# MATHEMATISCHES FORSCHUNGSINSTITUT OBERWOLFACH

T a g u n g s b e r i c h t 41/1978

## Numerische Integration

1.10. - 7.10.1978

Erstmalig fand in Oberwolfach eine Tagung über "Numerische Integration" statt, die von G. Hämmerlin (München) geleitet wurde.

Die Aktualität des Themas zeigte sich in dem großen Interesse, das dieser Tagung entgegengebracht wurde. Mit Teilnehmern aus 10 Ländern und 31 Vorträgen kam ein sehr anregender Austausch wissenschaftlicher Ideen und Ergebnisse zustande, der die ganze Breite des Themas der Tagung widerspiegelte.

Bei der Zusammenstellung des Vortragsplans wurde versucht, die einzelnen Vortragsthemen nach gemeinsamen Gesichtspunkten zu ordnen und Schwerpunkte zu bilden. Einen solchen Schwerpunkt stellt gegenwärtig das Studium bester Quadraturformeln dar; weiter zu nennen sind Untersuchungen zur numerischen Integration singulärer Integrale sowie über Methoden der Fehlerabschätzung. Mehrere Vorträge befaßten sich mit Gaußschen Quadraturformeln. Die numerische Integration in n Dimensionen wurde ebenfalls mehrfach behandelt, insbesondere auch hier die Fehlerabschätzung. Einige Vorträge, die Randgebiete ansprachen - Integralgleichungen, Differentialgleichungen, Komplexitätsfragen - rundeten die Thematik ab. Schließlich sollte noch die gemeinsame, ergiebige Diskussion erwähnt werden, in der offene Probleme aus dem Bereich der numerischen Integration besprochen wurden.

Gefördert durch
DFG Deutsche Forschungsgemeinschaft

Obwohl sich auch während dieser Tagung das Wetter nicht von der freundlichsten Seite gezeigt hat, konnte doch der beliebte Nachmittagsausflug durchgeführt werden. Er führte diesmal vom Freyersberg über den Glaswaldsee zum Gasthof "Palmspring" bei Bad Peterstal. Wie immer waren es aber auch bei dieser Tagung wieder die hervorragende Gastlichkeit des Oberwolfacher Instituts, die gute Betreuung durch die dortigen Mitarbeiter und die angenehme Atmosphäre des Hauses, die zum Gelingen besonders beitrugen. Dafür sei allen Angehörigen des Instituts herzlich gedankt.

Teilnehmer

J. Albrecht (Clausthal)
C.T.H. Baker (Manchester, U.K.)
D.L. Barrow (College Station, USA)
H. Berens (Erlangen)
B.D. Bojanov (Sofia, Bulgarien)
H. Brakhage (Kaiserslautern)
H. Braß (Braunschweig)
F.-J. Delvos (Siegen)
E. de Doncker (Heverlee, Belgien)
H. Engels (Aachen)
H. Esser (Aachen)
H. Förster (St. Augustin)
W. Forst (Dortmund)
L. Gatteschi (Turin, Italien)
W. Gautschi (Lafayette, USA)
A. Haegemans (Heverlee, Belgien)
G. Hämmerlin (München)
G. Heindl (München)
K. Jetter (Hagen)
G.V. Kelly (Cork, Irland)
D. Kershaw (Lancaster, U.K.)
J. Kofron (Prag, Tschechoslowakei)

R. Kreß (Göttingen)
G. Lange (Clausthal)
F. Locher (Hagen)
J.N. Lyness (Argonne, USA)
J. Meinguet (Louvain-la-Neuve, Belgien)
H.M. Möller (Hagen)
G. Monegato (Turin, Italien)
G. Opfer (Hamburg)
T.N.L. Patterson (Belfast, U.K.)
A. Pinkus (Haifa, Israel)
W. Richert (München)
E. Schäfer (München)
W. Schempp (Siegen)
G. Schmeißer (Erlangen)
H.J. Schmid (Erlangen)
A. van der Sluis (Utrecht, Niederlande)
A. Spence (Bath, U.K.)
H. Strauß (Erlangen)
E. Wagenführer (Münster)
H. Werner (Münster)
K. Zeller (Tübingen)

## Vortragsauszüge

**J. ALBRECHT: Zur Fehlerabschätzung von Davis-Hämmerlin**

Im Anschluß an die Arbeit von Ph. Davis hat G. Hämmerlin – etwa unter Verwendung der Schrittweite $h_n=2^{-n}$ $(n\in\mathbb{N})$ – z. Bsp. für die Trapezregel $T_n[f]$ und für die Simpsonregel $S_n[f]$ die Fehlerabschätzungen

$$\left|T_n[f]-\int_{-1}^{+1}f(x)dx\right|\le\frac{4}{3}\left(\frac{h_n}{r}\right)^2 M(r)\frac{1+k^4}{(1-k^4)^3}$$

und

$$\left|S_n[f]-\int_{-1}^{+1}f(x)dx\right|\le\frac{4}{15}\left(\frac{h_n}{r}\right)^4 M(r)\,\frac{1+18k^4+42k^8+18k^{12}+k^{16}}{(1-k^4)^7}$$

