15. VL Einführung in die Num. Mathematik, 3.6.09

Gauß-Quadraturen

Bei den Newton-Cotes-Quadraturformeln ist man von einer vorgegebenen Zahl von äquidistanten Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ ausgegangen und hat eine Näherung des Integrals $\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx$ durch das Integral des Interpolationspolynoms $P_n(x)$ für $(x_k, f(x_k))$, $k=0,\dots,n$, angenähert. Dabei waren als Freiheitsgrade die Integrationsgewichte G_k zu bestimmen.

Bei den Gauß-Quadraturformeln verzichtet man auf die Vorgabe der Stützstellen und versucht diese so zu bestimmen, dass die Näherung des Integrals besser als bei den Newton-Cotes-Formeln wird.

Bei den Gauß-Quadraturen verwendet man als Bezeichnung für die Stützstellen oft $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, da sie sich letztendlich als Nullstellen eines Polynoms n-ten Grades ergeben werden. Wir wollen sie im folgenden aber weiter mit $x_1, \dots, x_n$ bezeichnen und beginnen aber im Unterschied zu den Newton-Cotes-Formeln bei $k=1$ zu zählen.

Ziel ist die Berechnung des Integrals $\int_a^b g(x)\,dx$ wobei man die zu integrierende Funktion in der Form $g(x) = f(x)\varrho(x)$ mit einer Fkt. $\varrho(x)$, die mit der evtl. Ausnahme von endlich vielen Punkten auf $[a,b]$ positiv sein soll, vorgibt. $\varrho(x)$ heißt <u>Gewichtsfunktion</u>. Es ist also das Integral

$$J = \int_a^b f(x)\varrho(x)\,dx = \int_a^b g(x)\,dx$$

numerisch zu berechnen. Im Folgenden geht es darum, Stützstellen $x_k \in [a,b]$ und Integrationsgewichte σ_k so zu bestimmen, dass

$$J_n = \sum_{j=1}^{n} \sigma_j f(x_j) \qquad (4.10)$$

eine möglichst gute Näherung des Integrals J ergibt. Fordert man, dass die Formel (4.10) für alle Polynome $f(x)$ bis zum Grad $2n-1$, d.h. für $x^0, x^1, \ldots, x^{2n-1}$ exakt ist und somit $J_n = J$ gilt, dann müssen die Stützstellen $x_1, \ldots, x_n$ und die Gewichte $\sigma_1, \ldots, \sigma_n$ Lösungen des Gleichungssystems

$$\sum_{j=1}^{n} \sigma_j x_j^k = \int_a^b x^k \varrho(x)\,dx \quad (k=0,1,\ldots,2n-1) \qquad (4.11)$$

sein.

Wir werden im Folgende zeigen, dass das Gleichungssystem (4.11) eindeutig lösbar ist, dass für die Stützstellen $x_k \in]a,b[$ gilt und dass die Gewichte σ_k positiv sind.

Zuerst ein Beispiel:

Für die Berechnung von $\int_{-1}^{1} f(x) g(x)\, dx$ mit der Gewichtsfunktion $g(x) \equiv 1$ und der Vorgabe von $n=2$ bedeutet (4.11) mit

$$\int_{-1}^{1} dx = 2\,,\quad \int_{-1}^{1} x\, dx = 0\,,\quad \int_{-1}^{1} x^2\, dx = \frac{2}{3}\,,\quad \int_{-1}^{1} x^3\, dx = 0$$

das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \sigma_1 + \sigma_2 &= 2 \\ \sigma_1 x_1 + \sigma_2 x_2 &= 0 \\ \sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 &= \frac{2}{3} \\ \sigma_1 x_1^3 + \sigma_2 x_2^3 &= 0\,. \end{aligned} \qquad (4.12)$$

Für (4.12) findet man mit

$$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\,,\quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\,,\quad \sigma_1 = \sigma_2 = 1$$

eine Lösung und damit ist die Quadraturformel $I_2 = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

für alle Polynome $f(x)$ bis zum Grad 3 exakt, d.h. es gilt $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$.

Wir sind also besser als mit der Trapezregel.

Orthogonale Polynome

Die beiden Stützstellen aus dem oben diskutierten Beispiel sind mit $-\frac{1}{\sqrt{3}}$ und $\frac{1}{\sqrt{3}}$ gerade die Nullstellen des Legendre-Polynoms $P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$ zweiten Grades. Das ist kein Zufall sondern darin steckt eine Systematik. Deshalb sollen im Folgenden orthogonale Polynome besprochen werden.

Mit einer Gewichtsfunktion $\varrho(x)$ statten wir den Vektorraum $\mathcal{P}$ aller Polynome über dem Körper der reellen Zahlen mit dem Skalarprodukt

$$\langle p, q\rangle_\varrho := \int_a^b p(x)\, q(x)\, \varrho(x)\, dx \qquad (4.13)$$

für $p, q \in \mathcal{P}$ aus. Folglich ist durch

$$\|p\|_\varrho^2 = \langle p, p\rangle_\varrho = \int_a^b p^2(x)\, \varrho(x)\, dx \qquad (4.14)$$

eine Norm definiert. Der Nachweis, dass (4.13), (4.14) Skalarprodukt bzw Norm sind, sollte als Übung erbracht werden.

