10. Gauß–Quadratur

Wir beschreiben in diesem Abschnitt ein Verfahren zur numerischen Berechnung bestimmter Integrale, das die besonderen Eigenschaften spezieller Funktionen, insbesondere die Entwicklung einer stetigen Funktion nach *orthogonalen Polynomen* verwendet.

Gauß–Quadraturverfahren haben gegenüber den interpolatorischen Verfahren auf äquidistanten Gittern (Newton–Cotes Verfahren) die Vorteil höherer Genauigkeit bei gleicher Stützstellenzahl, jedoch wegen der auftretenden nichtäquidistanten Gitter auch den Nachteil, dass Gitterverfeinerungen i. Allg. nur bei völliger Neuauswertung des Integranden möglich sind.

Gauß–Quadraturformeln dienen der numerischen Berechnung *gewichteter Integrale* vom Typ

$$I(f) \;:=\; \int\limits_a^b \omega(t)\, f(t)\, dt. \tag{10.1}$$

Dabei ist $\omega :]a,b[\to \mathbb{R}$ eine stetige *Gewichtsfunktion*, die die folgenden Voraussetzungen erfüllen möge

- $\omega(t) > 0$, $a < t < b$. Singularitäten in a, b sind möglich!
- Für alle $f \in \mathrm{C}[a,b]$ sei das Integral $\int_a^b \omega(t) f(t) dt$ wohldefiniert und endlich.

Unser Ziel ist die Gewinnung einer möglichst guten Quadraturformel der Form

$$\widehat{I}_n(f) \;=\; \sum_{k=0}^{n} g_{k\,n}\, f(\tau_{k\,n}). \tag{10.2}$$

Die $\tau_{k\,n}$ heißen die *Knoten*, die $g_{k\,n}$ die *Gewichte* der Quadraturformel (10.2). Die Güte der Quadraturformel messen wir dadurch, dass wir verlangen, dass die Quadraturformel für Polynome von möglichst hohem Grad m exakt sein soll:

$$\forall\, P \in \Pi_m : \quad \widehat{I}_n(P) = I(P). \tag{10.3}$$

Wir sagen in diesem Fall auch, dass die Quadraturformel (10.2) den Grad m besitzt.

Bemerkungen (10.4)

a) Wie groß kann m maximal sein? Die Quadraturformel (9.2) enthält $2\,n+2$ freie Parameter $\tau_{k\,n}$ und $g_{k\,n}$. Der Polynomraum Π_m hat die Dimension $m+1$. Daher erwarten wir, dass i. Allg. maximal $m = 2\,n+1$ zu erreichen ist.

b) Im Prinzip bräuchte man nur die Knoten $\tau_{k\,n}$ möglichst geschickt zu wählen. Die Gewichte $g_{k\,n}$ könnte man nämlich dann mit Hilfe der *Lagrange-Polynome*

$$L_j(t) \;=\; \sum_{i \neq j} (t - \tau_{i\,n})/(\tau_{j\,n} - \tau_{i\,n}), \qquad j = 0, \ldots, n,$$

zu den Knoten $(\tau_{k\,n})$ berechnen ($m \geq n$ vorausgesetzt):

$$g_{j\,n} \;=\; \sum_{k=0}^{n} g_{k\,n}\, L_j(\tau_{k\,n}) \;=\; \int_a^b \omega(t)\, L_j(t)\, dt. \tag{10.5}$$

In der Praxis werden die Gewichte $g_{k\,n}$ jedoch zumeist gemeinsam mit den Knoten $\tau_{k\,n}$ mit Hilfe eines Eigenwertproblems bestimmt (vgl. Golub, Welsch: Mathem. Comp. 1969).

