Sigmoidale Transformationen bei der Trapezregel und der Satz von Abel-Plana

Hausarbeit
im Rahmen der ersten Staatsprüfung
für das Lehramt an Gymnasien

vorgelegt von Susanne Spieker

Prüfer: Prof. Dr. Rainer Kreß

Göttingen, den 5. Juni 2002

Herrn Prof. Dr. Rainer Kreß danke ich für die Themenstellung
und die gute Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Bei der vorliegenden Arbeit handelt es sich um eine Ausarbeitung und Zusammenfassung der grundlegenden Ergebnisse einer Arbeit von Elliott [2] über die Anwendung von sigmoidalen Transformationen bei der numerischen Integration.

Ziel der numerischen Integration ist die näherungsweise Berechnung von Integralen der Form $If := \int_0^1 f(x)\,dx$. Dies geschieht mit Hilfe sogenannter Quadraturformeln und erfolgt in dieser Arbeit durch die Trapezregel $Q_n f := \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n}{}'' f(j/n)$, wobei $\sum''$ eine Summe bezeichnet, deren erster und letzter Summand halbiert sind. Es ist bekannt, daß sich der Quadraturfehler $E_n f := If - Q_n f$ mit Hilfe der Euler-Maclaurinschen Summenformel abschätzen läßt, welche Kenntnisse über den Integranden und dessen Ableitungen an den Endpunkten 0 und 1 voraussetzt. Wie man sehen wird, kann durch eine geeignete Transformation der Integrationsvariable erreicht werden, daß diese Ableitungen bis zu einem bestimmten Grad Null werden und damit $Q_n f$ mit höherer Ordnung gegen das Integral If konvergiert.

Solche Transformationen, die sogenannten sigmoidalen Transformationen, werden in Kapitel 2 eingeführt. Neben der Definition und der Nennung einiger Eigenschaften wird dabei auch eine Methode vorgestellt, wie sich sigmoidale Transformationen mit Hilfe einer geeigneten Funktion f erzeugen lassen. Desweiteren wird die bereits erwähnte Anwendung der Transformationen bei der numerischen Integration noch näher betrachtet, und schließlich werden einige Beispiele sigmoidaler Transformationen vorgestellt.

In Kapitel 3 geht es um die Darstellung und Abschätzung des Quadraturfehlers $E_n f$. Für die Fehlerdarstellung stellen wir zunächst den Satz von Abel-Plana vor, für den vorausgesetzt werden muß, daß die Funktion f auf $[0, 1]$ reellwertig und in einen Streifen

$\mathcal{S}$ der komplexen z-Ebene, $\mathcal{S} := \{ z \mid 0 \leq x = \mathrm{Re}(z) \leq 1, \ -Y \leq y = \mathrm{Im}(z) \leq Y \}$, fortsetzbar ist zu einer in $\mathrm{Int}(\mathcal{S})$ holomorphen und in $\mathcal{S}$ stetigen Funktion.

Führen wir bei f zunächst eine Substitution mit einer sigmoidalen Transformation durch und wenden dann den Satz von Abel-Plana an, so sehen wir mit Hilfe der Fehlerabschätzung, daß der Quadraturfehler für hinreichend große n und für gerade $r > 0$ von der Ordnung $O\left(1/n^r\right)$ ist. Hierbei bezeichnet r die Ordnung der substituierten Transformation, welche in Kapitel 2.1 definiert wird. Außerdem zeigen wir, daß der Quadraturfehler für ungerade $r \geq 3$ sogar von der Ordnung $O\left(1/n^{2r}\right)$ ist, falls die substituierte sigmoidale Transformation nur ungerade Potenzen besitzt.

Abschließend werden in Kapitel 4 die zuvor ermittelten Fehlerordnungen anhand einiger numerischer Beispiele illustriert.

Kapitel 2

Sigmoidale Transformationen

2.1 Definition und Eigenschaften

Bei der nun folgenden Definition von sigmoidalen Transformationen handelt es sich um eine leicht abgeschwächte Fassung der Definition bei Elliott [2].

Definition 2.1 *(a) Eine reellwertige Funktion γ heißt sigmoidale Transformation, wenn sie die folgenden Bedingungen erfüllt:*

(i) $\gamma \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$ *mit* $\gamma(0) = 0$*;*

(ii) $\gamma(x) + \gamma(1-x) = 1, \ \ 0 \le x \le 1$*;*

(iii) γ *ist streng monoton wachsend auf* $[0,1]$*;*

(iv) $\gamma'(0) = 0$.

(b) Gilt zusätzlich zu (a)

(i) $\gamma^{(j)}(x) = O\left(x^{r-j}\right)$ *bei* $x = 0$ *für alle* $j \in \mathbb{N}_0$ *mit* $r \in \mathbb{N}$*, so heißt* γ *sigmoidale Transformation r-ter Ordnung;*

gilt

(ii) $\gamma^{(j)}(0) = 0$ *für alle* $j \in \mathbb{N}_0$*, so heißt* γ *sigmoidale Transformation unendlicher Ordnung.*

Bemerkung 2.2 *Aus obiger Definition ergeben sich für eine sigmoidale Transformation γ unter anderem folgende Eigenschaften:*

1. *Aus (a)(i) und (a)(ii) folgt $\gamma(1) = 1$; und mit a(iii) gilt, daß γ eine Eins-zu-eins-Abbildung des kompakten Intervalls $[0,1]$ auf sich selbst ist.*

2. *Aus (a)(ii) folgt $\gamma'(x) = \gamma'(1-x)$ und mit a(iv) insbesondere $\gamma'(1) = 0$. Der Graph zur Funktion γ' verläuft also symmetrisch zur Geraden $x = 1/2$. Aus (a)(i) und (a)(ii) folgt außerdem $\gamma''(x) + \gamma''(1-x) = 0$ für $x \in (0,1)$ und damit insbesondere $\gamma''(1/2) = 0$.*
   Ist γ' zudem streng monoton wachsend auf $[0, 1/2]$, so hat der Graph von γ die Gestalt eines gestreckten S. Elliott [2] hat deshalb auch die Bezeichnung sigmoidale *Transformation gewählt.*

3. *Aus (a)(ii) und (b)(i) ergibt sich für sigmoidale Transformationen r-ter Ordnung bei $x = 1$*
$$\gamma^{(j)}(x) = \delta_{0,j} + O\left((1-x)^{r-j}\right)$$
   für alle $j \in \mathbb{N}_0$.
   Ist γ eine sigmoidale Transformation unendlicher Ordnung, so folgt aus (a)(ii) und (b)(ii) $\gamma^{(j)}(1) = 0$ für alle $j \in \mathbb{N}$.

2.2 Erzeugung

Im folgenden wird nun eine Methode zur Erzeugung sigmoidaler Transformationen beschrieben.

Satz 2.3 *Sei f eine reellwertige Funktion auf $[0,1]$ mit folgenden Eigenschaften:*

(i) $f \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$ *mit* $f(0) = f'(0) = 0$ *und* $f(x) > 0$ *für* $0 < x \leq 1$;

(ii) $\frac{f'(x)}{f(x)} + \frac{f'(1-x)}{f(1-x)} > 0$ *für* $0 < x < 1$.

Dann ist die auf $[0,1]$ durch

$$\gamma(x) = \frac{f(x)}{f(x) + f(1-x)} \tag{2.1}$$

definierte Funktion γ sigmoidal.

Beweis: γ ist auf $[0,1]$ definiert, denn nach Bedingung (i) gilt $f(x) > 0$ für $0 < x \leq 1$ und daher auch $f(x) + f(1-x) > 0$ für $0 \leq x \leq 1$.
Aus Gleichung (2.1) folgt $\gamma(x) + \gamma(1-x) = 1$ für alle $x \in [0,1]$ und daher mit $f(0) = 0$ insbesondere $\gamma(0) = 0$ und $\gamma(1) = 1$. Außerdem gilt nach (i) $\gamma \in \mathcal{C}^{\infty}[0,1]$. Damit ist gezeigt, daß mit den in (i) an f gestellten Bedingungen, die Bedingungen (a)(i) und (a)(ii) von Definition 2.1 erfüllt sind.

Desweiteren ergibt sich aus Gleichung (2.1)

$$\gamma^{'}(x) = \frac{f^{'}(x)f(1-x) + f^{'}(1-x)f(x)}{(f(x)+f(1-x))^2}. \tag{2.2}$$

Nach (i) und (ii) ist der Zähler auf $(0,1)$ positiv, und da dies auch für den Nenner der Fall ist, gilt $\gamma^{'} > 0$ auf $(0,1)$. Also ist γ auf $[0,1]$ streng monoton wachsend und damit Bedingung (a)(iii) aus der Definition 2.1 gezeigt. Nach (2.2) gilt außerdem $\gamma^{'}(0) = 0$, so daß auch Bedingung (a)(iv) erfüllt ist.

Insgesamt haben wir damit gezeigt, daß die durch die Gleichung (2.1) definierte Funktion γ sigmoidal ist.

■

Korollar 2.4 *f erfülle die Bedingungen (i) und (ii) von Satz 2.3, und γ sei definiert durch die Gleichung (2.1).*

(a) Gilt $f^{(j)}(x) = O(x^{r-j})$ bei $x = 0$ für alle $j \in \mathbb{N}_0$, so ist γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung.

(b) Verschwinden f und alle Ableitungen von f bei $x = 0$, so ist γ eine sigmoidale Transformation unendlicher Ordnung.

Beweis: Der Beweis folgt sofort aus der in Gleichung (2.1) gegebenen Definition von γ.

■

Als nächstes werden nun zwei Varianten der durch Satz 2.3 gegebenen Methode zur Erzeugung sigmoidaler Transformationen beschrieben.
Die erste besteht darin, daß man die Funktion f in Satz 2.3 als Integral über eine Funktion h wählt:

$$f(x) = \int_0^x h(\xi)\,d\xi. \tag{2.3}$$

Erfüllt die Funktion h die Bedingung

$$h(\xi) \;=\; h(1-\xi), \quad 0 \le \xi \le 1, \tag{2.4}$$

so erhält man für die durch Gleichung (2.1) definierte Funktion γ, daß

$$\gamma(x) \;=\; (1/Q) \int_0^x h(\xi)\, d\xi, \quad 0 \le x \le 1, \tag{2.5}$$

wobei

$$Q \;:=\; \int_0^1 h(\xi)\, d\xi. \tag{2.6}$$

Anders ausgedrückt folgt aus den Gleichungen (2.3) und (2.4), daß

$$f(x) + f(1-x) \;=\; Q$$

konstant ist.

Mit diesen Vorbemerkungen kommen wir nun zu einem Satz, der Bedingungen für die Funktion h liefert, mit welchen γ gemäß Gleichung (2.5) sigmoidal ist:

Satz 2.5 *Sei h eine Funktion mit folgenden Eigenschaften:*

(i) $h \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$ *mit* $h(0) \;=\; 0$ *und* $h(x) > 0$ *für* $0 < x \le 1$*;*

(ii) $h(x) = h(1-x),\ 0 \le x \le 1$*;*

(iii) $h^{(j)}(x) \;=\; O\left(x^{r-1-j}\right)$ *bei* $x \;=\; 0$ *für alle* $j \in \mathbb{N}_0$*.*

Dann ist die durch die Gleichungen (2.5) und (2.6) definierte Funktion γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung.