angegeben; dabei ist $1<r<\infty$, $f(z)$ holomorph in $|z|\le r$, $M(r)=\operatorname*{Max}_{|z|=r}|f(z)|$, $k=\frac{1}{r}$. Mit $k_i=\frac{x_i}{r}$ $(i=1,2,\ldots,2^n)$, wobei $x_i=ih_n$ $(i=-2^n,-(2^n-1),\ldots,-1,0,+1,\ldots,2^n-1,2^n)$, gilt auch

$$\left|T_n[f]-\int_{-1}^{+1}f(x)dx\right|\le\frac{4}{3}\left(\frac{h_n}{r}\right)^2 M(r)\underbrace{\frac{2}{\pi}\,\frac{1}{2^{n-1}}\sum_{i=1}^{2^{n-1}}\frac{2E(k_{2i})-(1-k_{2i}^2)K(k_{2i})}{(1-k_{2i}^2)^2}}_{\Sigma_n}$$

und

$$\left|S_n[f]-\int_{-1}^{+1}f(x)dx\right|\le\frac{4}{15}\left(\frac{h_n}{r}\right)^4 M(r)\underbrace{\frac{2}{\pi}\,\frac{1}{2^n}\sum_{i=1}^{2^n}\frac{8(1+k_i^2)E(k_i)-(5+3k_i^2)(1-k_i^2)K(k_i)}{3(1-k_i^2)^4}}_{\Sigma_n}$$

Die Folgen $\{\Sigma_n\}$ konvergieren monoton fallend gegen

$$\frac{2}{\pi}\,\frac{E(k)}{1-k^2}$$

und

$$\frac{2}{\pi}\,\frac{(15-11k^2+4k^4)E(k)-2(3-k^2)(1-k^2)K(k)}{9(1-k^2)^3};$$

diese Grenzwerte sind für

$0,70\ldots<k<1$ (Trapezregel)

und

$0,50\ldots<k<1$ (Simpsonregel)

kleiner als die entsprechenden Faktoren der Fehlerschranken von Hämmerlin, bei der Simpsonregel gilt dies für $0,69\ldots<k<0,82\ldots$ bereits von $\Sigma_3$ an.

Aus der Euler-Mac Laurin'schen Formel lassen sich weitere Abschätzungen, die für genügend großes n schärfer sind, gewinnen.

C.T.H. BAKER: Numerical Integration in the Treatment of Integral Equations

The application of numerical integration in the treatment of integral equations frequently assumes a different purpose than in the problem of quadrature; in the former problem the integrand may be unknown whilst in the latter problem the integrand is given. Questions relating to the application of quadrature to the solution of integral equations will be discussed and motivation for the interest will be presented.

D.L. BARROW: Asymptotic Properties of Optimal Quadrature Formulas

Let $t \in C'[0,1]$ satisfy $t' \geq \delta > 0$, $t(0)=0$, $t(1)=1$, and let $t_i = t(i/N)$, $i=0, 1,\ldots,N$. Let $r$ and $k$ be integers, $0 \leq r < k$, and let $\varphi \in C[0,1]$. Consider quadrature formulas of the form

$$Q_N(f) = \sum_{j=0}^{r} (A_j f^{(j)}(0) + B_j f^{(j)}(1)) + \sum_{i=1}^{N-1} C_i f(t_i) \approx$$

$$I(f) = \int_0^1 f(x)\varphi(x)dx,$$

exact for polynomials f of degree at most k-1, having Peano kernel $K_N$ with minimum $L_2$ norm. Using results from [1], we prove the following asymptotic properties of the formulas $Q_N$:

<u>Theorem</u> 1. $\lim_{N\to\infty} N^k \|K_N\| = (|C_k| \int_0^1 \varphi^2(t(x))(t'(x))^{2k+1}dx)^{1/2}$,
where $C_k = B_{2k}/(2k)!$ and $B_{2k}$ is the 2k-th Bernoulli number.

<u>Theorem</u> 2. If $f \in C^{2k}[0,1]$ and $r = k-1$, then
$$\lim_{N\to\infty} N^{2k} E_N(f) = -C_k \int_0^1 \varphi\, (t(x)) f^{(2k)}(t(x))(t'(x))^{2k+1}dx,$$
where $E_N = I - Q_N$. Now let $K_N$ denote the minimum norm Peano kernel for $Q_N$ where the knots $\{t_i\}$ are variable.

<u>Theorem</u> 3. $\lim_{N\to\infty} N^k \|K_N\| = \sqrt{|C_k|} \; ( \int_0^1 |\varphi(\tau)|^\sigma d\tau)^{1/\sigma}$, where $\sigma = (k+1/2)^{-1}$.

Furthermore, the knots of $K_N$ will be (asymptotically) distributed with density proportional to $|\varphi(\tau)|^\sigma$.

[1] D. L. Barrow and P. W. Smith, "Asymptotic properties of best $L_2[0,1]$ approximation by splines with variable knots," to appear, Quart. Appl. Math.

