{(n+2)^2 - 1}\right\}$ die Fehlerabschätzung

$$R_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{2^n \cdot (n+2)! \cdot (n+2)} \cdot \left\{1 + \frac{1}{(n+2)^2 - 1}\right\} \tag{2.19}$$

für ein geeignetes $\xi \in [-1, 1]$. Mit dem üblichen Schluß, wie er von Fehlerabschätzungen für die NEWTON-COTES-Formeln bekannt ist, folgt aus (2.19), daß der PEANO-Kern nicht-negativ ist (vgl. KRYLOV (1962), S. 89f.).

Diese offene Formel erweist sich bei unserem Abschätzungsverfahren auch günstiger als die entsprechende geschlossene Formel mit den Nullstellen von $U_{n+1}\left(x \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}\right)$ als Knoten. Normiert man den Höchstkoeffizienten zu Eins, so erhält man

$$w(x) = \left[\frac{1}{2 \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}}\right]^{n+1} \cdot U_{n+1}\left(x \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}\right).$$

Die zugehörige Stammfunktion $\Omega(x)$ hat die Form

$$\begin{aligned} \Omega(x) &= \left(2 \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}\right)^{-n-1} \cdot \int\limits_{-1}^{x} U_{n+1}\left(t \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}\right) dt \\ &= 2^{-n-1} \cdot \left(\cos \frac{\pi}{n+2}\right)^{-n-2} \cdot \frac{T_{n+2}\left(x \cdot \cos \frac{\pi}{n+2}\right) + 1}{n+2}. \end{aligned} \tag{2.20}$$

$\Omega(x)$ wechselt das Vorzeichen in $[-1, 1]$ nicht und verschwindet für $x = \pm 1$. Wir erhalten dann wie oben für ein geeignetes $\xi \in [-1, 1]$

$$R_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{2^n \cdot \left(\cos \frac{\pi}{n+2}\right)^{n+2} \cdot (n+2)! \cdot (n+2) \cdot [(n+2)^2 - 1]}. \tag{2.21}$$

Man verliert also gegenüber der entsprechenden offenen Formel einen Faktor $\left(\cos \frac{\pi}{n+2}\right)^{-n-2}$.

Aus den obigen Abschätzungen ergeben sich auch Vergleichsmöglichkeiten mit den NEWTON-COTES-Formeln. Bei diesen Formeln hat für große (gerade) n der Koeffizient der $(n+2)$-ten Ableitung den asymptotischen Wert $\left(\frac{2}{n}\right)^{n+3} \cdot \frac{1}{n \cdot [\log n]^2}$ (HILDEBRAND (1956), S. 79). Der Quotient aus diesem Wert und dem Koeffizienten in (2.19) hat den asymptotischen

Wert $\left(\frac{4}{n}\right)^n \cdot 8 \cdot \frac{\sqrt{2\pi n}}{n \cdot [\log n]^2}$. Für $n = 10$ ist somit die Formel (2.19) um ungefähr einen Faktor 25 günstiger als die entsprechende NEWTON-COTES-Formel vom gleichen Genauigkeitsgrad.

3. Fehlerabschätzungen mit Hilfe von Approximationsgrößen

Die bisher hergeleiteten Abschätzungen enthalten höhere Ableitungen des Integranden. Es ist aber oft so, daß diese Ableitungen in einzelnen Punkten des Integrationsintervalls groß sind und auf diese Weise die Fehlerschranken sehr grob werden. Man hat sich deshalb in neuerer Zeit mit dem Problem beschäftigt, brauchbare Abschätzungen zu gewinnen, die ohne explizite Verwendung von Ableitungen auskommen. Für die vorliegende Quadraturmethode nach CLENSHAW-CURTIS ist die Abschätzung

$$|R_n(f)| \leqq \begin{cases} 4 \cdot E_n(f) & \text{für } n \equiv 1\ (2) \\ 4 \cdot E_{n+1}(f) & \text{für } n \equiv 0\ (2) \end{cases} \tag{3.1}$$