Satz (10.6) (über Orthogonalpolynome)

a) Unter den obigen Voraussetzungen ist durch

$$\langle f, g \rangle \;:=\; \int\limits_a^b \omega(t)\, f(t)\, g(t)\, dt$$

ein Skalarprodukt auf $\mathrm{C}[a, b]$ gegeben.

b) Es gibt eine eindeutig bestimmte Folge von Polynomen $P_k \in \Pi_k$, $k = 0, 1, \ldots,$ mit den Eigenschaften

- $\langle P_j, P_k \rangle \;=\; 0$ für $j \neq k$, (Orthogonalität)
- $P_k(t) \;=\; t^k + \alpha_{k-1,k} x^{k-1} + \ldots$ (Normierung)

(10.7)

Die $(P_k)_{k \in \mathbb{N}_0}$ heißen die (normierten) Orthogonalpolynome zum Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

c) Die Orthogonalpolynome genügen einer *Dreitermrekursion*

$$P_k(t) \;=\; (t + a_k)\, P_{k-1}(t) \,+\, b_k\, P_{k-2}(t), \qquad k = 1, 2, \ldots \qquad (10.8)$$

mit den Koeffizienten

$$a_k \;=\; -\,\frac{\langle t\, P_{k-1}, P_{k-1}\rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1}\rangle}, \qquad b_k \;=\; -\,\frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1}\rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2}\rangle} \qquad (10.9)$$

und den Anfangswerten $P_{-1}(t) := 0$, $P_0(t) := 1$, $b_1 := 1$.

Beweis: **zu a):** Direktes Nachprüfen der Axiome.
zu b): Gram–Schmidt Orthogonalisierung.
zu c): Induktionsbeweis; seien $P_0, \ldots, P_k$ bereits konstruiert.
Aufgrund der Normierung gilt $P_k(t) - t\, P_{k-1}(t) \in \Pi_{k-1}$, also

$$\exists\, c_0, \ldots, c_{k-1} : \qquad P_k - t\, P_{k-1} \;=\; \sum_{\ell=0}^{k-1} c_\ell\, P_\ell$$

Wir bilden nun das Skalarprodukt dieser Gleichung mit P_j.

Es folgt

$$c_j \;=\; \frac{\langle P_k - t\,P_{k-1}, P_j\rangle}{\langle P_j, P_j\rangle}, \qquad j = 0,\ldots,k-1.$$

Da $P_k \perp P_j$, $j = 0,\ldots,k-1$, folgt

$$c_j \;=\; -\frac{\langle t\,P_{k-1}, P_j\rangle}{\langle P_j, P_j\rangle} \;=\; -\frac{\langle P_{k-1}, t\,P_j\rangle}{\langle P_j, P_j\rangle},$$

und daher, da ja auch $P_{k-1} \perp \Pi_{k-2}$, ist $c_0 = c_1 = \ldots = c_{k-3} = 0$.
Weiter ist

$$c_{k-1} \;=\; -\frac{\langle t\,P_{k-1}, P_{k-1}\rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1}\rangle} \;=:\; a_k$$

$$c_{k-2} \;=\; -\frac{\langle P_{k-1}, t\,P_{k-2}\rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2}\rangle} \;=\; -\frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1}\rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2}\rangle} \;=:\; b_k\,.$$

Damit folgt insgesamt

$$P_k - t\,P_{k-1} \;=\; a_k\,P_{k-1} + b_k\,P_{k-2} \qquad \square$$

Beispiele (10.10)

a) Die Funktionen

$$T_n(t) \;:=\; \cos(n \arccos t), \; -1 \le t \le 1, \quad n \in \mathbb{N}_0, \tag{10.11}$$

genügen der Dreitermrekursion (cos − Additionstheorem!)

$$\begin{aligned} T_0(t) &= 1, \quad T_1(t) \;=\; t, \\ T_{k+1}(t) &= 2\,t\,T_k(t) - T_{k-1}(t), \quad k = 1, 2, \ldots \end{aligned} \tag{10.12}$$