B.D. BOJANOV: <u>Uniqueness of Optimal Quadrature Formulas</u>

Let $(v_k)_1^n$ be arbitrary fixed natural numbers satisfying the inequalities $1 < 2\left[(v_k+1)/2\right] \le r$, k=1,...,n. We prove that there exists a unique optimal quadrature formula in the class $W_q^r[a,b]$ ( $1 < q < \infty$ ) among all quadratures of the form

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{r-1} A_j f^{(j)}(a) + \sum_{j=0}^{r-1} B_j f^{(j)}(b) + \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=0}^{v_k-1} a_{ki} f^{(i)}(x_k)$$

with free nodes $(x_k)_1^n$, $a < x_1 < \dots < x_n < b$, of fixed multiplicities $(v_k)_1^n$ respectively.

H. BRAKHAGE: Speicherkomplexität von Diskretisierungsverfahren

Die Ausgangsfragestellung lautet: Wieviel Information benötigt man bei Näherungsformeln eines gegebenen Typs über die gegebene Funktion, um eine gegebene Genauigkeit zu erreichen. Dabei ist die Anzahl der benötigten Bits bei binärer Kodierung das Maß für die Information. Die Fragestellung wird präzisiert und mit Hilfe der Theorie der $\epsilon$-Entropie werden generelle untere Schranken angegeben. Für konkrete Typen von Näherungsformeln werden obere Schranken hergeleitet und mit den unteren Schranken verglichen. Das Ziel dieser Untersuchungen ist es, für die Beurteilung von Näherungsverfahren die Methoden der Komplexitätstheorie anwendbar zu machen.

H. BRAß: Der Wertebereich des Trapezverfahrens

$$R_n[f] := \int_0^1 f(x)\,dx - \frac{1}{n}\left\{\frac{1}{2}f(0) + \sum_{\nu=1}^{n-1} f\left(\frac{\nu}{n}\right) + \frac{1}{2}f(1)\right\}$$

bezeichne den Rest beim Trapezverfahren. Es soll die Frage diskutiert werden, welche Folgen $(R_1[f], R_2[f], \ldots)$ überhaupt vorkommen können. Nicht jede Nullfolge kann vorkommen, denn es gilt

Satz 1 Für jedes (Riemann-integrierbare) f ist

$$\sum_{\nu=0}^{n} (-1)^\nu R_{2^\nu}[f] = O(1).$$

Andererseits hat man

Satz 2 Ist $\rho_n$ eine Zahlenfolge mit $\rho_n = O(n^{-1-\epsilon})$, $\epsilon > 0$, so existiert ein stetiges f mit $R_n[f] = \rho_n$.

Zur Auffindung von f mit langsamer fallenden $R_n[f]$ bieten sich die Lipschitz-Klassen an. Jedoch hat man

Satz 3 Ist $f \in \operatorname{Lip} \alpha$ $(\alpha > \frac{1}{2})$ so ist

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^\beta |R_n[f]| < \infty$$

für jedes $\beta < \alpha - \frac{1}{2}$.

E. de DONCKER: Error Functional Expansions for n-dimensional Quadrature

At first we introduce the (one-dimensional) $\mu$-panel offset trapezoidal rule for non-integer values of $\mu$, and discuss the asymptotic series describing the error functional. The theory can then be extended to quadrature over the n-dimensional simplex; the basic rules being obtained by an iterated use of one-dimensional rules. From their error expansion we see that these rules can be used as basic rules for Romberg extrapolation. Using extrapolation, quadrature rules for the simplex can be generated which are the optimum so far uncovered in the sense of requiring fewest function values to obtain a specific polynomial degree.

H. ENGELS: Die numerische Bestimmung Gauß'scher Quadraturformeln $Q_n f$ für großes n

Die Bestimmung der Stützstellen (und Gewichte) Gauß'scher Quadraturformeln $Q_n f$ ist ein numerisches Problem, dessen Kondition mit wachsendem n zunehmend schlechter wird. Andererseits besteht Bedarf für Formeln mit großem n, etwa n=500 oder n=1000.
Es werden asymptotische Entwicklungen der Stützstellen von $Q_n f$ nach Potenzen von $\frac{1}{n(n+1)}$ angegeben, aus denen mit großer Genauigkeit die Stützstellen berechnet werden können und zwar ad hoc für beliebiges n ohne Kenntnis der Stützstellen für kleineres n. (Z.B. bei n=256 mindestens 13 richtige Dezimalen für alle Stützstellen von $Q_{256} f$.)
Indem man geeignete Eigenschaften der Legendre-Polynome ausnutzt, kann man bei bekannten Stützstellen unmittelbar die zugehörigen Gewichte berechnen.