Definition 4.

Die Polynome $p, q \in \mathcal{P}$ heißen <u>orthogonal</u> bezügl. $\langle \cdot, \cdot \rangle_\varrho$, wenn

$$\langle p, q\rangle_\varrho = 0$$

gilt. Ist V ein Unterraum von $\mathcal{P}$, dann wird durch

$$V^{\perp} = \{ f \in \mathcal{P} \mid \langle f, p \rangle_{\varrho} = 0 \text{ f.a. } p \in V \}$$

das orthogonale Komplement von V bezeichnet.

Die lineare Hülle der Funktionen $p_1, \dots, p_n \in \mathcal{P}$ wird durch

$$\operatorname{span}\{p_1, \dots, p_n\} = \{ c_1 p_1 + \dots + c_n p_n \mid c_1, \dots, c_n \in K \}$$

definiert, wobei K der Zahlkörper ist, über dem der Vektorraum der Polynome $\mathcal{P}$ betrachtet wird (und wenn nichts anderes gesagt wird, betrachten wir $K = \mathbb{R}$).

Konstruktion von Folgen orthogonaler Polynome

Wir wissen, dass die Monome $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$ eine Basis zur Konstruktion von Polynomen bilden. Mit $p_0(x) = 1$ wird durch

$$p_n(x) = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\langle x^n, p_j \rangle_{\varrho}}{\langle p_j, p_j \rangle_{\varrho}} \, p_j(x), \qquad (4.15)$$

also mit dem Orthogonalisierungsverfahren von Gram-Schmidt eine Folge paarweise orthogonaler Polynome definiert (bezügl. des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\varrho}$).

Beispiel

Mit $[a,b] = [-1,1]$ und $\varrho(x) = 1$ erhält man ausgehend von $p_0(x)=1$ mit

$$p_1(x)=x\,,\ p_2(x)=x^2-\frac{1}{3}\,,\ p_3(x)=x^3-\frac{3}{5}x\,,\ p_4(x)=x^4-\frac{5}{7}x^2+\frac{4}{105} \tag{4.16}$$

paarweise orthogonale Polynome bezügl. des Skalarproduktes

$$\langle p,q\rangle_g=\int_{-1}^{1}p(x)q(x)\,dx\,.$$

Die eben konstruierten orthogonalen Polynome heißen <u>Legendre-Polynome</u>.

Bemerkung 4.5

Bezeichnet man durch $\mathbb{P}_k=\operatorname{span}\{p_0,p_1,\dots,p_k\}$ den Vektorraum der Polynome bis zum Grad k, dann gilt allgemein für die Folge paarweise orthogonaler Polynome $p_0,\dots,p_n$ mit aufsteigendem Grad

$$p_n\in\mathbb{P}_{n-1}^{\perp}\,,$$

was zur Übung gezeigt werden sollte.

Beispiel

Mit $[a,b]=[-1,1]$ und der Gewichtsfunktion $g(x)=(1-x^2)^{-1/2}=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ erhält man mit dem Gram-Schmidt-Verfahren (4.15) ausgehend von $p_0=1$ mit

$$p_0(x)=1\,,\ p_1(x)=x\,,\ p_2(x)=x^2-\frac{1}{2}\,,\ p_3(x)=x^3-\frac{3}{4}x \tag{4.17}$$

die orthogonalen Tschebyscheff-Polynome (Art.

Sowohl bei den Legendre- als auch bei den Tschebyscheff-Polynomen findet man jeweils einfache reelle Nullstellen, die im Intervalle $]a,b[$ liegen. Generell gilt der

Satz 4.6

Die Nullstellen des n-ten Orthogonalpolynoms bezügl. eines Intervalls $[a,b]$ und einer Gewichtsfunktion g sind einfach, reell und liegen im Intervalle $]a,b[$

Beweis: Plato

Nun kommen wir zur Definition der Gauß-Quadratur.

Definition 4.7

Mit $x_1, x_2, \ldots, x_n$ seien die Nullstellen des n-ten Orthogonalpolynoms $p_n(x)$ gegeben. Die numerische Integrationsformel

$$J_n = \sum_{j=1}^{n} \sigma_j f(x_j) \quad \text{mit } \sigma_j = \langle L_j, 1 \rangle_g = \int_a^b L_j(x) g(x)\, dx \tag{4.18}$$

heißt Gauß'sche Quadraturformel der n-ten Ordnung oder kurz Gauß-Quadratur zur Gewichtsfunktion g.

Im Folgenden wird gezeigt, dass die Stützstellen x_k und Gewichte σ_k als Lösung des Gleichungssystems (4.11) gerade die Nullstellen des n-ten Orthogonalpolynoms $p_n(x)$ bzw. die Gewichte gemäß (4.18) sind und damit die Gleichwertigkeit der Formeln (4.10) und (4.18) nachgewiesen.