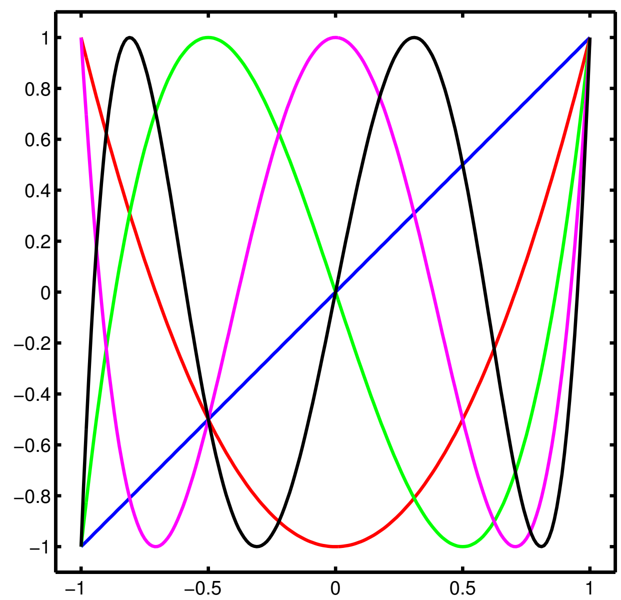
Sie sind daher Polynome, genauer

$$T_n \;\in\; \Pi_n, \quad T_n(t) \;=\; 2^{n-1}\,t^n + \ldots, \tag{10.13}$$

und heißen *Tschebyscheff–Polynome erster Art.*

Die T_n sind Orthogonalpolynome über $[-1,1]$ bzgl. der Gewichtsfunktion $\omega(t) = 1/\sqrt{1-t^2}$, genauer gilt

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} T_n(t)\, T_m(t)\, dt = \begin{cases} 0, & \text{für } n \neq m \\ \pi, & \text{für } n = m = 0 \\ \pi/2, & \text{für } n = m \neq 0 \end{cases} \qquad (10.14)$$



b) Die *Legendre–Polynome*

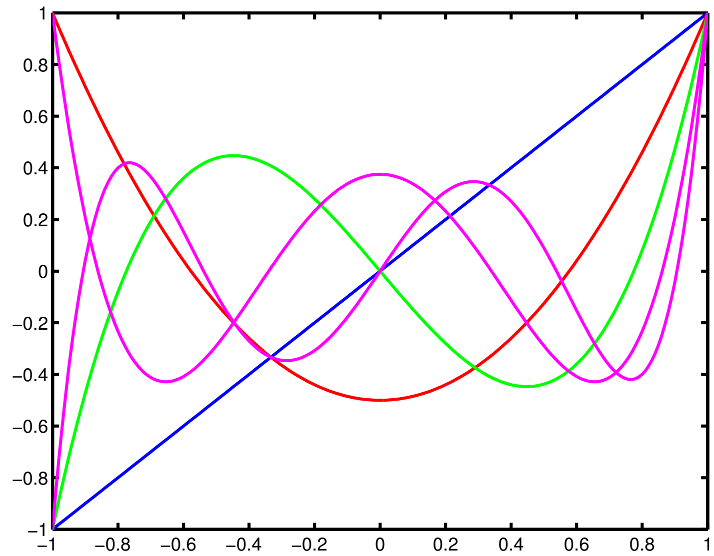
$$P_n(t) \;=\; \frac{1}{2^n\, n!}\,\frac{d^n}{d\,t^n}\,[(t^2-1)^n] \tag{10.15}$$

genügen der Dreitermrekursion

$$\begin{aligned} P_0(t) &= 1, \quad P_1(t) \;=\; t, \\ P_{k+1}(t) &= \frac{2\,k+1}{k+1}\,t\,P_k(t) \;-\; \frac{k}{k+1}\,P_{k-1}(t). \end{aligned} \tag{10.16}$$

Sie sind Orthogonalpolynome über $[-1,1]$ bezüglich der Gewichtsfunktion $\omega(t) = 1$. Genauer gilt

$$\int_{-1}^{1} P_n(t)\,P_m(t)\,dt \;=\; \begin{cases} 0, & \text{für} \quad n \neq m \\ 2/(2\,n+1), & \text{für} \quad n = m \end{cases} \tag{10.17}$$



Satz (10.18) (Nullstellen von Orthogonalpolynomen)

Das Orthogonalpolynom $P_{n+1} \in \Pi_{n+1}$ hat genau $(n+1)$ einfache Nullstellen $\tau_{0\,n}, \ldots, \tau_{n\,n}$ im offenen Intervall $]a, b[$.

