10.10 Die Gaußschen Quadraturverfahren

Wir wollen für eine nichtnegative Funktion ω: $(a,b) \to [0,\infty)$ 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 $x_0, \ldots, x_n$ und $n+1$ Gewichten $w_0, \ldots, w_n$ 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

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

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 ω, falls

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

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

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

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 ω gehörigen orthogonalen Polynomsystem. Das j-te orthogonale Polynom π_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.