H. ESSER: Konvergenz im Mittel der Lagrange Interpolation bei uneigentlich Riemann-Stieltjes integrierbaren Funktionen

Sei $[a,b]$ ein endliches Intervall und $d\alpha(x)$ eine Belegung.
Es existiere das uneigentliche Riemann-Stieltjes Integral

$\int_{a+0}^{b} f^2(x)\, d\alpha(x)$, und $L_n(f;x)$ sei die Lagrange Interpolation bezüglich der Gaußschen Knoten. Ist $G \in C^\infty$ mit $G(x) \geq 0$ $(x \in (a,b])$, $G^{(2k)}(x) \geq 0$ $(x \in (a,b]\ ;\ k=1,2,\ldots)$ und $\int_{a+0}^{b} G(x)\, d\alpha(x) < \infty$, so gilt, falls $\lim_{x \to a+0} \frac{f^2(x)}{G(x)}$ existiert,

$$\lim_{n\to\infty} \int_{a+0}^{b} |f-L_n|^2\, d\alpha = 0.$$

Für das Intervall $[a,\infty)$ wird folgendes gezeigt: Sei $d\alpha(x)$ eine Belegung, für die das Momentenproblem eindeutig lösbar ist. Gilt mit einer entsprechenden Vergleichsfunktion $G(x)$ $G(x) \geq 0$ $(x \in [a,\infty))$, $G^{(2k)}(x) \geq 0$ $(x \in [a,\infty);\ k=1,2,\ldots)$ und $\int_a^\infty G(x)\, d\alpha(x) < \infty$, so folgt, falls $\int_a^\infty f^2 d\alpha$ und $\lim_{x\to\infty} \frac{f^2(x)}{G(x)}$ existieren, die Aussage $\lim_{n\to\infty} \int_a^\infty |f-L_n|^2\, d\alpha = 0$.

L. GATTESCHI: <u>On the Construction of some Gaussian Quadrature Rules</u>

Recently F.G. Lether [J. of Comput, and Appl. Math., 4 (1978), 47 - 52], by using results from J.F. Traub and D.J. Hofsommer, has developped a 5-th order iterative method for finding the zeros of the $n$-th Legendre polynomial $P_n(x)$. With good starting approximations for the zeros the method requires only one iteration. The approximations used by Lether are based on certain asymptotic results of Tricomi and Gatteschi.

We present a new asymptotic approximation for the zeros of ultraspherical polynomial $P_n^{(\lambda)}(x)$ and we compare it with the previous results in the cases $\lambda = \frac{1}{2}$ (Gauss-Leyendre quadrature) and $\lambda = \frac{3}{2}$ (Lobatto quadrature).
We study also the possibility to apply similar procedures to construct Gauss-Laguerre quadrature formulas.

W. GAUTSCHI: <u>On Constructing Gaussian Quadrature Rules</u>

Es wird zunächst kurz auf die Erzeugung orthogonaler Polynome eingegangen, speziell wenn "modifizierte" Momente der Gewichtsfunktion vorliegen. Dann werden zwei Verfahren zur Berechnung Gaußscher Quadraturformeln bezüglich ihrer Effizienz verglichen. Das erste beruht auf der Berechnung der Nullstellen des entsprechenden orthogonalen Polynoms, wobei das "Doppel Newton Schritt"-Verfahren und Maehly's Kunstgriff der sukzessiven Deflation verwendet werden. Das zweite beruht auf der Berechnung der Eigenwerte und der ersten Komponente der entsprechenden Eigenvektoren der (tridiagonalen symmetrischen) Jacobimatrix, die zur gegebenen Gewichtsfunktion gehört, mit Hilfe des impliziten QL-Verfahrens. Es stellt sich heraus, daß das zweite Verfahren im allgemeinen ungefähr zweimal so schnell ist wie das erste.

G. HEINDL: <u>Ein Vergleich zwischen besten Quadraturformeln im Sinne des minimalen Maximalfehlers und optimalen Quadraturformeln im Sinne von Sard</u>

$E$ sei ein reeller Funktionenraum mit dem algebraischen Dualraum $E'$, $p$ eine Seminorm auf $E$, $E^* := \{l \in E' : p_d(l) := \sup\{l(x) : p(x) \leq 1\} < \infty\}$. $l_o, l_1, \ldots, l_m \in E'$ seien l.u. (Bei Quadraturproblemen beschreibt $l_o$ die Integration; $l_1, \ldots l_m$ sind i.a. Interpolationsfunktionale.) Ferner liege mit bekanntem $c = (c_1, .., c_m) \in \mathbb{R}^m$ und $M \geq 0$ über eine Funktion $\hat{x} \in E$, für die $l_o(\hat{x})$ interessiert, die Information