Beweis: Wir nehmen an, dass das Polynom P_{n+1} auf dem Intervall $[a, b]$ genau in den Punkten $t_1, \ldots, t_m \in\,]a, b[$ sein Vorzeichen wechselt; es ist $m \leq n+1$; $m = 0$ ist dabei zugelassen. Setze $Q(t) := \pm(t - t_1) \cdot \ldots \cdot (t - t_m) \in \Pi_m$.

Dann folgt durch geeignete Anpassung des Vorzeichens o.E.d.A.

$$\langle Q, P_{n+1} \rangle \;=\; \int_a^b \omega(t)\, Q(t)\, P_{n+1}(t)\, dt \;>\; 0.$$

Da aber nach Konstruktion der Orthogonalpolynome $P_{n+1} \perp \Pi_n$ gilt, ist Q nicht in Π_n, d.h. es gilt $m \geq n+1$, also auch $m = n+1$. $\square$

Im Folgenden wählen wir gerade die $n+1$ einfachen Nullstellen des Orthogonalpolynoms P_{n+1} als Knoten einer Quadraturformel.

Satz (10.19) (Gauß Quadratur)

Sind $a < \tau_{0\,n} < \ldots < \tau_{n\,n} < b$ die Nullstellen des Orthogonalpolynoms P_{n+1} zur Gewichtsfunktion ω auf $[a, b]$ und berechnet man die Gewichte $g_{k\,n}$ gemäß (10.5), so ist die zugehörige Gauß Quadraturformel $\widehat{I}_n$ von der (maximalen) Ordnung $m = 2\,n+1$.

Beweis:

Sei $P \in \Pi_m$, $m = 2\,n+1$. Durch Abdividieren des Orthogonalpolynoms P_{n+1} erhält man Polynome Q, $R \in \Pi_n$ mit

$$P(t) \;=\; Q(t)\,P_{n+1}(t) \;+\; R(t).$$

Für die Quadraturknoten gilt nun $P(\tau_{i\,n}) = R(\tau_{i\,n})$. R kann somit durch die Lagrange-Interpolationspolynome ausgedrückt werden (Lagrange-Interpolationsformel):

$$R(t) \;=\; \sum_{k=0}^{n} P(\tau_{k\,n})\,L_k(t).$$

Damit folgt

$$I(P) \;=\; \int_a^b \omega(t)\,P(t)\,dt \;=\; \int_a^b \omega(t)\,[Q(t)P_{n+1}(t) \;+\; R(t)]\,dt$$

$$
\begin{aligned}
&= \langle Q, P_{n+1} \rangle \; + \; \int\limits_a^b \omega(t)\, R(t)\, dt \\
&= 0 \; + \; \sum_{k=0}^{n} P(\tau_{k\,n}) \int\limits_a^b \omega(t)\, L_k(t)\, dt \\
&= \sum_{k=0}^{n} P(\tau_{k\,n})\, g_{k\,n} \; = \; \widehat{I}_n(P). \qquad \square
\end{aligned}
$$

Anmerkungen (10.20)

a) Die Gewichte $g_{i\,n}$ einer Gauß–Formel sind stets positiv.

b) Es gilt die *Fehlerdarstellung:*

$$
I(f) - \widehat{I}_n(f) \;=\; \frac{f^{(2\,n+2)}(\xi)}{(2\,n+2)!} \int\limits_a^b \omega(t) \prod_{k=0}^{n} (t - \tau_{k\,n})^2 \, dt
$$

Beweis: **zu a):** Für $k \in \{0,\ldots,n\}$ sei $P_k(t) := \prod_{j\neq k}(t-\tau_{j\,n})^2 \in \Pi_{2\,n}$. Da $\omega(t) > 0$ folgt

$$\begin{aligned} 0 < \int_a^b \omega(t)\,P_k(t)\,dt &= \sum_{\ell=0}^{n} g_{\ell\,n} \prod_{j\neq k} (\tau_{\ell\,n} - \tau_{j\,n})^2 \\ &= g_{k\,n} \prod_{j\neq k} (\tau_{k\,n} - \tau_{j\,n})^2, \end{aligned}$$

und damit $g_{k\,n} > 0$.