Beweis: Wir überprüfen dies auf die Forderungen von Definition 2.1:

Aus (i) und (ii) folgt

$$f(x) + f(1-x) \;=\; \int_0^1 h(\xi)\, d\xi \;=\; Q > 0;$$

γ ist also auf $[0,1]$ definiert, und es gilt $\gamma(0) = 0$ und nach (i) $\gamma \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$. Durch Ausnutzung von (ii) folgt außerdem $\gamma(x) + \gamma(1-x) = 1$ für $0 \le x \le 1$. Desweiteren gilt $\gamma'(x) = h(x)/Q$, was positiv auf $(0,1)$ ist. γ ist also monoton wachsend auf $[0,1]$, und außerdem gilt $\gamma'(0) = 0$. Damit ist gezeigt, daß die Bedingungen (a)(i) bis (a)(iv) von Definition 2.1 erfüllt sind.

Schließlich folgt aus (iii) mit der Definition von γ, daß $\gamma^{(j)}(x) = O(x^{r-j})$ bei $x = 0$ für alle $j \in \mathbb{N}_0$, so daß γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung ist.

■

Als zweite ähnliche Variante für die Erzeugung sigmoidaler Transformationen wählt man sich Funktion f aus Satz 2.3 wie folgt:

$$f(x) = \int_0^x (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi, \tag{2.7}$$

wobei für die Funktion h vorausgesetzt wird, daß sie die Bedingung

$$h(\xi) + h(1-\xi) = 0, \quad 0 \le \xi \le 1, \tag{2.8}$$

erfüllt. Für die durch Gleichung (2.1) definierte Funktion γ erhält man dann

$$\gamma(x) = \int_0^x (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi \Big/ \int_0^1 (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi. \tag{2.9}$$

Der Nenner in Gleichung (2.9) scheint auf den ersten Blick von x abzuhängen, aber mit Gleichung (2.8) sieht man, daß $\int_0^1 h(\xi)\, d\xi = 0$. Daher können wir Gleichung (2.9) umschreiben zu

$$\gamma(x) = \int_0^x (x-\xi) h(\xi)\, d\xi \Big/ \int_0^1 (1-\xi) h(\xi)\, d\xi. \tag{2.10}$$

Mit diesen Vorbemerkungen geben wir im nun folgenden Satz weitere Bedingungen für

h an, damit γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung ist:

Satz 2.6 *Sei h eine Funktion mit folgenden Eigenschaften:*

(i) $h \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$ *mit* $h(x) > 0$ *für* $x \in (0, 1/2)$;

(ii) $h(x) + h(1-x) = 0, \ 0 \le x \le 1$;

(iii) $h^{(j)}(x) = O\left(x^{r-2-j}\right)$ *bei* $x = 0$ *für alle* $j \in \mathbb{N}_0$ *und* $r > 1$.

Dann ist die durch Gleichung (2.10) definierte Funktion γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung.

Beweis: Zunächst bemerken wir durch Ausnutzung von (i) und (ii), daß

$$\begin{aligned} \int_0^1 (1-\xi)\, h(\xi)\, d\xi &= \int_0^{1/2} (1-\xi)\, h(\xi)\, d\xi + \int_0^{1/2} \xi\, h(1-\xi)\, d\xi \\ &= \int_0^{1/2} (1-2\xi)\, h(\xi)\, d\xi > 0, \end{aligned}$$

da $1 - 2\xi > 0$ für $\xi \in (0, 1/2)$ und, mit (i), $h > 0$ auf $(0, 1/2)$. Also ist γ in Gleichung (2.10) definiert mit $\gamma(0) = 0$ und $\gamma(1) = 1$, und nach (i) gilt $\gamma \in \mathcal{C}^\infty[0,1]$. Mit Gleichung (2.10) erhalten wir

$$\gamma(x) + \gamma(1-x) = \frac{\int_0^x (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi + \int_0^{1-x} (1-x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi}{\int_0^1 (1-\xi)\, h(\xi)\, d\xi}. \tag{2.11}$$

Durch Substitution $\xi = 1 - z$ ergibt sich für das zweite Integral im Zähler

$$\int_0^{1-x} (1-x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi = \int_1^x (x-z)\, h(1-z)\, dz,$$

und weiter unter Ausnutzung von (ii)

$$\int_1^x (x-z)\, h(1-z)\, dz = \int_x^1 (x-z)\, h(z)\, dz, \quad 0 \le x \le 1.$$

Damit erhalten wir insgesamt für den Zähler in Gleichung (2.11)

$$\int_0^x (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi + \int_0^{1-x} (1-x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi = \int_0^1 (x-\xi)\, h(\xi)\, d\xi, \quad 0 \le x \le 1. \tag{2.12}$$

Wie zuvor für Gleichung (2.10) nutzen wir aus, daß mit Bedingung (ii) $\int_0^1 h(\xi)\,d\xi = 0$ gilt. Wir können Gleichung (2.12) daher umschreiben zu

$$\int_0^x (x-\xi)\,h(\xi)\,d\xi + \int_0^{1-x} (1-x-\xi)\,h(\xi)\,d\xi \;=\; \int_0^1 (1-\xi)\,h(\xi)\,d\xi, \quad 0 \le x \le 1. \tag{2.13}$$

Setzt man nun (2.13) in Gleichung (2.11) ein, so erhält man $\gamma(x) + \gamma(1-x) = 1$ für $0 \le x \le 1$.

Desweiteren ergibt sich aus Gleichung (2.10):

$$\gamma^{'}(x) \;=\; \int_0^x h(\xi)\,d\xi \Big/ \int_0^1 (1-\xi)\,h(\xi)\,d\xi. \tag{2.14}$$

Nun zeigen wir, daß $\int_0^x h(\xi)\,d\xi > 0$ für $0 < x < 1$:

Da $h > 0$ auf $(0, 1/2)$, ist dies für $0 < x \le 1/2$ wahr. Für $1/2 \le x < 1$ erhalten wir durch Ausnutzung von (ii)

$$\begin{aligned}\int_0^x h(\xi)\,d\xi \;&=\; \left(\int_0^1 - \int_x^1\right) h(\xi)\,d\xi \\ &=\; \int_x^1 h(1-\xi)\,d\xi \;=\; \int_0^{1-x} h(\xi)\,d\xi \;>\; 0,\end{aligned}$$

da $0 < 1-x \le 1/2$ bzw. $1/2 \le x < 1$. Also ist $\gamma^{'} > 0$ auf $(0,1)$, und γ ist streng monoton wachsend auf $[0,1]$. Nach Gleichung (2.14) gilt außerdem $\gamma^{'}(0) = 0$. Damit ist gezeigt, daß die Bedingungen (a)(i) bis (a)(iv) aus Definition 2.1 erfüllt sind.

Schließlich folgt aus (iii) mit der Definition von γ, daß $\gamma^{(j)}(x) = O(x^{r-j})$ bei $x = 0$ für alle $j \in \mathbb{N}_0$ und $r > 1$, so daß γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung ist.

$\blacksquare$

2.3 Anwendung bei der numerischen Integration

Wie schon in der Einleitung erwähnt, geht es bei der numerischen Integration um die Approximation des Integrals

$$If \;:=\; \int_0^1 f(x)\,dx. \tag{2.15}$$

Dies geschieht mit Hilfe von Quadraturformeln der Gestalt $\sum_{j=0}^{n} a_j\, f(x_j)$, wobei die Stellen x_j als Stützstellen und die Koeffizienten a_j als Gewichte bezeichnet werden. Eine wichtige Quadraturformel ist die sogenannte Trapezregel

$$Q_n f \;:=\; \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n}{}'' \; f(j/n) \tag{2.16}$$

mit den Gewichten $a_j = 1/n$ und den äquidistanten Stützstellen $x_j = j/n$, wobei $\sum''$ eine Summe bezeichnet, deren erster und letzter Term halbiert werden.

Der Quadraturfehler ist dann definiert durch

$$E_n f \;:=\; If \;-\; Q_n f. \tag{2.17}$$

Diesen Fehler kann man mit Hilfe der Euler-Maclaurinschen Summenformel abschätzen (vgl. z.B. Elliott [3]). Für $f \in \mathcal{C}^{m-1}[0,1] \cap \mathcal{C}^{m}(0,1)$ mit $\int_0^1 \left|f^{(m)}(x)\right| \, dx < \infty, m \in \mathbb{N}$, erhält man dann

$$E_n f \;:=\; \sum_{j=1}^{m} \frac{\bar{B}_j(1)}{j!} \cdot \frac{f^{(j-1)}(1) - f^{(j-1)}(0)}{n^j} \;-\; \frac{1}{n^m} \int_0^1 \frac{f^{(m)}(x)\bar{B}_m(1-nx)}{m!}\, dx, \tag{2.18}$$

wobei die $\bar{B}_j$ die periodischen Bernoullifunktionen bezeichnen, auf die in dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden soll.

An der obigen Darstellung (2.18) sieht man, daß der Fehler $E_n f$ bei periodischen Funktionen mit der Periode 1 von der Ordnung $O\left(1/n^m\right)$ ist.

Ist $f \in \mathcal{C}^r[0,1]$ nicht periodisch, so kann man nun mit Hilfe einer geeigneten sigmoidalen Transformation γ r-ter Ordnung f durch Substitution $x = \gamma(t)$ so transformieren, daß die Ableitungen von

$$g(t) \;:=\; f(\gamma(t))\gamma^{'}(t) \tag{2.19}$$

an den Endpunkten bis zu einem gewissen Grad verschwinden:

Für γ gilt nach Definition 2.1 und Bemerkung 2.2

$$\gamma \in \mathcal{C}^{\infty}[0,1], \text{ und } \gamma^{(j-1)}(0) = \gamma^{(j-1)}(1) = 0, \quad j = 1, \ldots, r.$$

Also ist $g \in \mathcal{C}^r[0,1]$, und mit Hilfe der Leibnizschen Regel erhält man

$$g^{(k)}(0) = g^{(k)}(1) = 0 \quad \text{für } k = 0, \ldots, r-2. \tag{2.20}$$

Durch Substitution $x = \gamma(t)$ ergibt sich

$$\int_0^1 f(x)\,dx \;=\; \int_0^1 f(\gamma(t))\gamma^{'}(t)\,dt,$$

und durch Anwendung der Rechteckregel auf das substituierte Integral erhalten wir

$$Q_n^{[r]}f \;:=\; \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n-1} f(\gamma(j/n))\gamma^{'}(j/n)$$

als Quadraturfehler zur Approximation von If. Der Quadraturfehler $E_n^{[r]}f$ ist dann definiert durch

$$E_n^{[r]}f \;:=\; If - Q_n^{[r]}f \tag{2.21}$$

wobei offensichtlich $E_n^{[r]}f = E_n g$ gilt. Schätzt man diesen Fehler nun wieder mit Hilfe der Euler-Maclaurinschen Summenformel (siehe Gleichung (2.18)) ab, wendet diese also auf g an, so erhält man wegen der in Gleichung (2.20) genannten Eigenschaft von g für den Fehler $E_n g$ bzw. $E_n^{[r]}f$ die Fehlerordnung $O\left(1/n^{r-2}\right)$.

Den Quadraturfehler $E_n^{[r]}f$ abzuschätzen, wird die Aufgabe von Kapitel 3 dieser Arbeit sein.