"$\hat{x} \in K_{M,c} := \{x \in E : l_i(x) = c_i, i = 1, \ldots m, \ p(x) \leq M\}$"

vor. Unter der Voraussetzung, daß $Q := \{\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m : l_o - \sum \lambda_i l_i \in E^*\}$ nicht leer ist, ist $l_o(K_{M,c})$ ein beschränktes Intervall, dessen Mittelpunkt $\tau_{M,c}$ die im Sinne des minimalen Maximalfehlers beste Approximation von $l_o(\hat{x})$ darstellt. Mit $\sigma := \mathrm{Min}\{(p_d(l_o - \sum \lambda_i l_i) : \lambda \in Q\}$ ist für jedes $\hat{\lambda} \in \hat{Q} := \{\lambda \in Q : p_d(l_o - \sum \lambda_i l_i) = \sigma\}$, $\hat{\lambda}c := \sum \hat{\lambda}_i c_i$ eine beste Approximation von $l_o(\hat{x})$ im Sinne von Sard. In einem häufig beschriebenen Spezialfall ist $\hat{Q}$ einelementig und mit $\hat{Q} = \{\hat{\lambda}\}$ gilt $\tau_{M,c} = \hat{\lambda}c$, d.h. die beiden Approximationen stimmen überein. In allgemeineren Fällen trifft dies nicht mehr zu, jedoch gilt immer $\lim_{M \to \infty} \tau_{M,c} = (\mathrm{Min}_{\hat{\lambda} \in \hat{Q}} \hat{\lambda}c + \mathrm{Max}_{\hat{\lambda} \in \hat{Q}} \hat{\lambda}c)/2$.

Gefördert durch DFG Deutsche Forschungsgemeinschaft

K. JETTER: Quadraturformeln minimaler Fehlernorm auf den Sobolev-Räumen $W_q^m$.

Approximiert man auf den Räumen $W_q^m$ ein bewichtetes Integral durch Quadraturformeln, die für Polynome vom Höchstgrad m-1 exakt sind und höchstens n Knoten besitzen, so wird man in "natürlicher" Weise auf das folgende Extremalproblem geführt: Man minimiere das Fehlerfunktional R auf der Einheitskugel von $W_q^m$,

$$\inf_R \quad \sup_{f\in W_q^m,\|f^{(m)}\|_q\leq 1} \quad Rf \quad .$$

Je nachdem, ob hierbei die Quadraturknoten fest vorgegeben oder frei wählbar sind, führt dies auf das Problem, ein m-faches Integral der Gewichtsfunktion durch Splines mit festen bzw. freien Knoten zu approximieren.

Ausgehend von Charakterisierungsaussaugen für die Lösungen der linearen Approximationsprobleme wird für den nichtlinearen Fall ein Iterationsverfahren vorgestellt, dessen Fixpunktmenge die Lösungen des nichtlinearen Problems enthält. Für spezielle Fälle folgt hieraus die Eindeutigkeit der Lösung für das nichtlineare Problem.

G.V. KELLY: Numerical Integration and Partially Exact Solutions to 2 and 3-dimensional Boundary Value Problems

It is shown how to obtain solutions to elliptic boundary value problems which satisfy the differential equation exactly (almost) everywhere and the boundary conditions identically on portion of the boundary. The required conditions on the remainder of the boundary are enforced approximately using numerical integration.
There are applications to triangles, quadrilaterals, pentagons, etc., and to 3-dimensional non-rectangular blocks.

D. KERSHAW: Some Reflections on the Euler-Maclaurin Formula

Let $f \in C^{2m}_{(2)}[0,1]$, $\{\Phi_r\} \in C^{2m}[0,1]$

$$\Phi_r{}' = \Phi_{r-1}\ ,\ r = 1,2,\ldots$$

then,

$$\text{(I)}\quad \int_0^1 f\Phi_0 = \sum_{r=1}^{m} [f^{(2r-2)}\Phi_r^{(1)} - f^{(2r-1)}\Phi_r]_0^1 + \int_0^1 f^{(2m)}\Phi_m.$$

For the usual Euler Maclaurin formula

$\Phi_r = B_{2r}/(2r)!$, which satisfy $\Phi_r^{(1)}(1) = -\Phi_r^{(1)}(o)$, $\int_0^1\Phi_r = 0, r=1,2,\ldots$

However other choices of boundary conditions lead to other forms, as does the non assumption of $\Phi_o = 1$.

In two dimensions (I) is replaced by

$$\iint_D u\Phi_o = \sum_{r=1}^{m} \int_C [\Delta^{r-1}u\ \frac{\partial}{\partial n}\Phi_r - \Phi_r\ \frac{\partial}{\partial n}\ \Delta^{r-1}u] + \iint_D \Phi_m \Delta^m u.$$

A generalization of the Euler-Maclaurin into two (or more) dimensions is obtained with $\Phi_o = 1$, $\frac{\partial}{\partial n}\Phi_1 = A/L$, $\frac{\partial}{\partial n}\Phi_r = 0, r=2,3,\ldots$ where A = area of D, L = length of C.

Explicit results were presented for D = unit circle and a rectangle. The non existence of a type of Romberg quadrature was noted.

K. KOFRON: Ableitungsfreie Fehlerabschätzung von Quadraturformeln mit äquidisanten Knoten

Im kurzen Vortrag werden verschiedene Fehlerabschätzungen vom Typus

$$\|R_{n+1}(f)\| \le \sqrt{2\pi}\ \sigma_{n+1}(a) \le C_{n+1}h^m$$

(m ist der algebraische Genauigkeitsgrad der ausgewählten Quadraturformel) abgeleitet, hauptsächlich für die Auswahl der Knoten und Koeffizienten der allgemeinen Newton-Cotes-Formeln. Für spezielle Formeln dieser Bauart werden explizite Fehlerkonstanten abgegeben.