bekannt, wenn $E_n(f)$ die Minimalabweichung bei gleichmäßiger Approximation mit Polynomen vom Grad $\leqq n$ bezeichnet (vgl. LOCHER-ZELLER (1968), LOCHER (1968)). Für $(n+1)$-mal stetig differenzierbare Funktionen folgt nach Anwendung einer Abschätzung von $E_n(f)$ nach oben (vgl. MEINARDUS (1964), S. 78):

$$|R_n(f)| \leqq \frac{1}{2^{n-2}(n+2)!} \cdot \sup_{x \in [-1,1]} |f^{(n+1)}(x)|. \tag{3.2}$$

Dies bedeutet eine Vergröberung um einen Faktor 2 gegenüber der Abschätzung (3.2) bei FRASER-WILSON (1966) und um einen Faktor $\frac{n}{4}$ gegenüber unserer Fehlerschranke (2.9). Wir weisen aber darauf hin, daß die Approximationskonstante $E_n(f)$ meist numerisch viel leichter zugänglich ist als die höheren Ableitungen einer Funktion (vgl. EHLICH-ZELLER (1964), (1965)). Die Abschätzung (3.1) läßt sich noch vereinfachen und verschärfen.

a) Für die CLENSHAW-CURTIS-Formel gilt

$$R_n(f) = R_{2n}(f) + \sum_{k=0}^{2n} a_k^{(2n)} \cdot f(x_k^{(2n)}) - \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot f(x_k^{(n)}). \tag{3.3}$$

Wir setzen

$$\alpha_k^{(2n)} = \begin{cases} a_k^{(2n)} - a_{\frac{k}{2}}^{(n)}, & \text{falls } k \equiv 0\ (2) \text{ ist,} \\ a_k^{(2n)}, & \text{falls } k \equiv 1\ (2) \text{ ist,} \end{cases} \tag{3.4}$$

und erhalten

$$R_n(f) = R_{2n}(f) + \sum_{k=0}^{2n} \alpha_k^{(2n)} \cdot f(x_k^{(2n)}). \tag{3.5}$$

Dies ergibt die Fehlerschranke

$$|R_n(f)| \leqq 4 \cdot E_{2n+1}(f) + \left| \sum_{k=0}^{2n} \alpha_k^{(2n)} \cdot f(x_k^{(2n)}) \right|. \tag{3.6}$$

In vielen Fällen kann der Term $4 \cdot E_{2n+1}(f)$ vernachlässigt werden, so etwa falls $f(x)$ genügend glatt ist. In diesem Fall besagt die Relation (3.6), daß sich der Fehler $R_n(f)$ durch die Differenz zweier aufeinanderfolgender Näherungen abschätzen läßt.

b) In manchen Fällen interessiert nur die Größenordnung des Fehlers. Man möchte dann mit möglichst wenig Rechenaufwand zu brauchbaren Abschätzungen gelangen. Eine ziemlich scharfe und auf einfache Weise zu berechnende Schranke erhält man in der Form

$$|R_n(f)| \leqslant \frac{4}{n^2-1} \cdot |L_{n-1}(f)| + \varepsilon, \tag{3.7}$$

wo $L_{n-1}(f)$ die diskrete Approximationskonstante bei Approximation mit Polynomen von höchstens $(n-1)$-tem Grad an den TSCHEBYSCHEFF-Knoten $x_k^{(n)} = \cos \frac{k\pi}{n}$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$ bezeichnet. Die Größe $L_{n-1}(f)$ hat den numerischen Vorteil, daß sie auf einfache Weise aus den Funktionswerten, welche man zur Quadratur benützt, errechnet werden kann:

$$L_{n-1}(f) = \frac{1}{n} \cdot \left\{\frac{1}{2} \cdot f(1) + \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^k \cdot f(x_k) + \frac{1}{2} f(-1) \cdot (-1)^n\right\}. \tag{3.8}$$