Für die numerische Integration ist es von besonderer Bedeutung, wie die Stützstellen nach Substitution mit einer sigmoidalen Transformation der Ordnung r verteilt sind. Es liegt dabei folgender Zusammenhang vor: Ist $\gamma^{'}(1/2)$ groß, so konzentrieren sich die Stützstellen $\gamma(j/n)$ an den Intervallenden; ist $\gamma^{'}(1/2)$ ungefähr 2, so bleibt etwa die Hälfte der Stützstellen auf $[0,1]$ äquidistant verteilt, während sich die andere Hälfte gegen die Endpunkte drängt.

In diesem Zusammenhang betrachten wir daher in den beiden folgenden Abschnitten, in denen verschiedene sigmoidale Transformationen vorgestellt werden, auch das jeweilige Verhalten von $\gamma^{'}$ an der Stelle $x = 1/2$.

2.4 Beispiele „algebraischer“ sigmoidaler Transformationen

Im folgenden betrachten wir einige Beispiele sigmoidaler Transformationen, die man erhält, indem man sich eine Funktion f gemäß Satz 2.3 wählt. Elliott [2] nennt diese Transformationen „algebraisch“.

Transformation 2.7 Wählt man

$$f(x) \;=\; x^r, \quad \mathbb{N} \ni r > 1,$$

so erhält man die algebraisch wohl einfachste sigmoidale Transformation, welche zum Beispiel bei Elliott und Prößdorf [4] zu finden ist. Es ist sofort ersichtlich, daß f die Bedingungen von Satz 2.3 erfüllt, so daß es sich bei

$$\gamma(x) \;:=\; \frac{x^r}{x^r + (1-x)^r} \tag{2.22}$$

um eine sigmoidale Transformation handelt, die nach Korollar 2.4 offensichtlich der Ordnung r ist. Aus Gleichung (2.22) folgt außerdem

$$l \;:=\; \gamma^{'}(1/2) \;=\; r,$$

was offensichtlich mit größer werdendem r wächst.

In Abbildung 2.1 ist der Graph der Transformation für $r = 4$ dargestellt.

Transformation 2.8 Elliott [2] betrachtet eine Variante von Transformation 2.7, die die Eigenschaft hat, daß $l := \gamma^{'}(1/2)$ unabhängig von r ist. Hierfür wählen wir als Funktion f

$$\begin{aligned} f(x) \;&=\; \left[x - c\,(x^2 - x)\right]^r \\ &=\; (1+c)^r\, x^r\, (1 - (c/\,(1+c\,))\; x)^r\,, \quad \mathbb{N} \ni r > 1. \end{aligned} \tag{2.23}$$

Dabei ist c eine noch zu bestimmende Konstante: Für $c > -1$ ist die Bedingung (i) aus Satz 2.3 offensichtlich erfüllt. Bedingung (ii) aus Satz 2.3 verlangt weiter, daß

$$1 + \frac{c}{2} + 2c\left(x - \frac{1}{2}\right)^2 > 0$$

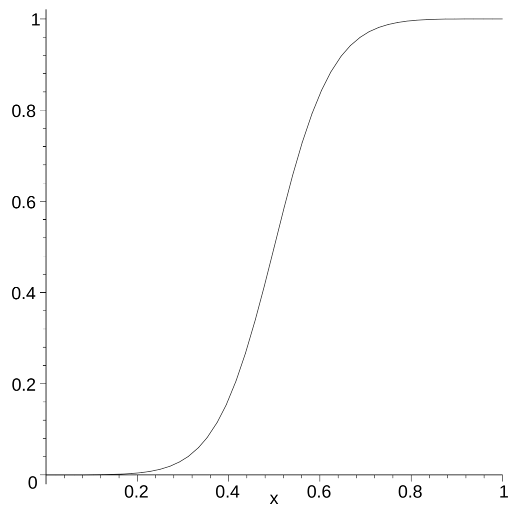

Abbildung 2.1: Der Graph von Transformation 2.7 für $r = 4$

auf $(0, 1)$ gilt. Auch dies ist für $c > -1$ erfüllt. Desweiteren folgt mit γ gemäß Satz 2.3 und mit $l := \gamma^{'}(1/2)$

$$c = 2\,(r/l - 1). \tag{2.24}$$

Die Forderung $c > -1$ impliziert also, daß $r > l/2$ gelten muß; da bisher $\mathbb{N} \ni r > 1$ vorausgesetzt wurde, soll von nun an

$$\mathbb{N} \ni r > \max\,(1, l/2) \tag{2.25}$$

gelten. Insgesamt gilt nun also, daß die durch Gleichung (2.1) definierte Funktion γ mit dem in Gleichung (2.24) gegebenen c und der in Gleichung (2.23) definierten Funktion f eine sigmoidale Funktion r-ter Ordnung ist, wenn l und r die Bedingung aus (2.25) erfüllen.

Mit $l = 2$ und $\mathbb{N} \ni r > 1$ erhält man mit $c = r - 2$ insbesondere eine sigmoidale Transformation der Ordnung r mit $\gamma^{'}(1/2) = 2$.

Abbildung 2.2 zeigt den Graphen der Transformation für $c = 2$ und $r = 4$.

Transformation 2.9 Elliott [2] untersucht, was mit Transformation 2.8 für $r \to \infty$ geschieht: Mit den Gleichungen (2.23) und (2.24) ergibt sich für γ gemäß Gleichung (2.1)

$$\gamma(x) \;=\; 1/\left(1 + F_r\,(x)\right),$$

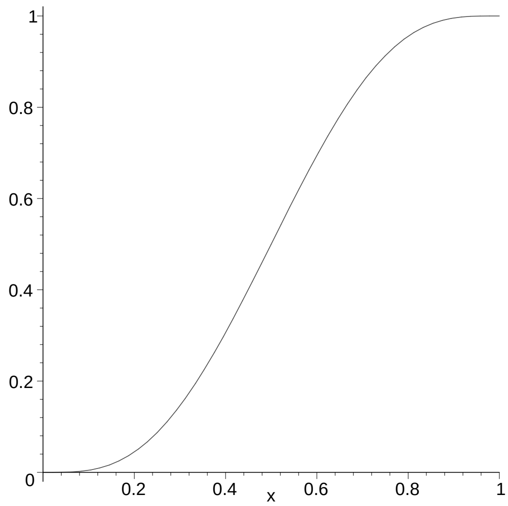

Abbildung 2.2: Der Graph von Transformation 2.8 für $c = 2, r = 4$

wobei

$$\begin{aligned} F_r(x) &= f(1-x)/f(x) \\ &= \frac{\left(1 + \frac{l}{r}\left(\frac{1}{2x} - 1\right)\right)^r}{\left(1 - \frac{l}{r}\left(1 - \frac{1}{2(1-x)}\right)\right)^r}. \end{aligned}$$

Für $r \to \infty$ erhält man eine Grenzfunktion F_∞, für die gilt

$$F_\infty(x) = \exp\left[\frac{l}{2}\left(\frac{1}{x} - \frac{1}{1-x}\right)\right].$$

Dies führt zu einer sigmoidalen Transformation, die mit γ_∞^{SS} bezeichnet und durch

$$\gamma_\infty^{SS}(x) = \frac{1}{1 + F_\infty(x)} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left[\frac{l}{4}\left(-\frac{1}{x} + \frac{1}{1-x}\right)\right]$$

definiert wird.

Erzeugt werden kann γ_∞^{SS}, indem man entweder

$$f(x) = \exp\left(-\frac{l}{2x}\right) \quad \text{oder} \quad f(x) = \exp\left[\frac{l}{4}\left(-\frac{1}{x} + \frac{1}{1-x}\right)\right]$$

wählt. Verwendet man erstere Darstellung, so ist schnell nachgewiesen, daß f die

Bedingungen (i) und (ii) von Satz 2.3 für alle $l > 0$ erfüllt.

In Abbildung 2.3 ist der Graph von Transformation 2.9 für $l = 2$ dargestellt.

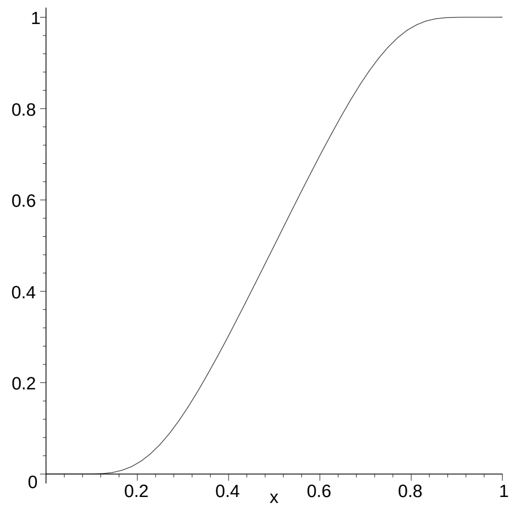

Abbildung 2.3: Der Graph von Transformation 2.9 für $l = 2$

2.5 Beispiele „integraler" sigmoidaler Transformationen

Wir betrachten nun Beispiele sigmoidaler Transformationen, die man erhält, indem man sich eine Funktion h gemäß Satz 2.5 oder Satz 2.6 wählt. Elliott [2] bezeichnet diese Transformationen als „integral".

Transformation 2.10 Wählt man in Satz 2.5

$$h(x) \;=\; (x\,(1-x))^{r-1}, \quad \mathbb{N} \ni r > 1, \tag{2.26}$$

so ist schnell nachgewiesen, daß h die Bedingungen (i) bis (iii) von Satz 2.5 erfüllt. Außerdem gilt

$$Q \;=\; \int_0^1 (x\,(1-x))^{r-1}\,dx \;=\; (\Gamma(r))^2\,/\Gamma(2r),$$

wobei Γ hier und im folgenden die Gammafunktion bezeichnet; siehe Gradshteyn und Ryzhik [6, §3.191(3)]. Weiter erhält man für $r \to \infty$ mit Hilfe der Stirlingschen Formel

$$\frac{(\Gamma(r))^2}{\Gamma(2r)} \to \frac{\left(\sqrt{2\pi}\, r^{r-\frac{1}{2}}\, e^{-r}\right)^2}{\sqrt{2\pi}\,(2r)^{2r-\frac{1}{2}}\, e^{-2r}} = \frac{\sqrt{2\pi}\, r^{2r-1}}{(2r)^{2r-\frac{1}{2}}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2r-1}\sqrt{r}}\,.$$

Unter Verwendung von (2.5) folgt daraus

$$\gamma^{'}(1/2) \sim \left(2/\pi^{1/2}\right) r^{1/2} \quad \text{für } r \gg 1,$$

was mit größer werdendem r wächst.

Abbildung 2.4 zeigt den Graphen der Transformation für $r = 4$.