G. LANGE: Optimale definite Quadraturformeln

Für $\mathfrak{F} = \{f \mid f \in C^{2m}[0,1],\ 0 \leq f^{(2m)}(x) \leq 1,\ x \in [0,1]\}$ wird in der Klasse von definiten Quadraturformeln:

$\mathfrak{K} = \{Q \mid Q[f] = \sum c_i f(x_i);\ R[f] = cf^{(2m)}(\eta),\ 0<\eta<1\}$

nach optimalen gesucht, d.h.

$$\inf_{Q \in \mathfrak{K}} \sup_{f \in \mathfrak{F}} |R[f]|.$$

Dazu betrachtet man nach einem Ansatz von Markov QFn vom Typ: $\sum c_i f(x_i) + \sum c_i' f'(x_i)$ mit festen Stützstellen. Die optimalen zeichnen sich dadurch aus, daß sie Splinefunktionen mit bestimmten Knoten exakt integrieren. Gibt man umgekehrt die Klasse der exakt zu integrierenden Splines fest vor, so sind die optimalen QFn dadurch charakterisiert, daß die Ableitungsgewichte Null sind (Verallg. Gaußformeln). Zusammen ergibt das ein Iterationsverfahren, mit dessen Hilfe die Eindeutigkeit optimaler definiter QFn bewiesen wird.

F. LOCHER: Fehlerkontrolle bei der numerischen Quadratur

Fehlerschranken für Quadraturverfahren enthalten naturgemäß Daten über den Gesamtverlauf des Integranden (z.B. Ableitung an einer unbestimmten Zwischenstelle, Norm oder Seminorm des Integranden). Hier wird versucht, das Fehlerfunktional $R_n$ durch Linearformen $L_n$, die für Polynome vom Grad n verschwinden, zu approximieren. Dabei sei $L_n$ eine Linearkombination von Punktfunktionalen. Geeignete Linearformen $L_n$ erhält man durch normierte dividierte Differenzen oder Differenzen von Quadraturnäherungen. Die Anwendbarkeit der Methode zur Fehlerkontrolle wird mit Hilfe von Darstellungssätzen für $R_n$ und $L_n$ demonstriert.

J.N. LYNESS: Romberg Integration for the Multi-Dimensional Simplex

During the fifteen years following Romberg's paper in 1955, there was developed a comprehensive theory of Romberg integration for one-dimensional quadrature over a finite interval. This was followed closely by the corresponding theory for quadrature over an n-dimensional hypercube.

The corresponding theory for the n-dimensional simplex is both more complicated and more rewarding. A start was made in the paper by myself and Puri in 1973. Nothing more was published until this year (1978). In this talk I shall describe some recent work carried out by several people including C. de Boor, E. de Doncker, A. Genz and myself. This work should be appearing in the open literature during the next couple of years.

J. MEINGUET: Multivariate Interpolation at Arbitrary Points Made Simple

The concrete method of "surface spline interpolation" is closely connected with the classical problem of minimizing a Sobolev seminorm under interpolatory constraints, the intrinsic structure of surface splines is accordingly that of a multivariate extension of natural splines. The proper abstract setting is a Hilbert function space whose reproducing kernel involves no functions more complicated than logarithms and is easily coded. Convenient representation formulas can be given, as also a practical multivariate extension of the Peano kernel theorem. Owing to the numerical stability of Cholesky factorization of positive definite symmetric matrices, the whole construction process of a surface spline can be described as a recursive algorithm, the data relative to the various interpolation points being exploited in sequence.

H.M. MÖLLER: Untere Schranken für die Knotenzahl von Kubaturformeln

Bei Kubaturformeln eines festen Genauigkeitsgrads d für ein Integral I ist man besonders an Formeln interessiert, die eine geringe Knotenzahl N aufweisen. Hierzu benötigt man die Kenntnis von unteren Schranken für N. In diesem Vortrag werden neben der bekannten Abschätzung

$$N \geq \dim \mathcal{P}_s \qquad \text{falls } d \geq 2s$$

die Abschätzungen

$$N \geq \dim \mathcal{P}_s + \frac{1}{l}\gamma_l \qquad \text{falls } d \geq 2s+1$$

und $$N \geq 2 \dim \mathcal{G}_s - 1 \qquad \text{falls } d \geq 2s+1 \text{ und I zentralsymmetrisch,}$$

hergeleitet, wobei $\mathcal{P}_s$ der Raum aller Polynomfunktionen vom Höchstgrad s, $\mathcal{G}_s$ für gerades bzw. ungerades s der Raum der geraden bzw. ungeraden Polynomfunktionen aus $\mathcal{P}_s$, sowie $\gamma_l$ eine nur von I,s und l ($2 \leq l \leq n$) abhängige Konstante ist. Aus den Beweismethoden werden notwendige Bedingungen für Kubaturformeln bestimmt, deren Knotenzahl mit der unteren Schranke übereinstimmt.