Daß das Funktional $\widetilde{L}_{n-1}(f) := \frac{4}{n^2-1} \cdot |L_{n-1}(f)|$ die Größenordnung von $|R_n(f)|$ hat, läßt sich auf folgende Weise motivieren. Wir vergleichen das Verfahren von CLENSHAW-CURTIS mit der Methode von LOBATTO. Dieses Quadraturverfahren vom GAUSS-Typ hat bei Verwendung von $n+1$ Knoten den Genauigkeitsgrad $2n-1$ (vgl. KRYLOV (1962), S. 170 ff.). Die Knoten der LOBATTO-Formel liegen in der Nähe der Knoten des CLENSHAW-CURTIS-Verfahrens (vgl. Tabelle 1). Es gilt

$$R_n(f) = \widetilde{R}_n(f) + \sum_{k=0}^{n} \widetilde{a}_k^{(n)} \cdot f(\widetilde{x}_k^{(n)}) - \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot f(x_k^{(n)}). \tag{3.9}$$

(Die Tilde deutet an, daß es sich um Größen handelt, die zum LOBATTO-Verfahren gehören.)

Tabelle 1. $(n = 16)$

k	$x_k^{(n)}$	$\widetilde{x}_k^{(n)}$	$\widetilde{x}_k - x_k$	$a_k^{(n)}$	$\widetilde{a}_k^{(n)}$	$\widetilde{a}_k - a_k$
0	− 1.0000	− 1.0000	0.0000	0.0039	0.0074	0.0035
1	− 0.9808	− 0.9731	0.0077	0.0374	0.0449	0.0075
2	− 0.9239	− 0.9109	0.0130	0.0755	0.0792	0.0037
3	− 0.8315	− 0.8157	0.0158	0.1089	0.1106	0.0017
4	− 0.7071	− 0.6910	0.0161	0.1390	0.1380	− 0.0010
5	− 0.5556	− 0.5414	0.0142	0.1632	0.1604	− 0.0028
6	− 0.3827	− 0.3722	0.0105	0.1815	0.1777	− 0.0038
7	− 0.1951	− 0.1895	0.0056	0.1925	0.1872	− 0.0053
8	− 0.0000	0.0000	0.0000	0.1964	0.1907	− 0.0057

Es sei $P_{n-1}(x)$ das Polynom bester Approximation für $f(x)$ in den Knoten $x_k^{(n)}$. Dann gilt

$$f(x_k^{(n)}) - P_{n-1}(x_k^{(n)}) = (-1)^k L_{n-1}(f) \quad (k = 0, 1, \ldots, n). \tag{3.10}$$

Da die Knoten $\tilde{x}_k^{(n)}$ in der Nähe der Punkte $x_k^{(n)}$ liegen, gilt

$$f(\tilde{x}_k^{(n)}) - P_{n-1}(\tilde{x}_k^{(n)}) = (-1)^k \cdot L_{n-1}(f) + \varepsilon_k. \tag{3.11}$$

Der Fehler ε_k kann meist vernachlässigt werden, da die Funktion $f(x) - P_{n-1}(x)$ in der Nähe von $x_k^{(n)}$ aufgrund der Alternantenbedingung ein relatives Extremum besitzt. Änderungen im Argument bewirken dann nur kleine Änderungen im Funktionswert. Aus (3.9) erhalten wir

$$\begin{aligned} R_n(f) = \tilde{R}_n(f) &+ \sum_{k=0}^{n} \tilde{a}_k^{(n)} \cdot (-1)^k \cdot L_{n-1}(f) + \sum_{k=0}^{n} \tilde{a}_k^{(n)} \cdot \varepsilon_k \\ &- \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot (-1)^k \cdot L_{n-1}(f) \end{aligned} \tag{3.12}$$