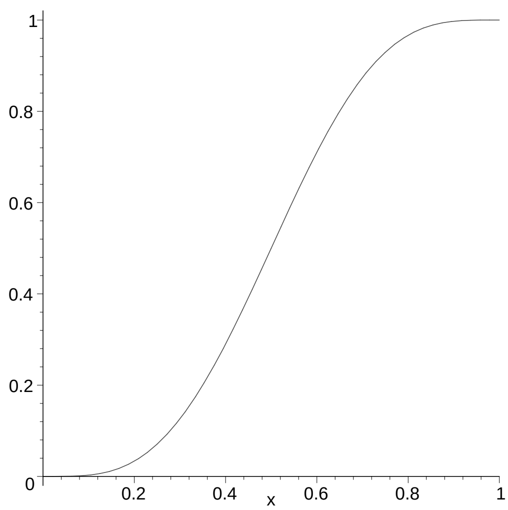

Abbildung 2.4: Der Graph von Transformation 2.10 für $r = 4$

Transformation 2.11 Eine wichtige Transformation ist von Sidi [9] gegeben worden. Dieser wählt die Funktion h aus Satz 2.5 folgendermaßen:

$$h(x) = (\sin(\pi x))^{r-1}, \;\; r \in \mathbb{N} \text{ mit } r \geq 2;$$

und man sieht wiederum schnell, daß h die Bedingungen (i) bis (iii) von Satz 2.5 erfüllt. Also ist die in Gleichung (2.5) definierte Funktion γ eine sigmoidale Transformation r-ter Ordnung. Außerdem gilt nach Gradshteyn und Ryzhik [6, §3.621]

$$Q \;=\; \int_0^1 (\sin(\pi x))^{r-1}\, dx \;=\; \Gamma(r/2)/\left(\pi^{1/2}\Gamma(r/2+1/2)\right).$$

Damit ergibt sich für die erste Ableitung von γ in Gleichung (2.5) an der Stelle $x = 1/2$

$$\gamma^{'}(1/2) \;=\; \frac{(\sin(\pi/2))^{r-1}}{\Gamma(r/2)/\left(\pi^{1/2}\,\Gamma(r/2+1/2)\right)} \;=\; \frac{\pi^{1/2}\,\Gamma\left(\frac{r+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right)};$$

weiter erhält man für $r \to \infty$ mit Hilfe der Stirlingschen Formel

$$\frac{\pi^{1/2}\,\Gamma\left(\frac{r+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right)} \;\to\; \frac{\pi^{1/2}\;\left(\frac{r+1}{2}\right)^{\frac{r}{2}}\; e^{-\frac{1}{2}}}{\left(\frac{r}{2}\right)^{\frac{r}{2}-\frac{1}{2}}} \;=\; (\pi r/2)^{1/2}\;\left((1+1/r)^r\right)^{1/2}\; e^{-1/2}.$$

Unter Ausnutzung von $(1+1/r)^r \to e$ für $r \to \infty$ folgt damit insgesamt

$$\gamma^{'}(1/2) \;\sim\; (\pi r/2)^{1/2} \quad \text{für } r \gg 1,$$

was mit größer werdendem r wächst. $\gamma^{'}(1/2)$ ist also für $r \to \infty$ nicht beschränkt.

Durch partielle Integration erhält man nach einiger Rechnung, daß $\gamma =: \gamma_r$ für $r \geq 1$ der Rekursionsformel

$$\gamma_{r+1}(x) \;=\; \gamma_{r-1}(x) - \frac{\Gamma(r/2)}{2\pi^{1/2}\Gamma(r/2+1/2)}(\sin(\pi x))^{r-1}\cos(\pi x)$$

genügt, wenn man $\gamma_0(x) := 1/2$ und $\gamma_1(x) := x$ definiert. Insbesondere gilt

$$\gamma_2(x) \;=\; (1-\cos(\pi x))/2 \quad \text{und} \quad \gamma_3(x) \;=\; x - \frac{1}{2\pi}\sin(2\pi x). \tag{2.27}$$

Allgemeiner ausgedrückt erhält man, wenn man die bei Gradshteyn und Ryzhik [6, §1.320(1)] gegebene Gleichung

$$(\sin(\pi\xi))^{2m} \;=\; \frac{1}{2^{2m}}\left\{\sum_{k=0}^{m-1}(-1)^{m-k}2\binom{2m}{k}\cos(2(m-k)\pi\xi) + \binom{2m}{m}\right\}$$

verwendet und Term für Term integriert,

$$\gamma_{2m+1}(x) \;=\; x + 2\sum_{s=1}^{m} \frac{(-1)^s\,(m!)^2}{(m-s)!\,(m+s)!}\left(\frac{1}{2\pi s}\right)\sin(2\pi s x)$$

für alle $m \in \mathbb{N}$. In Kapitel 3 und 4 werden wir sehen, daß diese sigmoidale Transformation ungerader Ordnung von besonderer Bedeutung ist.

In Abbildung 2.5 ist der Graph von Transformation 2.11 für $r = 4$ dargestellt.

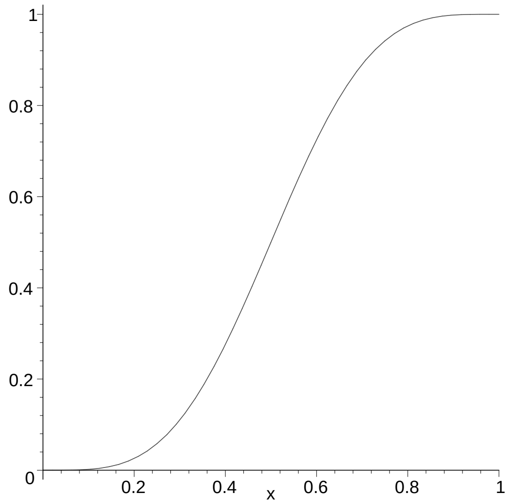

Abbildung 2.5: Der Graph von Transformation 2.11 für $r = 4$

Transformation 2.12 Elliott [2] betrachtet eine Transformation, die Sidis [9] obiger Transformation ungerader Ordnung ähnelt, für die aber γ'_{2m+1} für alle $m \in \mathbb{N}$ beschränkt bleibt. Wählt man gemäß Satz 2.6

$$h(\xi) \;=\; \sin^{2m-1}(2\pi\xi), \quad m \in \mathbb{N},$$

so erhält man mit

$$\gamma_{2m+1}(x) \;=\; \int_0^x (x-\xi)\sin^{2m-1}(2\pi\xi)\,d\xi \Big/ \int_0^1 (1-\xi)\sin^{2m-1}(2\pi\xi)\,d\xi \qquad (2.28)$$

eine sigmoidale Transformation der Ordnung $2m + 1$. Es bietet sich an,

$$\gamma_1(x) \;=\; x$$

zu definieren; dann liefert Gleichung (2.28) für $m = 1$

$$\gamma_3(x) \;=\; x - \frac{1}{2\pi}\sin(2\pi x),$$

was der Sidi-Transformation dritten Grades entspricht (siehe (2.27)). Tatsächlich erhält man durch geschickte partielle Integration der Gleichung (2.28) die Rekursionsformel

$$\gamma_{2m+1}(x) \;=\; \gamma_{2m-1}(x) - \frac{\Gamma(m-1/2)}{2\pi^{3/2}(2m-1)\Gamma(m)}\sin^{2m-1}(2\pi x) \quad \text{für } m \in \mathbb{N}.$$

Nach Gradshteyn und Ryzhik [6, §3.821(1)] gilt

$$\int_0^1 (1-\xi)\sin^{2m-1}(2\pi\xi)\,d\xi \;=\; \frac{\Gamma(m)}{4\pi^{1/2}\Gamma(m+1/2)}\,. \tag{2.29}$$

Mit den Gleichungen (2.28) und (2.29) erhält man dann

$$\gamma_{2m+1}'(1/2) \;=\; \frac{4\pi^{1/2}\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m)}\int_0^{1/2}\sin^{2m-1}(2\pi\xi)\,d\xi.$$

Wieder nach Gradshteyn und Ryzhik [6, §3.621(1)] gilt

$$\gamma_{2m+1}'(1/2) \;=\; 2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Mit Gleichung (2.28) kann man auch in diesem Beispiel γ_{2m+1} als Summe darstellen: Bei Gradshteyn und Ryzhik [6, §1.320(3)] findet man

$$(\sin^{2m-1}(2\pi\xi)) \;=\; \frac{1}{2^{2m-2}}\sum_{k=0}^{m-1}(-1)^{m+k-1}2\binom{2m-1}{k}\sin((2m-2k-1)\,2\pi\xi),$$

womit man nach einiger Rechnung erhält, daß für alle $m \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\gamma_{2m+1}(x) \;=\; x + \frac{2(\Gamma(m+1/2))^2}{\pi^2}\sum_{s=1}^{m}\frac{(-1)^s\sin(2\pi(2s-1)x)}{\Gamma(m-s+1)\Gamma(m+s)(2s-1)^2}\,.$$

Abbildung 2.6 zeigt den Graphen der Transformation für $m = 1$.

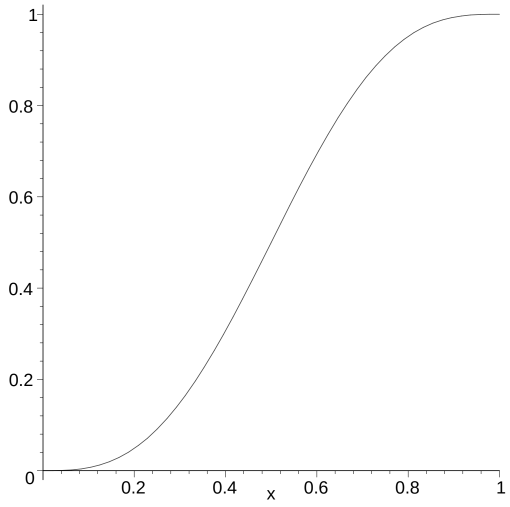

Abbildung 2.6: Der Graph von Transformation 2.12 für $m = 1$

Kapitel 3

Fehlerordnung bei der Trapezregel mit sigmoidaler Transformation

Wie bereits in Abschnitt 2.3 ausgeführt, finden sigmoidale Transformationen Anwendung bei der Approximation von Integralen der Form $\int_0^1 f(x)\,dx$ mit Hilfe der Trapezregel.

Ziel dieses Kapitels ist es, den in Gleichung (2.21) definierten Quadraturfehler $E_n^{[r]} f$ abzuschätzen und dadurch die Ordnung des Fehlers zu ermitteln.

Hierzu stellen wir zu Beginn den Satz von Abel-Plana vor, der uns eine Darstellung für den in Gleichung (2.17) definierten Quadraturfehler $E_n f$ liefert. Wir verwenden dabei eine andere Fassung des Satzes als Elliott [2].

Satz 3.1 *(Abel-Plana)*
Sei f eine auf $[0,1]$ reellwertige Funktion, die fortsetzbar ist in den Streifen $\mathcal{S}$ der komplexen z-Ebene, definiert durch

$$\mathcal{S} := \{\, z \mid 0 \leq x = \operatorname{Re}(z) \leq 1,\ -Y \leq y = \operatorname{Im}(z) \leq Y \,\},$$

zu einer in $\operatorname{Int}(\mathcal{S})$ holomorphen und auf $\mathcal{S}$ stetigen Funktion. Dann gilt

$$E_n\, f \;=\; -2 \,\operatorname{Im} \left(\int_0^Y \frac{f(1+iy) - f(iy)}{e^{2\pi n y} - 1}\, dy \right) \;-\; 2\, \operatorname{Re} \left(\int_0^1 \frac{f(iY + y)}{e^{2\pi n (Y - iy)} - 1}\, dy \right). \tag{3.1}$$

Beweis:

Sei $\mathcal{C}$ die in Abb. 3.1 dargestellte geschlossene Kurve; $\mathcal{C}_2$ bezeichne den oberen Teil von $\mathcal{C}$, $\mathcal{C}_1$ den unteren. Der Radius δ der halbkreisförmigen Einkerbungen bei 0 und 1 sei kleiner als $\frac{1}{2n}$.