G. MONEGATO: An Overview of Results and Questions Related to Kronrod Schemes

Consider the Gauss-Legendre quadrature formula

$$(1) \qquad \int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} H_{i,n}\, f(\xi_{i,n}) + R_{1,n}(f).$$

In order to give an estimate of the error it has been proposed to associate to it new rule

$$(2) \qquad \int_{-1}^{1} (f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_{i,n}\, f(\xi_{i,n}) + \sum_{j=1}^{n+1} B_{j,n}\, f(x_{j,n}) + R_{2,n}(f)$$

which uses the same points $\xi_{i,n}$ of (1) and n+1 new nodes, chosen so that the polynomial degree of (2) is maximum, i.e. 3n+1.
I will first give an overview of results and questions related to such rules.

Then I will consider a third rule

$$(3) \quad \int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{j=1}^{n-1} c_{j,n} f(x_{j,n}) + R_{3,n}(f)$$

and show how it can be used, together with (1) and (2), to construct an automatic integration routine.

G. OPFER: <u>Numerical Integration of Weakly Singular Functions</u>

The method suggested consists of approximating a function on neighborhoods of a singularity by bounded functions and then integrate numerically. Convergence results are derived. The generality of the results opens up possibilities of constructing particular efficient schemes for the numerical integration of singular functions. The two types of errors inherited, namely the quadrature error and the error of approximating the given singular function by a bounded function are computed numerically for two cases. The numerical results give hints for a reasonable selection of the gridsize of the quadrature rule used and on the approximation of the singularity by a bounded function.
<u>Acknowledgement:</u> The paper presented is a joint work with <u>P. Anselone</u>.

W. RICHERT: <u>Gauss-Quadraturformeln mit mehrfachen Knoten</u>

Die Existenz und Eindeutigkeit von Gauss-Quadraturformeln für endliche Intervalle mit mehrfachen Knoten ist durch eine Arbeit von KARLIN und PINKUS [1977] gegeben. Für den Spezialfall dieser Arbeit, daß die Quadraturfehler für Polynome vom Grad n verschwinden, wurde das geeignete nichtlineare Gleichungssystem betrachtet. Mit einer Regula falsi Methode wurden daraus Stützstellen berechnet. Für die Fälle, daß nur beim jeweils äußersten Knoten Ableitungen gefordert wurden, haben sich in den berechneten Fällen positive Gewichte ergeben.

G. SCHMEIßER: Definitheitskriterien bei Quadraturformeln

Es wird eine Methode zur Konstruktion von Semidefinitheitskriterien für den Peano-Kern einer Quadraturformel angegeben.

Bei Anwendung auf interpolatorische Quadraturformeln mit n Stützstellen ergibt sich eine Folge von hinreichenden Kriterien $\mathfrak{K}_\nu$ ($\nu=1,2,\dots,n$), die mit wachsenden $\nu$ immer schärfer werden. Das Kriterium $\mathfrak{K}_\nu$ besteht darin, einen vereinfachten Peano-Kern, der durch Elimination von $n-\nu$ Stützstellen der ursprünglichen Formel entsteht, auf Semidefinitheit zu testen. Ist die Ordnung größer als n, so läßt sich noch ein Kriterium $\mathfrak{K}_0$ voranstellen. Bei symmetrisch verteilten Stützstellen sind $\mathfrak{K}_0$ und $\mathfrak{K}_1$ mit klassischen Kriterien von Steffensen und Odgaard identisch. Das Kriterium $\mathfrak{K}_2$ ermöglicht es schließlich, die bisher in der Literatur offen gebliebene Frage nach der Semidefinitheit des Filippi-Verfahrens zu geradem n bejahend zu beantworten.

H.J. SCHMID: Gauß-Kubaturformeln der Ordnung 2k-1

Es werden hinreichende und notwendige Bedingungen für die Existenz von zweidimensionalen Gauß-Kubaturformeln der Ordnung 2k-1 hergeleitet. Diese Kennzeichnung erweitert Möllers Ergebnisse. (Möller:Numer.Math. 25, 185-200 (1976).

A. van der SLUIS: An Appraisal of some Methods for Computing Cauchy Principal Values of Integrals

For the computation of $\int_a^b \frac{g(t)}{t-\tau}\,dt = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_a^{\tau-\epsilon} + \int_{\tau+\epsilon}^{b} \frac{g(t)}{t-\tau}\,dt$ we distinguish two cases:

(a) only one $\tau$ is given or g is very simple;

(b) the complimentary situation.

For (a) $\int_{-1}^{1} \frac{g(t)}{t}\,dt = \int_{-1}^{1} \frac{g(t)-g(o)}{t}$ leads to a smooth integrand and Romberg integration is trivially possible if g'(0) is known. If g'(0) is not known analytically it should be computed to sufficient accuracy in order to preserve the $h^2$ character of the error in the integral; extrapolation is suggested. For (b) $\int_a^b \frac{g(t)}{t-\tau}\,dt = \int_a^b \frac{g(t)-g(\tau)}{t-\tau} + g(\tau)\log\frac{b-\tau}{\tau-a}$, and Romberg is applicable after some precautions have been taken to ensure stability, again using extrapolation. Several methods are compared and practical remarks made.