und hieraus bei Vernachlässigung des Terms $\sum\limits_{k=0}^{n} \tilde{a}_k^{(n)} \cdot \varepsilon_k$

$$\begin{aligned} |R_n(f)| \leqslant |\tilde{R}_n(f)| &+ \left\{ \left| \sum_{k=0}^{n} \tilde{a}_k^{(n)} \cdot (-1)^k \right| \right. \\ &+ \left. \left| \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot (-1)^k \right| \right\} \cdot |L_{n-1}(f)|. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} |R_n(f)| \leqslant |\tilde{R}_n(f)| &+ \left| \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot (-1)^k \cdot L_{n-1}(f) \right| \\ + \left| \sum_{k=0}^{n} \{\tilde{a}_k^{(n)} - a_k^{(n)}\} \cdot (-1)^k L_{n-1}(f) \right| &+ \left| \sum_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot (-1)^k \cdot L_{n-1}(f) \right|. \end{aligned} \tag{3.14}$$

Der Term $\left| \sum (-1)^k \cdot \{\tilde{a}_k^{(n)} - a_k^{(n)}\} \right|$ ist klein gegenüber $\left| \sum\limits_{k=0}^{n} a_k^{(n)} \cdot (-1)^k \right|$ und kann meist vernachlässigt werden. Wir erhalten so die Relation (3.7). Diese Abschätzung ist um den Faktor $\frac{2}{n^2 - 1}$ besser als die Abschätzung (4.7) bei FRASER-WILSON (1966) und gibt, wie etwa die dort angegebenen Beispiele 1—3 in Tabelle 2 zeigen, für genügend glatte Funktionen den Fehler ziemlich gut wieder.

4. Holomorphe Funktionen

Im folgenden betrachten wir Funktionen, welche sich vom Intervall $[-1, 1]$ aus holomorph ins Komplexe fortsetzen lassen. Dann gibt es Ellipsen $\mathfrak{E}_q$ mit der Halbachsensumme $q = a + b$ und Brennpunkten

1, — 1 so, daß $f(x)$ im Innern von $\mathfrak{E}_q$ holomorph und in der abgeschlossenen Ellipse $\overline{\mathfrak{E}}_q$ stetig ist. Für Funktionen dieses Typs hat CHWALA (1968) die Fehlerabschätzung

$$| R_n(f) | \leqslant \left(\frac{16 \cdot n^2}{4 \cdot n^2 - 1}\right) \cdot \frac{M(q)}{(q^2 - 1) \cdot (q^n - q^{-n})} \tag{4.1}$$

(wo $M(q) = \sup\limits_{z \in \mathfrak{E}_q} | f(z) |$) hergeleitet.

Nach einer Abschätzung von BERNSTEIN (vgl. MEINARDUS (1964), S. 84) gilt für Funktionen obigen Typs

$$E_n(f) \leqslant \frac{2 \cdot M(q)}{q^n \cdot (q - 1)}. \tag{4.2}$$

Aus (3.1) erhalten wir somit

$$| R_n(f) | \leqslant \begin{cases} \dfrac{8 \cdot M(q)}{q^n \cdot (q - 1)} & \text{für } n \equiv 1\ (2) \\ \dfrac{8 \cdot M(q)}{q^{n+1} \cdot (q - 1)} & \text{für } n \equiv 0\ (2). \end{cases} \tag{4.3}$$

Trotz ihrer einfachen Herleitung ist diese Abschätzung nur um ungefähr einen Faktor 2 gröber als (4.1). Eine günstigere Fehlerschranke kann man erhalten, wenn man von der TSCHEBYSCHEFF-Entwicklung der Funktion $f(x)$ ausgeht. Bekanntlich läßt sich unter den obigen Voraussetzungen $f(x)$ in eine gleichmäßig konvergente Reihe nach TSCHEBYSCHEFF-Polynomen entwickeln:

$$f(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \cdot T_\nu(x). \tag{4.4}$$