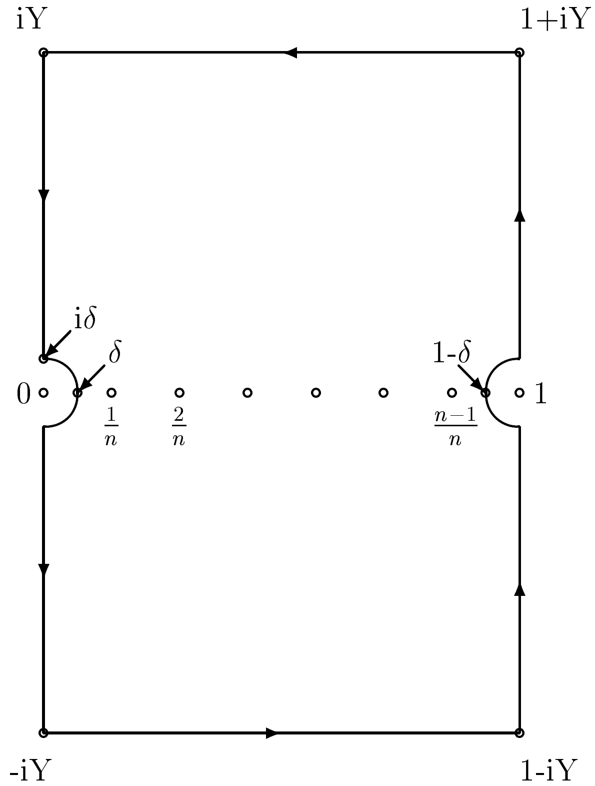

Abbildung 3.1: Kurve in der komplexen z-Ebene

f ist nach Voraussetzung holomorph in $\mathcal{S}$. Daher erhält man mit dem Cauchyschen Integralsatz

$$\int_{\delta}^{1-\delta} f(x)\,dx \;=\; \frac{1}{2}\int_{\mathcal{C}_1} f(x)\,dx - \frac{1}{2}\int_{\mathcal{C}_2} f(x)\,dx. \tag{3.2}$$

Da das Residuum von $\cot n\pi z$ in jeder ganzen geraden Zahl j den Wert $\frac{1}{n\pi}$ besitzt, ergibt sich mit dem Residuensatz

$$\int_{\mathcal{C}_1+\mathcal{C}_2} f(z)\ \cot n\pi z\, dz \;=\; \frac{2i}{n} \sum_{k=1}^{n-1} f\left(\frac{k}{n}\right). \tag{3.3}$$

Aus den Gleichungen (3.2) und (3.3) folgt dann

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} f\left(\frac{k}{n}\right) - \int_{\delta}^{1-\delta} f(z)\, dz \;&=\; \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}_1+\mathcal{C}_2} -i\ \cot n\pi z f(z)\, dz \\ &\qquad -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}_1} f(z)\, dz + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}_2} f(z)\, dz \\ &=\; -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}_1} f(z)\, (1 + i \cot n\pi z)\, dz \\ &\qquad +\frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}_2} f(z)\, (1 - i \cot n\pi z)\, dz. \end{aligned}$$

Unter Verwendung von

$$1 + i \cot \zeta \;=\; \frac{\sin \zeta + i \cos \zeta}{\sin \zeta} \;=\; \frac{ie^{-i\zeta}}{\frac{1}{2i}\left[e^{i\zeta} - e^{-i\zeta}\right]} \;=\; -\frac{2}{e^{2i\zeta} - 1}$$

und

$$1 - i \cot \zeta \;=\; \frac{\sin \zeta - i \cos \zeta}{\sin \zeta} \;=\; \frac{-ie^{i\zeta}}{\frac{1}{2i}\left[e^{i\zeta} - e^{-i\zeta}\right]} \;=\; -\frac{2}{e^{-2i\zeta} - 1}$$

erhält man

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} f\left(\frac{k}{n}\right) - \int_{\delta}^{1-\delta} f(z)\, dz \;=\; \int_{\mathcal{C}_1} \frac{f(z)}{e^{2\pi i n z} - 1}\, dz - \int_{\mathcal{C}_2} \frac{f(z)}{e^{-2\pi i n z} - 1}\, dz. \tag{3.4}$$

Da f nach Voraussetzung stetig ist, strebt das Integral von $\frac{f(z)}{e^{-2\pi inz}-1}$ über den Viertelkreis zwischen iδ und δ für $\delta \to 0$ gegen $-\frac{1}{4n}f(0)$. Analog gilt dies für den Viertelkreis zwischen δ und $-$iδ. Über die Viertelkreise zwischen $1-$ iδ und $1-\delta$ bzw. $1-\delta$ und $1+$ iδ strebt das Integral jeweils gegen $-\frac{1}{4n}f(1)$.

Für $\delta \to 0$ liefert die Gleichung (3.4) also

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right) - \int_0^1 f(z)\,dz \;=\; \frac{1}{2n}f(0) + \frac{1}{2n}f(1) + \int_{\mathcal{C}_1'} \frac{f(z)}{e^{2\pi inz}-1}\,dz - \int_{\mathcal{C}_2'} \frac{f(z)}{e^{-2\pi inz}-1}\,dz,$$

wobei $\mathcal{C}_2'$ die Kurve von 1 bis 0 über den oberen Rand des Rechtecks mit den Ecken -iY, 1-iY, 1+iY, iY beschreibt und $\mathcal{C}_1'$ die Kurve von 0 bis 1 über den unteren Rechteckrand (vgl. Abbildung 3.1).

Aus der obigen Gleichung erhält man aufgrund der Definition von E_nf in Gleichung (2.17), zusammen mit den Gleichungen (2.15) und (2.16)

$$E_nf \;=\; \int_{\mathcal{C}_2'} \frac{f(z)}{e^{-2\pi inz}-1}\,dz \;-\; \int_{\mathcal{C}_1'} \frac{f(z)}{e^{2\pi inz}-1}\,dz. \tag{3.5}$$

Wir betrachten nun die beiden Integrale über $\mathcal{C}_1'$ und $\mathcal{C}_2'$ aus Gleichung (3.5). Da f auf $[0,1]$ reellwertig ist, gilt nach dem Schwarzschen Spiegelungsprinzip $f(\overline{z}) = \overline{f(z)}$. Für die jeweiligen Teilkurven von $\mathcal{C}_1'$ und $\mathcal{C}_2'$ ergibt sich daher durch geeignete Parametrisierung zunächst

$$\begin{aligned} &\int_{iY}^{0} \frac{f(z)}{e^{-2\pi inz}-1}\,dz \;-\; \int_0^{-iY} \frac{f(z)}{e^{2\pi inz}-1}\,dz \\ &= -i\int_0^Y \frac{f(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy \;+\; \overline{i\int_0^Y \frac{f(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy} \\ &= 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right), \end{aligned} \tag{3.6}$$

und

$$\begin{aligned}
&\int_1^{1+iY} \frac{f(z)}{e^{-2\pi i n z}-1}\,dz \;-\; \int_{1-iY}^{1} \frac{f(z)}{e^{2\pi i n z}-1}\,dz \\
&= i\int_0^Y \frac{f(1+iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy \;-\; \overline{i\int_0^Y \frac{f(1+iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy} \\
&= -2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1+iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy\right). \qquad (3.7)
\end{aligned}$$

Desweiteren gilt

$$\begin{aligned}
&-\int_{iY}^{1+iY} \frac{f(z)}{e^{-2\pi i n z}-1}\,dz \;-\; \int_{-iY}^{1-iY} \frac{f(z)}{e^{2\pi i n z}-1}\,dz \\
&= -\int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy \;-\; \int_0^1 \frac{f(-iY+y)}{e^{2\pi n(Y+iy)}-1}\,dy \\
&= -\int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy \;-\; \int_0^1 \overline{\frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy} \\
&= -2\ \mathrm{Re}\left(\int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy\right). \qquad (3.8)
\end{aligned}$$

Aus den Gleichungen (3.5) bis (3.8) folgt nun die Behauptung.

■

Lemma 3.2 *Sei $Y > 0$ beliebig und $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq \frac{\ln 2}{2\pi Y}$. Für das Integral aus Gleichung (3.8) gilt*

$$\left|-2\ \mathrm{Re}\left(\int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy\right)\right| \;\leq\; 4 \max_{y\in[0,1]} |f(iY+y)|\ e^{-2\pi n Y}.$$

Beweis: Da f nach Voraussetzung von Satz 3.1 auf $\mathcal{S}$ stetig und das Rechteck mit den Ecken -iY, 1-iY, 1+iY, iY kompakt ist, ist f auf dem Rechteck beschränkt. Nach der Standardabschätzung für Integrale gilt dann

$$\begin{aligned}
\left| -2 \text{ Re} \left(\int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\, dy \right) \right| &\leq 2 \left| \int_0^1 \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\, dy \right| \\
&\leq 2 \int_0^1 \left| \frac{f(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1} \right| dy \\
&\leq 2 \int_0^1 \frac{|f(iY+y)|}{\left||e^{2\pi n(Y-iy)}|-1\right|}\, dy \\
&\leq 2\, \frac{\max\limits_{y\in[0,1]} |f(iY+y)|}{e^{2\pi nY}-1}\,.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Außerdem gilt für $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq \frac{\ln 2}{2\pi Y}$, $Y > 0$, die Ungleichung

$$\left(e^{2\pi nY} - 1\right) \geq \frac{1}{2}\, e^{2\pi nY}. \tag{3.10}$$

Setzt man (3.10) in (3.9) ein, folgt daraus die Behauptung.

■

Als nächstes wollen wir eine Darstellung für den in Gleichung (2.21) definierten Fehler $E_n^{[r]}f$ bzw. $E_n g$ finden. Hierzu wenden wir den obigen Satz auf die durch Gleichung (2.19) gegebene Funktion g an. Dafür müssen wir voraussetzen, daß die sigmoidale Transformation γ der Ordnung r zu einer in $\mathcal{S}$ stetigen und in Int$(\mathcal{S})$ holomorphen Funktion fortsetzbar ist und daß f zu einer in einem Gebiet W, mit $\gamma(\mathcal{S}) \subset W$, holomorphen und in $\overline{W}$ stetigen Funktion fortsetzbar ist. Für γ ersetzen wir insbesondere die Bedingung (ii) aus Definition 2.1(a) durch

$$\gamma(z) + \gamma(1-z) = 1 \quad \forall z \in \mathcal{S}.$$

Daraus folgt dann

$$\gamma(1+iy) = 1 - \gamma(-iy), \quad 0 \leq y < \infty, \tag{3.11}$$

und

$$\gamma^{'}(1+iy) \;=\; \gamma^{'}(-iy), \quad 0 \leq y < \infty. \tag{3.12}$$

Mit diesen Vorbemerkungen kommen wir nun zu folgendem Satz:

Satz 3.3 *γ sei fortsetzbar zu einer in $\mathcal{S}$ stetigen und in $\mathrm{Int}(\mathcal{S})$ holomorphen Funktion; W sei ein Gebiet mit $\gamma(\mathcal{S}) \subset W$ und f sei fortsetzbar zu einer in W holomorphen und in $\overline{W}$ stetigen Funktion. Dann gilt*

$$\begin{aligned} E_n^{[r]}f \;=\; E_n g \;&=\; -2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma^{'}(-iy) - f(\gamma(iy))\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy\right) \\ &\quad -2\ \mathrm{Re}\left(\int_0^1 \frac{f(\gamma(iY+y))\,\gamma^{'}(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy\right). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Beweis: Wendet man Satz 3.1 (Abel-Plana) auf $g = (f \circ \gamma)\,\gamma^{'}$ an, so erhält man mit den Gleichungen (3.11) und (3.12) die Behauptung.