Satz 4.8

Mit $x_1, x_2, \dots, x_n$ seien die Nullstellen des n-ten Orthogonalpolynoms $p_n(x)$ gegeben. Es existiert eine eindeutig bestimmte Gauß-Quadratur (4.18). Bei der Gauß-Quadratur sind alle Gewichte gemäß (4.18) positiv und die Quadratur ist für jedes Polynom vom Grad $m \leq 2n-1$ exakt, d.h. es gilt

$$\int_a^b p(x)\varrho(x)\,dx = \langle p, 1\rangle_\varrho = \sum_{j=1}^n \sigma_j p(x_j), \quad \text{f.a. } p \in \mathbb{P}_{2n-1} \tag{4.19}$$

Außerdem ist die Quadratur interpolatorisch, d.h. es gilt für das Interpolationspolynom q_{n-1} zu den Stützpunkten $(x_j, f(x_j))$, $j=1,\dots,n$

$$\int_a^b q_{n-1}(x)\varrho(x)\,dx = \sum_{j=1}^n \sigma_j q_{n-1}(x_j) = \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j).$$

Beweis

Wir betrachten ein Polynom $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$ mit Grad $m \leq 2n-1$. Durch Polynomdivision findet man für das n-te Orthogonalpolynom

Polynome $q, r \in \mathcal{P}_{n-1}$ mit

$$\frac{p}{p_n} = q + \frac{r}{p_n} \iff p = q\,p_n + r.$$

Mit den Nullstellen $x_1, \dots, x_n$ von p_n gilt $p(x_j) = r(x_j)$ für $j = 1, 2, \dots, n$. Das Lagrange'sche Interpolationspolynom für $r(x)$ ergibt

$$r(x) = \sum_{j=1}^{n} r(x_j) L_j(x) = \sum_{j=1}^{n} p(x_j) L_j(x).$$

Wegen $\langle q, p_n \rangle_\varrho = 0$ gilt

$$\int_a^b p(x)\varrho(x)\,dx = \langle p, 1\rangle_\varrho = \langle r, 1\rangle_\varrho = $$

$$= \sum_{j=1}^{n} p(x_j) \langle L_j, 1\rangle_\varrho = \sum_{j=1}^{n} \sigma_j p(x_j).$$

Für $p(x) = L_j^2(x) \in \mathcal{P}_{2n-2}$ ergibt die eben nachgewiesene Formel (4.19)

$$0 < \|L_j\|_\varrho^2 = \langle L_j^2, 1\rangle_\varrho = \sum_{k=1}^{n} \sigma_k L_j^2(x_k) = \sigma_j$$

Wegen $L_j^2(x_k) = \delta_{jk}^2$ die Positivität der Gewichte. Zum Nachweis der Eindeutigkeit der Gauß-Quadratur nimmt man an, dass eine weitere Formel

$$I_n^* = \sum_{j=1}^{n} \sigma_j^* f(x_j^*) \qquad (4.20)$$

existiert mit $x_k^* \neq x_j^*$ für $k \neq j$, deren Genauigkeitsgrad gleich $2n-1$ ist. Die Positivität der σ_j^* wird analog der Positivität der σ_j gezeigt.

für das Hilfspolynom vom Grad $2n-1$

$$h(x) = L_k^*(x)\, p_n(x), \quad L_k^*(x) = \prod_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} \frac{(x-x_j^*)}{(x_k^*-x_j^*)}$$

ergibt (4.20) den exakten Wert des Integrals für $h(x)$, also

$$\int_a^b h(x)\varrho(x)\,dx = \int_a^b L_k^*(x)\,p_n(x)\varrho(x)\,dx =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \sigma_j^* L_k(x_j^*)\,p_n(x_j^*) = \sigma_k^*\, p_n(x_k^*)$$

für alle $k=1,\dots,n$. Da das 2. Integral $\int_a^b L_k^*(x) p_n(x)\varrho(x)\,dx = \langle L_k^*, p_n\rangle_\varrho$ wegen der Orthogonalität von p_n zu allen Polynomen bis zum Grad $n-1$ gleich null ist, folgt $\sigma_k^* p_n(x_k^*) = 0$ f. a. $k=1,\dots,n$. Wegen der Positivität der Gewichte müssen die x_k^* Nullstellen des n-ten Orthogonalpolynoms $p_n(x)$ sein, die eindeutig bestimmt sind. Damit ist die Eindeutigkeit der Gauß-Quadratur bewiesen. $\square$

Auf der Grundlage des Fehlers der Polynominterpolation von $f(x)$ durch ein Polynom n-ten Grades kann man den Fehler der Gauß-Quadratur bestimmen, es gilt der

Satz 4.9

Mit den Stützstellen und Gewichten aus Satz 4.8 gilt für auf dem Intervall $[a,b]$ $2n$-mal stetig diff'bare Funktion $f(x)$

$$\int_a^b f(x)\varrho(x)\,dx - \sum_{j=1}^{n} \sigma_j f(x_j) = \frac{\|p_n\|_\varrho^2}{(2n)!}\, f^{(2n)}(\xi) \qquad (4.21)$$

mit einem Zwischenwert $\xi \in\,]a,b[$.