

## 10.10 Die Gaußschen Quadraturverfahren

Wir wollen für eine nichtnegative Funktion  $\omega: (a, b) \rightarrow [0, \infty)$  das zugehörige gewichtete Integrationsproblem

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx \approx \sum_{j=0}^n w_j f(x_j)$$

numerisch lösen, indem wir uns erneut auf den Spuren von Gauß bewegen. In einer Arbeit zur numerischen Integration aus dem Jahr 1814 verfolgte er folgenden Ansatz: Er sah in der optimalen Wahl von  $n+1$  Stützstellen  $x_0, \dots, x_n$  und  $n+1$  Gewichten  $w_0, \dots, w_n$  die Möglichkeit, das Integral von Polynomen vom Grad kleiner oder gleich  $2n+1$  exakt zu berechnen. Wird dieses Ziel erreicht, so wird insbesondere das Integral der zu den Stützstellen gehörigen Interpolationspolynome  $p_n(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j)\ell_j(x)$  exakt berechnet, und die Gewichte müssen durch die Formel

$$w_j = \int_a^b \ell_j(x)\omega(x)dx, \quad j = 0, \dots, n$$

beschrieben sein, wobei  $\ell_j(x) = \prod_{k \neq j} (x - x_k)/(x_j - x_k)$  das  $j$ -te Lagrange-Polynom ist (vgl. Abschnitt 10.7). Da  $\ell_j(x_j) = 1$  und  $\ell_j(x_k) = 0$  für  $j \neq k$  gilt und  $\ell_j(x)^2$  ein Polynom vom Grad  $2n$  ist, gilt dann auch

$$w_j = \sum_{k=0}^n w_k \ell_j(x_k)^2 = \int_a^b \ell_j(x)^2 \omega(x)dx > 0.$$

Die Stützstellen sind durch die Zielvorgabe auch eindeutig festgelegt. Bevor wir sie im Detail angeben, erlauben wir uns einen kurzen Diskurs über orthogonale Polynome.

Eine Folge von Polynomen  $(\pi_j)_{j \geq 0}$ , deren  $j$ -tes Folgenglied ein Polynom vom Grad  $j$  mit führendem Koeffizienten 1 ist, heißt *orthogonal* bezüglich  $\omega$ , falls

$$\int_a^b \pi_j(x)\pi_k(x)\omega(x)dx = 0, \quad j \neq k$$

gilt. Eine solche Polynomfolge ist durch die Orthogonalitätsbedingung und die Forderung, dass der führende Koeffizient 1 ist, eindeutig bestimmt. Sie erfüllt eine Dreiterm-Rekursion

$$\pi_{j+1}(x) = (x - \alpha_j)\pi_j(x) - \beta_j\pi_{j-1}(x), \quad \pi_0(x) = 1, \quad \pi_1(x) = x + \alpha_0,$$

für deren Koeffizienten

$$\alpha_j = \frac{\int_a^b x\pi_j(x)^2\omega(x)dx}{\int_a^b \pi_j(x)^2\omega(x)dx}, \quad \beta_j = \frac{\int_a^b \pi_j(x)^2\omega(x)dx}{\int_a^b \pi_{j-1}(x)^2\omega(x)dx}$$

gilt. Für viele klassische orthogonale Polynomsysteme sind die Rekursionskoeffizienten bekannt. Besonders einfach sind sie im Fall der *Legendre-Polynome* und der *Chebyshev-Polynome erster Art*, die von Adrien-Marie Legendre (1783) beziehungsweise Pafnuty Chebyshev (1854) eingeführt wurden. Beide Systeme gehören zu Gewichtsfunktionen auf dem Intervall  $(-1, 1)$ . Für die Legendre-Polynome ist es die Eins-Funktion  $\omega(x) = 1$ , welche die Koeffizienten  $\alpha_j = 0$ ,  $j \geq 0$ , und  $\beta_j = 1/(4 - j^{-2})$ ,  $j \geq 1$ , erzeugt. Für die Chebyshev-Polynome ist es die Funktion  $\omega(x) = 1/\sqrt{1 - x^2}$ , welche zu den Koeffizienten  $\alpha_j = 0$ ,  $j \geq 0$ , und  $\beta_1 = \frac{1}{2}$ ,  $\beta_j = \frac{1}{4}$ ,  $j \geq 2$ , führt.

Die Stützstellen der Gaußschen Quadratur stammen von dem zu  $\omega$  gehörigen orthogonalen Polynomsystem. Das  $j$ -te orthogonale Polynom  $\pi_j$  besitzt  $j$  verschiedene Nullstellen im Intervall  $(a, b)$ , und die Stützstellen  $x_0, \dots, x_n$  müssen genau die  $n + 1$  Nullstellen des  $(n + 1)$ -ten orthogonalen Polynoms sein. Die Gauß-Chebyshev-Quadraturformel wird dann beispielsweise aus den Gewichten  $w_j = \frac{\pi}{n+1}$  und den Stützstellen  $x_j = \cos\left(\frac{2j+1}{n+1} \frac{\pi}{2}\right)$  aufgebaut.

Für die Integration bezüglich anderer Gewichtsfunktionen erlaubt die Dreiterm-Rekursion die Berechnung der Quadraturformel über das Lösen eines lineares Eigenwertproblems. Die Stützstellen  $x_0, \dots, x_n$  sind nämlich die  $n + 1$  verschiedenen Eigenwerte der symmetrischen Tridiagonalmatrix

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & & \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \sqrt{\beta_{n-1}} & \alpha_{n-1} & \sqrt{\beta_n} \\ & & & & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Die Gewichte lassen sich aus der Formel  $w_j = v_{j,1} \int_a^b \omega(x) dx$  berechnen, wobei  $v_{j,1}$  die erste Komponente des normalisierten  $j$ -ten Eigenvektors ist. Das vorliegende Eigenwertproblem ist gut konditioniert und lässt sich rückwärtsstabil mit einer Anzahl von arithmetischen Operationen lösen, die von der Größenordnung  $n^2$  ist. Für die Berechnung vieler Stützstellen gibt es sogar Verfahren, die geeignete gewöhnliche Differentialgleichungen lösen und im numerischen Aufwand proportional zu  $n$  sind.

Für  $(2n+2)$ -mal stetig differenzierbare Funktionen  $f$  ist der Integrationsfehler der Gaußschen Quadraturverfahren durch

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx - \sum_{j=0}^n w_j f(x_j) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \pi_{n+1}(x)^2 \omega(x) dx,$$

gegeben, wobei  $\xi \in (a, b)$  ist. Polynome vom Grad  $2n + 1$  werden also exakt integriert, und dieser hohe Grad an Genauigkeit begründet, dass die Gaußsche Quadratur in vielen Situationen das Verfahren der Wahl ist.