■

Nach Satz 3.3 besteht der Quadraturfehler $E_n^{[r]}f$ also aus zwei Anteilen:

$$E_n^{[r]}f \;=\; E_n^1 f \;+\; E_n^2 f, \qquad \text{mit} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned} E_n^1 f \;&=\; 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy\right) \\ &\quad -\,2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma^{'}(-iy)}{e^{2\pi n y}-1}\,dy\right), \end{aligned} \tag{3.15}$$

und

$$E_n^2 f \;=\; -2\ \mathrm{Re}\left(\int_0^1 \frac{f(\gamma(iY+y))\,\gamma^{'}(iY+y)}{e^{2\pi n(Y-iy)}-1}\,dy\right).$$

Den zweiten Anteil $E_n^2 f$ können wir nach Lemma 3.2 abschätzen durch

$$\left|E_n^2 f\right| \leq 4 \max_{y\in[0,1]} |f(\gamma(iY+y))| \cdot \max_{y\in[0,1]} \left|\gamma^{'}(iY+y)\right|\, e^{-2\pi n Y};$$

das heißt

$$E_n^2 f \;=\; O\left(e^{-2\pi nY}\right) \qquad \text{für} \quad n \ge \frac{\ln 2}{2\pi Y}. \tag{3.16}$$

Nun befassen wir uns mit dem ersten Anteil $E_n^1 f$ und betrachten zunächst den Fall $r \in \mathbb{N}$ gerade:

Nach der Taylorschen Formel können wir für γ folgende Darstellung wählen:

$$\gamma(z) \;=\; c_0\, z^r + p(z),$$

wobei $c_0 := c_0(r) = \frac{\gamma^{(r)}(0)}{r!}$ und $\left|p^{'}(z)\right| \le \text{const}\,|z|^r$ für alle $|z| \le Y$.
Damit erhalten wir für das erste Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15)

$$2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$\begin{aligned}
&= 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f(0)+f(\gamma(iy))-f(0)\}\,\{r\,c_0\,(iy)^{r-1}+p^{'}(iy)\}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)\\
&= 2\,(-1)^{\frac{r-2}{2}}\,c_0\,f(0)\,r\int_0^\infty \frac{y^{r-1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy + 2\,(-1)^{\frac{r}{2}}\,c_0\,f(0)\,r\int_Y^\infty \frac{y^{r-1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\\
&\quad + 2\,c_0\,r\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{i^{r-1}\,y^{r-1}\,[f(\gamma(iy))-f(0)]}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)\\
&\quad + 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\,p^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)
\end{aligned}$$

$$=: I_1 \;+\; I_2 \;+\; I_3 \;+\; I_4\,. \tag{3.17}$$

Nun betrachten wir I_1 aus Gleichung (3.17) näher: Für das Integral von I_1 erhalten wir durch Substitution $y = t/n$

$$\int_0^\infty \frac{y^{r-1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy \;=\; \frac{1}{n^r}\int_0^\infty \frac{t^{r-1}}{e^{2\pi t}-1}\,dt;$$

und weiter gilt mit der geometrischen Reihe

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n^r}\int_0^\infty \frac{t^{r-1}}{e^{2\pi t}-1}\,dt &= \frac{1}{n^r}\int_0^\infty t^{r-1}\left(\frac{1}{1-e^{-2\pi t}}-1\right)\,dt \\
&= \frac{1}{n^r}\int_0^\infty t^{r-1}\left(\sum_{k=0}^\infty e^{-2k\pi t}-1\right)\,dt \\
&= \frac{1}{n^r}\sum_{k=1}^\infty \int_0^\infty t^{r-1}\,e^{-2k\pi t}\,dt. \qquad (3.18)
\end{aligned}$$

Für $r > 1$ erhält man weiter mit

$$\int_0^\infty \eta^{r-1}\,e^{-\eta}\,d\eta = \Gamma(r),$$

und

$$\sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^r} = \zeta(r),$$

durch Substitution $t = \frac{\eta}{2k\pi}$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n^r}\sum_{k=1}^\infty \int_0^\infty t^{r-1}\,e^{-2k\pi t}\,dt &= \frac{1}{n^r}\sum_{k=1}^\infty \int_0^\infty \frac{1}{2k\pi}\left(\frac{\eta}{2k\pi}\right)^{r-1} e^{-\eta}\,d\eta \\
&= \frac{1}{(2\pi n)^r}\sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^r}\int_0^\infty \eta^{r-1}\,e^{-\eta}\,d\eta \\
&= \frac{1}{(2\pi n)^r}\,\Gamma(r)\,\zeta(r), \qquad (3.19)
\end{aligned}$$

wobei ζ hier und im folgenden die Riemannsche ζ-Funktion bezeichnet.
Insgesamt erhalten wir damit für I_1 aus Gleichung (3.17):

$$I_1 = \frac{2\,(-1)^{\frac{r-2}{2}}\,c_0\,f(0)\,r}{(2\pi n)^r}\,\Gamma(r)\,\zeta(r). \qquad (3.20)$$

Nun betrachten wir das Integral von I_2 aus Gleichung (3.17):

Für alle $t > 0$ kann man abschätzen

$$\frac{y^{r-1}}{(r-1)!} \le \sum_{k=0}^{\infty} \frac{y^k}{k!} = e^y; \tag{3.21}$$

und für alle $y \geq Y$ und $n \geq 1$ gilt

$$e^{2\pi n y} - 1 \geq \left(1 - e^{-2\pi n Y}\right) e^{2\pi n y} \geq \left(1 - e^{-2\pi Y}\right) e^{2\pi n y}. \tag{3.22}$$

Setzen wir nun (3.21) und (3.22) in I_2 aus Gleichung (3.17) ein, so ergibt sich für das Integral von I_2

$$\begin{aligned}
\int_Y^{\infty} \frac{y^{r-1}}{e^{2\pi n y} - 1}\, dy &\le \frac{(r-1)!}{1 - e^{-2\pi Y}} \int_Y^{\infty} e^{(1-2\pi n)y}\, dy \\
&= \frac{(r-1)!}{1 - e^{-2\pi Y}} \cdot \frac{1}{2\pi n - 1}\, e^{(1-2\pi n)Y} \\
&\le \frac{e^Y (r-1)!}{1 - e^{-2\pi Y}} \cdot \frac{1}{\pi}\, e^{-2\pi n Y},
\end{aligned}$$

wobei in der letzten Ungleichung noch $2\pi n - 1 > \pi$ benutzt wurde.

Insgesamt erhalten wir damit für I_2 aus Gleichung (3.17):

$$|I_2| = O\left(e^{-2\pi n Y}\right). \tag{3.23}$$

Als nächstes betrachten wir I_3 aus Gleichung (3.17):

Es gilt

$$f(\gamma(iy)) - f(0) = \int_0^{\gamma(iy)} f'(z)\, dz,$$

so daß wir abschätzen können

$$|f(\gamma(iy)) - f(0)| \;\le\; |\gamma(iy)| \cdot \max_{z\in\overline{W}} \left| f^{'}(z) \right| \;\le\; \text{const}\,|y|^r. \tag{3.24}$$

Damit erhält man insgesamt für I_3 aus Gleichung (3.17):

$$|I_3| \;\le\; \text{const} \int_0^Y \frac{y^{2r-1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy;$$

und analog zu der Berechnung von I_1 gilt weiter

$$\int_0^Y \frac{y^{2r-1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy \;=\; \frac{\text{const}}{(2\pi n)^{2r}}\,\Gamma(2r)\,\zeta(2r).$$

Also gilt

$$|I_3| \;=\; O\left(n^{-2r}\right). \tag{3.25}$$

Schließlich bleibt noch I_4 aus Gleichung (3.17) zu betrachten:
Da $|f\left(\gamma(iy)\right)|$ für $0 \le y \le Y$ beschränkt ist, erhalten wir

$$|I_4| \;\le\; \text{const} \int_0^Y \frac{y^{r}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy;$$

und wieder analog zu der Berechnung von I_1 gilt weiter

$$\int_0^Y \frac{y^{r}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy \;=\; \frac{\text{const}}{(2\pi n)^{r+1}}\,\Gamma(r+1)\,\zeta(r+1),$$

und damit

$$|I_4| \;=\; O\left(n^{-r-1}\right). \tag{3.26}$$

Aus den Berechnungen von I_1, I_2, I_3 und I_4 in den Gleichungen (3.20), (3.23), (3.25) und (3.26) erhalten wir also für das Integral in Gleichung (3.17) bzw. für das erste Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15)

$$2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right) \;=\; \frac{2\,(-1)^{\frac{r-2}{2}}\,c_0\,f(0)\,r}{(2\pi n)^r}\,\Gamma(r)\,\zeta(r)+O\left(\frac{1}{n^{r+1}}\right). \quad (3.27)$$

Für das zweite Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15) ergibt sich zunächst

$$-2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma^{'}(-iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$= -2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f(1)+f(1-\gamma(-iy))-f(1)\}\,\{r\,c_0\,(-iy)^{r-1}+p^{'}(-iy)\}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right).$$

Damit erhält man analog zu der Berechnung des ersten Integrals von $E_n^1 f$ aus Gleichung (3.15)

$$-2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma^{'}(-iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$= \frac{2\,(-1)^{\frac{r-2}{2}}\,c_0\,f(0)\,r}{(2\pi n)^r}\,\Gamma(r)\,\zeta(r)+O\left(\frac{1}{n^{r+1}}\right). \quad (3.28)$$

Diese Ergebnisse fassen wir nun im folgenden Satz zusammen:

Satz 3.4 *Zusätzlich zu den Voraussetzungen von Satz 3.3 nehmen wir an, daß γ eine sigmoidale Transformation der Ordnung $r > 1$ mit geradem r ist. Für hinreichend große n gilt dann*

$$E_n^{[r]} f \;=\; \frac{2\,(-1)^{\frac{r-2}{2}}\,c_0\,r}{(2\pi n)^r}\,\Gamma(r)\,\zeta(r)\,\left[f(0)+f(1)\right]+O\left(\frac{1}{n^{r+1}}\right).$$

Beweis: Setzen wir die Abschätzung von $E_n^2 f$ aus Gleichung (3.16) und die Berechnung der beiden Integrale von $E_n^1 f$ in den Gleichungen (3.27) und (3.28) in Gleichung (3.14) ein, so erhalten wir sofort die Behauptung. ■

Bemerkung 3.5 *Satz 3.4 zeigt, daß $E_n^{[r]} f$ Für gerade r von der Ordnung $O(1/n^r)$ ist.*

Für ungerade r verschwinden I_1 und I_2 aus Gleichung (3.17), so daß $E_n^{[r]} f$ dann von der Ordnung $O(1/n^{r+1})$ ist.

Wir werden als nächstes annehmen, daß r ungerade ≥ 3 ist, und daß γ nur ungerade Potenzen besitzt. Wie der folgende Satz zeigt, liegt dann eine noch höhere Konvergenzordnung vor.