A. SPENCE: Product Integration for Singular Integrals and Singular Integral Equations

Integral equations with weakly singular kernels often have solutions which have derivate singularities at the end points of the range. The error analysis of the product integration method applied to integrals of the form

$$\int_0^1 g(t)\, f(t)\, dt$$

where g(t) is "weakly singular" in [0,1] and f(t) is continuous but has derivative singularities in [0,1]. The error analysis of de Hoog & Weiss does not hold for such functions f(t).

In this talk the analysis of de Hoog & Weiss is modified to deal with such integrals and corresponding results are given for Fredholm equations of the 2nd and 3rd kinds.

H. STRAUß: Über beste Quadraturformeln

Unter allen Quadraturformeln $R(f)=\int_0^1 w(x)f(x)dx-\sum_{i=o}^{k+1} C_i f(x_i)$

bestimmt man diejenige Formel $R_o$, für die

$$R_o=\sup_{\|f^{(n)}\|_\infty\le 1} |R_o(f)| = \inf_{C_i} \sup_{\|f^{(n)}\|_\infty\le 1} |R(f)|$$

gilt. Eine Einschließung von $R_o$ erhält man mit Hilfe folgender Perfektsplines

$$\mathfrak{P}=\{P|P(x)=\pi_{n-1}+\frac{1}{n!}[x^n+2\sum_{i=1}^{r}(-1)^i(x-u_i)_+{}^n,$$
$$P(x_i)=0,\ i=0,\dots,k+1\}$$

Wenn $\Delta = \max_{i=0,\dots,k} |x_{i+1}-x_i|$ ist, gilt

$$\frac{\Delta n}{4\ n}\int_0^1 |w(x)|dx \ge R_o \ge \left|\int_0^1 w(x)\ P(x)\ dx\ \right|, P\in\mathfrak{P}.$$

Daraus erhält mann auch eine Abschätzung für die $L_1$-Approximation. Es wird auch der Fall mit variablen Stützstellen betrachtet.

E. WAGENFÜHRER: Taylorverfahren bei linearen Differentialgleichungssystemen

Vorgegeben sei ein lineares Differentialgleichungssystem

$$z'(x)=G(x)z(x) \quad (x\in[a,b]),\ z(a)=z_o$$

mit $G:[a,b]\to M(mxm,\mathbb{R})$ p-mal stetig dfb. Beim Taylorverfahren der Ordnung p berechnet man Näherungen $v_n$ für $z(x_n)$, wobei $x_n=a+nh, h=\frac{b-a}{N}$, und

$$v_o=z_o,\ v_{n+1} = v_n + \sum_{\mu=1}^{p} \frac{h^\mu}{u!} v_n{}^{(\mu)} \quad (n=0,1,\dots,N-1).$$

Hierbei sind die $v_n{}^{(\mu)}$ mittels der Rekursionen

$$v_n{}^{(o)}=v_n,\ v_n{}^{(\mu+1)} = \sum_{k=o}^{\mu} \binom{\mu}{k} G^{(k)}(x_n)v_n{}^{(\mu-k)}$$

zu bestimmen. Falls relle Matrizen $A_k$ bekannt sind, so daß komponentenweise $|G^{(k)}(x)| \le A_k$ $(x\in[a,b],\ k=0,1,\dots,p)$, läßt sich der lokale Verahrensfehler komponentenweise abschätzen. Hiermit können die zu wählende Schrittweite h und

Ordnung p des Verfahrens aufeinander abgestimmt werden; außerdem ergeben sich für den Gesamtfehler günstigere Fehlerschranken als bisher bekannt sind. Ein Anwendungsbeispiel ist die Hill'sche Differentialgleichung

$$y''(x)+(\lambda+\sum_{k=1}^{1} 2t_k \cos(2kx))y(x)=0 \quad (x\in[0,\tfrac{\pi}{2}]).$$

K. ZELLER, R. SCHERER: Knotensysteme als Fixpunkte

Quadraturformeln (mit Integrand Q') kann man auffassen als eine lineare Abhängigkeit von Punktfunktionalen (Typ Q' bzw. Q) in einem Polynomraum. Geläufige Formeln mit wenig Funktionalen fußen auf Orthogonalität. Man kann jedoch auch Fixpunktprinzipien heranziehen - was weitere Möglichkeiten für Theorie und Praxis eröffnet. Ein entsprechendes Verfahren sieht so aus: Man erreicht Abhängigkeit durch Einfügen zusätzlicher Funktionale (z.B. Typ Q": Hermite-Integration; Typ Q: Differentialgleichungen). Bei günstiger Knotenlage (Fixpunkt) treten besondere Eigenschaften auf, welche Abhängigkeit der ursprünglichen Funktionale bewirken. (Vgl. analoge Betrachtungen in der monotonen Approximation und der Birkhoff-Interpolation.) Wir führen ein solches Programm durch für Lobatto-Formeln (auch mit Gewicht) und erwähnen Varianten.

G.Hämmerlin (München)