Daraus folgt für $n \equiv 0\ (2)$

$$R_n(f) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \cdot R_n(T_\nu) = \sum_{\nu=\frac{n}{2}+1}^{\infty} \alpha_{2\nu} \cdot R_n(T_{2\nu}). \tag{4.5}$$

Für $R_n(T_{2\nu})$ erhalten wir

$$| R_n(T_{2\nu}) | \leqslant \left| \int_{-1}^{1} T_{2\nu}(x)\, dx \right| + \left| \sum_{k=0}^{n} a_k \cdot T_{2\nu}(x_k) \right| \leqslant \frac{2}{4\nu^2 - 1} + 2. \tag{4.6}$$

Somit ergibt sich

$$| R_n(f) | \leqslant \sum_{\nu=\frac{n}{2}+1}^{\infty} \left\{ \frac{2}{4\nu^2 - 1} + 2 \right\} \cdot | \alpha_{2\nu} |. \tag{4.7}$$

Die Koeffizienten α_ν lassen sich abschätzen in der folgenden Weise (vgl. MEINARDUS (1964), S. 84):

$$| \alpha_\nu | \leqslant \frac{2 \cdot M(q)}{q^\nu}. \tag{4.8}$$

Damit erhalten wir

$$
\begin{aligned}
| R_n(f) | &\leqslant 2 \cdot M(q) \cdot \sum_{\nu=\frac{n}{2}+1}^{\infty} \left\{ \frac{2}{4\nu^2 - 1} + 2 \right\} \cdot q^{-2\nu} \\
&< 2 \cdot \left\{ \frac{2}{(n+2)^2 - 1} + 2 \right\} \cdot \frac{M(q)}{q^n \cdot (q^2 - 1)} .
\end{aligned} \tag{4.9}
$$

Für festes q ist diese Fehlerschranke bezüglich n asymptotisch gleich der oben zitierten Fehlerschranke von CHAWLA (1968).

Diese Abschätzung ist noch verbesserungsfähig. Integriert man die TSCHEBYSCHEFF-Polynome mit dem Verfahren von CLENSHAW-CURTIS, so hat der Fehler, wie eine einfache Rechnung zeigt, die Größe

$$
R_n(T_{2\nu}) = -\frac{2}{4\nu^2 - 1} + \frac{2}{4m^2 - 1}, \tag{4.10}
$$

falls $2\nu = 2\varrho n \pm 2m$ mit $0 \leqslant 2m \leqslant n$. Damit erhalten wir

$$
\begin{aligned}
R_n(f) = \sum_{\varrho=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\frac{n}{2}-1} \Bigg\{ & \alpha_{2\varrho n - 2m} \cdot \left[-\frac{2}{4(\varrho n - m)^2 - 1} + \frac{2}{4m^2 - 1} \right] \\
& + \alpha_{2\varrho n + 2m} \cdot \left[-\frac{2}{4(\varrho n + m)^2 - 1} + \frac{2}{4m^2 - 1} \right] \Bigg\} .
\end{aligned} \tag{4.11}
$$

Für Funktionen des oben behandelten Typs gilt wegen (4.8)

$$
\begin{aligned}
| R_n(f) | \leqslant \frac{2 \cdot M(q)}{q^{n+2}} & \\
\sum_{\varrho=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\frac{n}{2}-1} \Bigg\{ & \frac{1}{q^{2\varrho n - 2m - (n+2)}} \cdot \left[-\frac{2}{4(\varrho n - m)^2 - 1} + \frac{2}{4m^2 - 1} \right] \\
& + \frac{1}{q^{2\varrho n + 2m - (n+2)}} \cdot \left[-\frac{2}{4(\varrho n + m)^2 - 1} + \frac{2}{4m^2 - 1} \right] \Bigg\} .
\end{aligned} \tag{4.12}
$$