Satz 3.6 *Zusätzlich zu den Voraussetzungen von Satz 3.3 nehmen wir an, daß γ eine sigmoidale Transformation der Ordnung $r > 1$ ist mit $r = 2m+1, m \in \mathbb{N}$, und daß γ nur ungerade Potenzen besitzt. Dann gilt für hinreichend große n*

$$E_n^{[2m+1]} f \;=\; \frac{2\, c_0^2\, (2m+1)}{(2\pi n)^{2(2m+1)}}\, \Gamma(4m+2)\, \zeta(4m+2)\, \left[f'(0) - f'(1)\right] + O\left(\frac{1}{n^{2m+3}}\right). \quad (3.29)$$

Beweis: Da γ nach Voraussetzung nur ungerade Potenzen besitzt, gilt

$$\gamma(z) \;=\; c_0\, z^{2m+1} + \tilde{p}(z)$$

mit c_0 wie oben und, da $\tilde{p}'$ nur gerade Potenzen besitzt, $\left|\tilde{p}'(z)\right| \leq \text{const}\, |z|^{2m+2}$ für alle $|z| \leq Y$.

Wir betrachten nun wieder die Darstellung von $E_n^{[r]} f$ in Gleichung (3.14) und befassen uns zunächst mit dem ersten Anteil $E_n^1 f$: Wir nutzen aus, daß $\operatorname{Im}\left(\gamma'(iy)\right) = 0$, da γ' nur gerade Potenzen besitzt, und erhalten damit für das erste Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15)

$$2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$=\ 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f(\gamma(iy))-f(0)\}\,\gamma^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$=\ 2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f^{'}(0)\gamma(iy)+f(\gamma(iy))-f^{'}(0)\gamma(iy)-f(0)\}\,\{(2m+1)\,c_0\,(iy)^{2m}+\tilde{p}^{'}(iy)\}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$=2\ c_0^2\,f^{'}(0)\,(2m+1)\int_0^\infty \frac{y^{4m+1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\ +\ 2\,(-1)\,c_0^2\,f^{'}(0)\,(2m+1)\int_Y^\infty \frac{y^{4m+1}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy$$

$$+\,2\,c_0\,(2m+1)\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{i^{2m}\,y^{2m}\,[f(\gamma(iy))-f^{'}(0)\gamma(iy)-f(0)]}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$+\,2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy)-f(0))\,\tilde{p}^{'}(iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$=:\tilde{I}_1\ +\ \tilde{I}_2\ +\ \tilde{I}_3\ +\ \tilde{I}_4\,. \tag{3.30}$$

Analog zu den Berechnungen von I_1 und I_2 in den Gleichungen (3.20) und (3.23) ergibt sich für $\tilde{I}_1$ und $\tilde{I}_2$ aus Gleichung (3.30)

$$\tilde{I}_1\ =\ \frac{2\,c_0^2\,f^{'}(0)\,(2m+1)}{(2\pi n)^{2(2m+1)}}\,\Gamma(4m+2)\,\zeta(4m+2),$$

und

$$\left|\tilde{I}_2\right|\ =\ O\left(e^{2\pi nY}\right).$$

Als nächstes betrachten wir $\tilde{I}_3$ aus Gleichung (3.30): Mit Hilfe der Taylorschen Formel erhalten wir

$$f(\gamma(iy))-f^{'}(0)\gamma(iy)-f(0)\ =\ \int_0^{\gamma(iy)}(\gamma(iy)-z)\,f^{''}(z)\,dz;$$

wir können daher abschätzen:

$$\left|f(\gamma(iy))-f^{'}(0)\gamma(iy)-f(0)\right|\ \le\ |\gamma(iy)|^2\cdot\max_{z\in\overline{W}}\left|f^{''}(z)\right|\ \le\ \mathrm{const}\,|y|^{4m+2}.$$

Damit erhält man insgesamt für $\tilde{I}_3$ aus Gleichung (3.30):

$$\left|\tilde{I}_3\right| \leq \text{const} \int_0^Y \frac{y^{6m+2}}{e^{2\pi n y}-1}\, dy;$$

und analog zu der Berechnung von I_1 in Gleichung (3.20) gilt weiter

$$\int_0^Y \frac{y^{6m+2}}{e^{2\pi n y}-1}\, dy = \frac{\text{const}}{(2\pi n)^{3(2m+1)}}\, \Gamma(6m+3)\, \zeta(6m+3);$$

also insgesamt

$$\left|\tilde{I}_3\right| = O\left(n^{-3(2m+1)}\right).$$

Schließlich bleibt noch $\tilde{I}_4$ aus Gleichung (3.30) zu betrachten:
Nach Gleichung (3.24) gilt $|f(\gamma(iy)) - f(0)| \leq \text{const}\, |y|^{2m+1}$ für $0 \leq y \leq Y$. Damit erhalten wir

$$\left|\tilde{I}_4\right| \leq \text{const} \int_0^Y \frac{y^{4m+3}}{e^{2\pi n y}-1}\, dy;$$

und wieder analog zu der Berechnung von I_1 in Gleichung (3.20) gilt weiter

$$\int_0^Y \frac{y^{4m+3}}{e^{2\pi n y}-1}\, dy \leq \frac{\text{const}}{(2\pi n)^{4m+4}}\, \Gamma(4m+4)\, \zeta(4m+4),$$

und damit

$$\left|\tilde{I}_4\right| = O\left(n^{-(4m+4)}\right).$$

Aus den Berechnungen von $\tilde{I}_1$, $\tilde{I}_2$, $\tilde{I}_3$ und $\tilde{I}_4$ erhalten wir also für das Integral in Gleichung (3.30) bzw. für das erste Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15)

$$\begin{aligned} 2\,\mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(\gamma(iy))\gamma'(iy)}{e^{2\pi n y}-1}\, dy\right) &= \frac{2\, c_0^2\, f'(0)\,(2m+1)}{(2\pi n)^{2(2m+1)}}\, \Gamma(4m+2)\, \zeta(4m+2) \\ &\quad + O\left(\frac{1}{n^{4m+4}}\right). \end{aligned} \tag{3.31}$$

Für das zweite Integral von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.15) ergibt sich zunächst

$$-2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma'(-iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$= -2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f(1-\gamma(-iy))-f(1)\}\,\gamma'(-iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$= -2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{\{f'(1)(-\gamma(-iy))+f(1-\gamma(-iy))-f'(1)(-\gamma(-iy))-f(1)\}\,\{\gamma'(-iy)\}}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

Damit erhält man analog zu der Berechnung des ersten Integrals von $E_n^1 f$ in Gleichung (3.31)

$$-2\ \mathrm{Im}\left(\int_0^Y \frac{f(1-\gamma(-iy))\gamma'(-iy)}{e^{2\pi ny}-1}\,dy\right)$$

$$= \frac{-2\,c_0^2\,f'(1)\,(2m+1)}{(2\pi n)^{2(2m+1)}}\,\Gamma(4m+2)\,\zeta(4m+2)+O\left(\frac{1}{n^{4m+4}}\right). \qquad (3.32)$$

Der Anteil $E_n^2 f$ aus Gleichung (3.14) läßt sich wie zuvor mit Hilfe von Lemma 3.2 abschätzen.

Setzt man die Berechnung der beiden Integrale von $E_n^1 f$ in den Gleichungen (3.31) und (3.32) in Gleichung (3.14) ein, so erhält man damit die Behauptung. ■

Bemerkung 3.7 *Vergleicht man das Resultat (3.29) mit dem von Satz 3.4, so sieht man, daß unter den Voraussetzungen von Satz 3.6 eine höhere Konvergenzordnung für den Quadraturfehler vorliegt;* $E_n^{[r]} f$ *ist dann nämlich von der Ordnung* $O\left(1/n^{2r}\right)$*.*

Kapitel 4

Numerische Ergebnisse

Im folgenden sollen nun die in Kapitel 3 gewonnenen Fehlerordnungen anhand einiger numerischer Beispiele illustriert werden.

Dafür benötigen wir ein Beispiel für den Fall einer sigmoidalen Transformation der Ordnung $2m+1$, $m \in \mathbb{N}$, die die Voraussetzungen von Satz 3.6 erfüllt.

Wegen $h(\xi) = h(1-\xi)$ (siehe Gleichung (2.4)) gilt, daß γ dann eine geeignete sigmoidale Transformation der Ordnung $2m+1$ ist, wenn h gerade und periodisch mit der Periode 1 ist und $h(\xi) = O\left(\xi^{2m}\right)$ bei $\xi = 0$ gilt.

Für Transformation 2.11 wählten wir $h(x) = (\sin(\pi x))^{r-1}$; diese Funktion erfüllt für $r = 2m+1$, $m \in \mathbb{N}$, alle genannten Bedingungen, so daß wir also mit Transformation 2.11,

$$\gamma(x) = \frac{\int_0^x (\sin(\pi x))^{r-1}\, dx}{\int_0^1 (\sin(\pi x))^{r-1}\, dx}, \quad r \in \mathbb{N},\ r \geq 2,$$

ein Beispiel gefunden haben, auf das Satz 3.6 angewendet werden kann.

In den Tabellen 4.1, 4.3 und 4.5 sind jeweils der Quadraturfehler und die Fehlerordnung bei Anwendung der obigen Transformation auf drei verschiedene holomorphe Funktionen f dargestellt. Für große n ist gemäß Satz 3.6 für ungerade $r \geq 3$ die Ordnung $O\left(1/n^{2r}\right)$ zu erwarten. Für gerade $r > 1$ hingegen erwarten wir nach Satz 3.4 die Ordnung $O\left(1/n^{r}\right)$.

Zum Vergleich zeigen die Tabellen 4.2, 4.4 und 4.6 den Quadraturfehler und die Fehlerordnung bei Anwendung der Transformation 2.7,

$$\gamma(x) = \frac{x^r}{x^r + (1-x)^r}, \quad r \in \mathbb{N},\ r > 1,$$

auf die drei gleichen Funktionen f.

Da Transformation 2.7 nicht die Voraussetzungen von Satz 3.6 erfüllt, ist für große n nach Satz 3.4 für gerade $r > 1$ die Ordnung $O\left(1/n^r\right)$ zu erwarten, für ungerade $r > 1$ die Ordnung $O\left(1/n^{r+1}\right)$.

Im Fall von Transformation 2.7 liefern die numerischen Ergebnisse die erwarteten Fehlerordnungen.

Bei Anwendung von Transformation 2.11 erhalten wir für gerade r ebenfalls die erwarteten Ergebnisse. Für ungerade $r \geq 3$ gilt dies allerdings nur eingeschränkt: Aufgrund des verwendeten Rechenprogramms erhält man für große n keine korrekten Ergebnisse.