zu b): Ist $P \in \Pi_{2\,n+1}$ das Hermite-Interpolationspolynom zu den Stützstellen $(\tau_{k\,n}, f(\tau_{k\,n}), f'(\tau_{k\,n}))$, $k = 0,1,\ldots,n$, so gilt die Fehlerdarstellung

$$f(t) - P(t) = \frac{f^{(2\,n+2)}(\xi)}{(2\,n+2)!} \prod_{k=0}^{n} (t - \tau_{k\,n})^2,$$

mit $\xi = \xi(t) \in\,]a,b[$. Die Gauß–Formel liefert hiermit

$$
\begin{aligned}
I(f) - \widehat{I}_n(f) &= I(f) - I(P) \\
&= \int\limits_a^b \omega(t) \, \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \prod_{k=0}^{n} (t - \tau_{kn})^2 \, dt \\
&= \frac{f^{(2n+2)}(\xi_0)}{(2n+2)!} \int\limits_a^b \omega(t) \prod_{k=0}^{n} (t - \tau_{kn})^2 \, dt
\end{aligned}
$$

Die letzte Gleichung gilt aufgrund des Mittelwertsatzes der Integralrechnung. $\square$

In der folgenden Tabelle sind einige prominente Beispiele von Orthgonalpolynomen angegeben. Ausführliche Angaben zu Knoten und Gewichten findet man in Abramowitz, Stegun.

$[a,b]$	$\omega(t)$	Orthog.polynome	Name
$[-1,1]$	1	$P_n = \dfrac{1}{2^n\,n!}\,\dfrac{d^n}{dt^n}[(t^2-1)^n]$	Legendre
$[-1,1]$	$1/\sqrt{1-t^2}$	$T_n = \cos[n\ \arccos t]$	Tschebyscheff
$[-1,1]$	$\sqrt{1-t^2}$	$U_n = \dfrac{\sin[(n+1)\ \arccos t]}{\sqrt{1-t^2}}$	Tschebyscheff
$[0,\infty[$	e^{-t}	$L_n = \mathrm{e}^{t}\,\dfrac{d}{dt^n}[t^n\,\mathrm{e}^{-t}]$	Laguerre
$[-\infty,\infty[$	e^{-t^2}	$H_n = (-1)^n\,\mathrm{e}^{t^2}\,\dfrac{d}{dt^n}[t^n\,\mathrm{e}^{-t^2}]$	Hermite

Beispiel (10.21)

Wir berechnen $\int_0^{\pi/2} \sin x \, dx$ mittels Gauß–Legendre Quadratur mit $n = 2$ (3 Knoten). Die Legendre-Polynome sind (Dreitermrekursion) $P_0 = 1$, $P_1 = t$, $P_2 = (3/2)t^2 - (1/2)$, $P_3 = (5/2)t^3 - (3/2)t$. Die Knoten und Gewichte sind damit, vgl. (10.19),

Knoten	*Gewichte*
$\pm\sqrt{3/5}$	$5/9$
0	$8/9$

$$\int_0^{\pi/2} \sin x \, dx \;=\; \frac{\pi}{4} \int_{-1}^{1} \sin(\frac{\pi}{4}(t+1)) \, dt \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\widehat{I}(f) &= \frac{\pi}{4}\{\frac{5}{9}\,\sin(\frac{\pi}{4}(1-\sqrt{3/5})) + \frac{8}{9}\sin(\frac{\pi}{4}) \\ &+ \frac{5}{9}\,\sin(\frac{\pi}{4}(1+\sqrt{3/5}))\} \approx 1.0000\,08122\end{aligned}$$

Man hat also bei drei Knoten bereits eine Genauigkeit von 10^{-5}.