In der Doppelsumme erhält man den einzigen von q freien Term für $\varrho = 1$ und $m = \frac{n}{2} - 1$. Dieser hat die Größe

$$
s(n) := \frac{-2}{(n+2)^2 - 1} + \frac{2}{(n-2)^2 - 1} = \frac{8}{n^3} \cdot \{1 + o(1)\} \text{ für } n \to \infty. \tag{4.13}
$$

Alle anderen Summanden sind von der Form $c_\nu(n) \cdot q^{-2\nu}$, und die Koeffizienten $c_\nu(n)$ genügen der Abschätzung

$$
| c_\nu(n) | \leqslant 2 + \frac{2}{4n^2 - 1} < 2{,}2 \text{ für } n \geqslant 2. \tag{4.14}
$$

Die Reihen in (4.12) lassen sich also abschätzen durch

$$
s(n) + q^{-2} \cdot 2{,}2 \cdot \sum_{\nu=0}^{\infty} q^{-2\nu} = s(n) + \frac{2{,}2}{q^2 - 1} .
$$

Wir erhalten somit

$$| R_n (f) | \leqslant \frac{2 M (q)}{q^{n+2}} \cdot \left\{ s (n) + \frac{2{,}2}{q^2 - 1} \right\}. \tag{4.15}$$

Im Einzelfall lassen sich bei gegebenem n die Größen $c_\nu (n)$ noch schärfer abschätzen (insbesondere für kleine ν, wo $c_\nu (n)$ ungefähr den Wert $s (n)$ hat). So kann man etwa für $n = 10$ die Schranke

$$| R_{10} (f) | \leqslant \frac{2 \cdot M (q)}{q^{12}} \cdot 2 \cdot s (10) \text{ für } q \geqslant 3 \tag{4.16}$$

erhalten. Dies bedeutet eine Verbesserung um einen Faktor 50 gegenüber (4.9).

Literatur

[1] Chawla, M. M.: Error Estimates for the Clenshaw-Curtis Quadrature. Math. Comp. **22**, 651–656 (1968).

[2] Clenshaw, C. W., and A. R. Curtis: A Method for Numerical Integration on an Automatic Computer. Num. Math. **2**, 197–205 (1960).

[3] Ehlich, H., und K. Zeller: Schwankung von Polynomen zwischen Gitterpunkten. Math. Z. **86**, 41–44 (1964).

[4] Ehlich, H., und K. Zeller: Numerische Abschätzung von Polynomen. ZAMM **45**, T 20–22 (1965).

[5] Fraser, W., and M. W. Wilson: Remarks on the Clenshaw-Curtis Quadrature Scheme. SIAM Rev. **8**, 322–327 (1966).

[6] Hildebrand, F. B.: Introduction to Numerical Analysis. New York: McGraw-Hill. 1956.

[7] Imhof, J. P.: On the Method for Numerical Integration of Clenshaw and Curtis. Num. Math. **5**, 138–141 (1963).

[8] Krylov, V. J.: Approximate Calculation of Integrals. New York: The MacMillan Company. 1962.

[9] Locher, F.: Approximationsverfahren zur Gewinnung von ableitungsfreien Schranken für Quadraturfehler. Diss. Tübingen (1968).

[10] Locher, F., und K. Zeller: Approximationsgüte und numerische Integration. Math. Z. **104**, 249–251 (1968).

[11] Meinardus, G.: Approximation von Funktionen und ihre numerische Behandlung. Berlin-Göttingen-Heidelberg-New York: Springer-Verlag. 1964.

[12] O'Hara, H., and F. J. Smith: Error Estimation in the Clenshaw-Curtis Quadrature Formula. Comp. J. **11**, 213–219 (1968).

[13] Todd, J.: The Constructive Theory of Functions. — Survey of Numerical Analysis, J. Todd ed., 119–159. New York: McGraw-Hill. 1962.

Dr. Franz Locher
Mathematisches Institut
der Universität Tübingen
D-74 Tübingen, Wilhelmstraße 7
Bundesrepublik Deutschland