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$
4	$2.69 \cdot 10^{-2}$	$3.71 \cdot 10^{-4}$	$5.90 \cdot 10^{-4}$	$1.21 \cdot 10^{-2}$	$2.54 \cdot 10^{-2}$
8	$6.49 \cdot 10^{-3}$	$4.30 \cdot 10^{-6}$	$1.53 \cdot 10^{-4}$	$3.28 \cdot 10^{-7}$	$1.67 \cdot 10^{-5}$
16	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$6.29 \cdot 10^{-8}$	$9.37 \cdot 10^{-6}$	$3.35 \cdot 10^{-10}$	$2.21 \cdot 10^{-7}$
32	$4.02 \cdot 10^{-4}$	$1.07 \cdot 10^{-9}$	$5.82 \cdot 10^{-7}$	$2.00 \cdot 10^{-10}$	$3.27 \cdot 10^{-9}$
64	$1.00 \cdot 10^{-4}$	$3.10 \cdot 10^{-11}$	$3.63 \cdot 10^{-8}$	$1.78 \cdot 10^{-10}$	$1.51 \cdot 10^{-10}$
n	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$
4	4.14	86.28	3.86	36890	1521
8	4.03	68.36	16.32	979.10	75.57
16	4.00	58.79	16.10	1.67	67.58
32	4.02	34.52	16.03	1.12	21.66
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^{10}\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.1: $f(x) = (1-x)^2$; Transformation 2.11

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$
4	$1.15 \cdot 10^{-2}$	$1.76 \cdot 10^{-2}$	$2.06 \cdot 10^{-2}$	$6.15 \cdot 10^{-3}$	$5.26 \cdot 10^{-2}$
8	$2.60 \cdot 10^{-3}$	$1.29 \cdot 10^{-4}$	$2.42 \cdot 10^{-3}$	$8.63 \cdot 10^{-3}$	$1.56 \cdot 10^{-2}$
16	$6.51 \cdot 10^{-4}$	$1.51 \cdot 10^{-6}$	$2.04 \cdot 10^{-7}$	$2.61 \cdot 10^{-5}$	$2.34 \cdot 10^{-4}$
32	$1.63 \cdot 10^{-4}$	$9.52 \cdot 10^{-8}$	$3.16 \cdot 10^{-8}$	$1.28 \cdot 10^{-10}$	$2.94 \cdot 10^{-9}$
64	$4.07 \cdot 10^{-5}$	$5.96 \cdot 10^{-9}$	$1.98 \cdot 10^{-9}$	$1.73 \cdot 10^{-12}$	$3.44 \cdot 10^{-13}$
128	$1.02 \cdot 10^{-5}$	$3.72 \cdot 10^{-10}$	$1.24 \cdot 10^{-10}$	$2.71 \cdot 10^{-14}$	$5.40 \cdot 10^{-15}$
n	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$
4	4.42	136.43	8.51	0.71	3.37
8	3.99	85.43	11863	330.65	66.76
16	3.99	15.86	6.46	20391	79592
32	4.00	15.97	15.96	73.99	8546.5
64	3.99	16.02	15.96	63.84	63.70
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.2: $f(x) = (1-x)^2$; Transformation 2.7

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$	$\|E_n\|$
4	$2.74 \cdot 10^{-2}$	$5.56 \cdot 10^{-4}$	$2.28 \cdot 10^{-3}$	$1.82 \cdot 10^{-2}$	$3.73 \cdot 10^{-2}$
8	$6.52 \cdot 10^{-3}$	$6.44 \cdot 10^{-6}$	$1.53 \cdot 10^{-4}$	$4.91 \cdot 10^{-7}$	$1.72 \cdot 10^{-5}$
16	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$9.43 \cdot 10^{-8}$	$9.37 \cdot 10^{-6}$	$4.12 \cdot 10^{-10}$	$2.20 \cdot 10^{-7}$
32	$4.02 \cdot 10^{-4}$	$1.46 \cdot 10^{-9}$	$5.82 \cdot 10^{-7}$	$4.50 \cdot 10^{-11}$	$3.38 \cdot 10^{-9}$
64	$1.00 \cdot 10^{-4}$	$1.55 \cdot 10^{-10}$	$3.63 \cdot 10^{-8}$	$1.79 \cdot 10^{-10}$	$1.79 \cdot 10^{-10}$
n	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$	$\|E_n\|/\|E_{2n}\|$
4	4.20	86.34	14.90	37067	2168.6
8	4.05	68.30	16.33	1191.7	78.18
16	4.01	64.59	16.33	9.16	65.09
32	4.02	9.42	16.03	0.2514	18.88
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^{10}\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.3: $f(x) = (1-x)^3$; Transformation 2.11

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$
4	$1.23 \cdot 10^{-2}$	$3.27 \cdot 10^{-2}$	$6.31 \cdot 10^{-2}$	$6.69 \cdot 10^{-2}$	$5.16 \cdot 10^{-2}$
8	$2.60 \cdot 10^{-3}$	$2.13 \cdot 10^{-4}$	$3.98 \cdot 10^{-3}$	$1.54 \cdot 10^{-2}$	$3.19 \cdot 10^{-2}$
16	$6.51 \cdot 10^{-4}$	$1.51 \cdot 10^{-6}$	$5.74 \cdot 10^{-7}$	$4.06 \cdot 10^{-5}$	$3.71 \cdot 10^{-4}$
32	$1.63 \cdot 10^{-4}$	$9.52 \cdot 10^{-8}$	$3.16 \cdot 10^{-8}$	$1.37 \cdot 10^{-10}$	$4.45 \cdot 10^{-9}$
64	$4.07 \cdot 10^{-5}$	$5.96 \cdot 10^{-9}$	$1.98 \cdot 10^{-9}$	$1.73 \cdot 10^{-12}$	$3.44 \cdot 10^{-13}$
128	$1.02 \cdot 10^{-5}$	$3.72 \cdot 10^{-10}$	$1.24 \cdot 10^{-10}$	$2.71 \cdot 10^{-14}$	$5.40 \cdot 10^{-15}$
n	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$
4	4.73	153.52	15.85	4.34	1.62
8	3.99	141.06	6933.8	379.31	85.98
16	3.99	15.86	18.17	296350	83371
32	4.00	15.97	15.96	79.19	12936
64	3.99	16.02	15.97	63.84	63.70
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.4: $f(x) = (1-x)^3$; Transformation 2.7

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$	$\lvert E_n\rvert$
4	$2.79 \cdot 10^{-2}$	$2.07 \cdot 10^{-3}$	$7.64 \cdot 10^{-4}$	$1.55 \cdot 10^{-2}$	$3.63 \cdot 10^{-2}$
8	$6.55 \cdot 10^{-3}$	$8.58 \cdot 10^{-6}$	$1.53 \cdot 10^{-4}$	$7.91 \cdot 10^{-6}$	$4.01 \cdot 10^{-5}$
16	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-7}$	$9.37 \cdot 10^{-6}$	$6.81 \cdot 10^{-9}$	$2.21 \cdot 10^{-7}$
32	$4.02 \cdot 10^{-4}$	$2.03 \cdot 10^{-9}$	$5.82 \cdot 10^{-7}$	$2.10 \cdot 10^{-10}$	$3.52 \cdot 10^{-9}$
64	$1.01 \cdot 10^{-4}$	$1.05 \cdot 10^{-10}$	$3.66 \cdot 10^{-8}$	$1.87 \cdot 10^{-10}$	$5.69 \cdot 10^{-10}$
n	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$	$\lvert E_n\rvert/\lvert E_{2n}\rvert$
4	4.26	241.26	4.99	1959.5	905.24
8	4.07	68.64	16.33	1161.5	181.45
16	4.01	61.58	16.10	32.43	62.78
32	3.98	19.33	15.90	1.12	61.86
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^{10}\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.5: $f(x) = x^4$; Transformation 2.11

	$r=2$	$r=3$	$r=4$	$r=5$	$r=6$
n	$\lvert E_n \rvert$	$\lvert E_n \rvert$	$\lvert E_n \rvert$	$\lvert E_n \rvert$	$\lvert E_n \rvert$
4	$1.13 \cdot 10^{-2}$	$3.40 \cdot 10^{-2}$	$7.63 \cdot 10^{-2}$	$9.51 \cdot 10^{-2}$	$9.54 \cdot 10^{-2}$
8	$2.60 \cdot 10^{-3}$	$5.57 \cdot 10^{-5}$	$3.15 \cdot 10^{-3}$	$1.49 \cdot 10^{-2}$	$3.41 \cdot 10^{-2}$
16	$6.51 \cdot 10^{-4}$	$1.52 \cdot 10^{-6}$	$1.03 \cdot 10^{-6}$	$7.89 \cdot 10^{-6}$	$1.94 \cdot 10^{-4}$
32	$1.63 \cdot 10^{-4}$	$9.52 \cdot 10^{-8}$	$3.16 \cdot 10^{-8}$	$3.26 \cdot 10^{-11}$	$6.45 \cdot 10^{-9}$
64	$4.07 \cdot 10^{-5}$	$5.96 \cdot 10^{-9}$	$1.98 \cdot 10^{-9}$	$1.73 \cdot 10^{-12}$	$3.44 \cdot 10^{-13}$
128	$1.02 \cdot 10^{-5}$	$3.72 \cdot 10^{-10}$	$1.24 \cdot 10^{-10}$	$2.71 \cdot 10^{-14}$	$5.40 \cdot 10^{-15}$
n	$\lvert E_n \rvert / \lvert E_{2n} \rvert$	$\lvert E_n \rvert / \lvert E_{2n} \rvert$	$\lvert E_n \rvert / \lvert E_{2n} \rvert$	$\lvert E_n \rvert / \lvert E_{2n} \rvert$	$\lvert E_n \rvert / \lvert E_{2n} \rvert$
4	4.35	610.41	24.22	6.38	2.80
8	3.99	36.65	3058.3	1888.5	175.77
16	3.99	15.97	32.60	242020	30078
32	4.00	15.97	15.96	18.84	1875
64	3.99	16.02	15.97	63.84	63.70
Fehlerordnung	$O\left(1/n^2\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^4\right)$	$O\left(1/n^6\right)$	$O\left(1/n^6\right)$

Tabelle 4.6: $f(x) = x^4$; Transformation 2.7

Symbolverzeichnis

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{N}_0$	Menge der natürlichen Zahlen mit Null
$\mathcal{C}^m[a,b]$ bzw. $\mathcal{C}^m(a,b)$	Raum der auf dem Intervall $[a,b]$ bzw. (a,b) m-mal stetig differenzierbaren Funktionen
O	LANDAU-Symbol
δ_{ij}	Kronecker-Symbol
$\sum''$	Summe, deren erster und letzter Term halbiert werden
$\mathrm{Re}\,(z)$	Realteil von z
$\mathrm{Im}\,(z)$	Imaginärteil von z
$\mathrm{Int}(\alpha)$	das Innere (Interior) von α
Γ	Gammafunktion
ζ	Riemannsche ζ-Funktion

Literaturverzeichnis

[1] **I.N. Bronstein**, K.A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik*, 3. Aufl., Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, Thun, 1997.

[2] **D. Elliott**, Sigmoidal Transformations and the trapezoidal rule, J. Austral. Maths. Soc. Ser. B **40**, (1998), E77-E137.

[3] **D. Elliott**, The Euler-Maclaurin formula revisited, J. Austral. Maths. Soc. Ser. B **40**, (1998), E27-E76.

[4] **D. Elliott, S. Prößdorf**, An algorithm for the approximate solution of integral equations of Mellin type, Numer. Math. **70**, (1995), 427-452.

[5] **W. Fischer, I. Lieb**, *Funktionentheorie*, 7. Aufl., Verlag Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden, 1994.

[6] **J.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik**, *Table of Integrals, Series and Products*, aus dem Russischen ins Englische von A. Jeffrey, 4. Aufl., Academic Press, New York, 1965.

[7] **R. Kreß**, *Numerical Analysis*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1998.

[8] **F.W.J. Olver**, *Asymptotics and Special Functions*, Academic Press, New York und London, 1974.

[9] **A. Sidi**, A new variable transformation for numerical integration. In: Numerical Integration IV, Hrg. H. Brass und G. Hämmerlin, ISNM Bd. 112, Birkhäuser-Verlag, Basel, 1993, 359-373.

[10] **A. Vogt**, *Substitutionsmethoden beim Nyström-Verfahren für Integralgleichungen zweiter Art*, Diplomarbeit, Institut für Numerische und Angewandte Mathematik Universität Göttingen, Göttingen, 1997.

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt zu haben.