Projekt 14: klassische Orthogonalpolynome und Bestimmung von Gaußregeln

Ziel dieses Projektes ist, einige Eigenschaften der klassischen Orthogonalpolynome (genauer: der Jacobipolynome) zu erarbeiten und zu sehen, daß die zugehörigen Gaußquadraturformeln mit dem Newtonverfahren ermittelt werden können.

Im folgenden sind stets $\alpha, \beta > -1$; wir definieren die Gewichtsfunktion $w_{\alpha,\beta}$ und das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\alpha,\beta}$ auf $C([-1,1])$ durch

$$w_{\alpha,\beta}(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}, \qquad \langle u, v \rangle_{\alpha,\beta} := \int_{-1}^{1} u(x)v(x)w_{\alpha,\beta}(x)\,dx.$$

Ferner definieren wir für $n \in \mathbb{N}_0$ die *Jacobipolynome*

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) := \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{d^n}{dx^n}(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n} \tag{1}$$

Im Spezialfall $\alpha = \beta = 0$ nennt man die $L_n(x) := P_n^{(0,0)}(x)$ die *Legendrepolynome*.

Im folgenden bezeichnet $\langle \cdot, \rangle$ ein Skalarprodukt auf $C([-1,1])$ von der folgenden Form:

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^{1} u(x)v(x)\omega(x)\,dx,$$

wobei die Funktion $\omega \in C(-1,1)$ positiv auf dem offenen Intervall $(-1,1)$ ist und die Bedingung $\int_{-1}^{1} \omega(x)\,dx < \infty$ erfüllt.

1. **a)** Sei $(P_n)_{n=0}^{\infty}$ eine Folge von Polynomen mit $P_n \in \mathcal{P}_n \setminus \{0\}$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$ und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ein Skalarprodukt auf $C([-1,1])$. Zeigen Sie die Äquivalenz des folgenden beiden Aussagen:

(i) für alle $n \in \mathbb{N}_0$ gilt: $\operatorname{span}\{P_\nu \,|\, \nu = 0, \ldots, n\} = \mathcal{P}_n$, und es gilt $\langle P_n, P_m \rangle = 0$ für $n \neq m$.

(ii) für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt: $\langle P_n, \pi \rangle = 0$ für alle $\pi \in \mathcal{P}_{n-1}$

b) Zeigen Sie: Orthogonalpolynome (bzgl. eines Skalarprodukts) sind bis auf Normierung eindeutig, d.h. für zwei Folgen $(P_n)_{n=0}^{\infty}$ und $(\widetilde{P}_n)_{n=0}^{\infty}$ von Orthogonalpolynomen existiert eine Folge $(\lambda_n)_{n=0}^{\infty} \subset \mathbb{R} \setminus \{0\}$ so daß $P_n = \lambda_n \widetilde{P}_n$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$.

2. (Christoffel-Darboux-Formel) Sei $(P_n)_{n=0}^{\infty}$ eine Folge von Orthogonalpolynomen. Bezeichne $a_{n,n}$ den führenden Koeffizienten von $P_n \in \mathcal{P}_n$ und $\gamma_n := \langle P_n, P_n \rangle$.

a) Habe die von den P_n erfüllte 3-Term-Rekurrenzrelation die Form

$$P_{n+1}(x) = (A_n x + B_n)P_n(x) + C_n P_{n-1}(x).$$

Zeigen Sie:

$$A_n = \frac{a_{n+1,n+1}}{a_{n,n}}, \qquad C_n = -\frac{A_n}{A_{n-1}}\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}$$

b) Sei $\mathcal{K}_n : C([-1,1]) \to \mathcal{P}_n$ die Orthogonalprojektion (bzgl. $\langle \cdot, \cdot \rangle$), d.h. $\mathcal{K}_n u \in \mathcal{P}_n$ ist definiert durch die Bedingung

$$\langle u - \mathcal{K}_n u, v \rangle = 0 \qquad \forall v \in \mathcal{P}_n.$$

Zeigen Sie:

(i) $\mathcal{K}_n$ hat die Form $\mathcal{K}_n u(x) = \langle K_n(x,\cdot), u\rangle$, mit einer “Kernfunktion” K_n

$$K_n(x,y) = \sum_{\nu=0}^{n} \frac{1}{\gamma_\nu} P_\nu(x) P_\nu(y)$$

(ii) K_n läßt sich alternativ darstellen als

$$K_n(x,y) = \sum_{\nu=0}^{n} \frac{1}{\gamma_\nu} P_\nu(x) P_\nu(y) = \frac{a_{n,n}}{\gamma_n a_{n+1,n+1}} \frac{P_{n+1}(x)P_n(y) - P_n(x)P_{n+1}(y)}{x-y}, \qquad x \neq y,$$

Hinweis: verwenden Sie die 3-Term-Rekurrenzrelation für die P_n und Teilaufg. a).

3. Sei $(P_n)_{n=0}^\infty$ eine Folge von Orthogonalpolynomen. Die zugehörige Quadraturformel ist

$$Q_n(f) := \sum_{i=0}^{n} w_i f(\xi_i)$$

wobei die Punkte ξ_i, $i = 0, \ldots, n$ die Nullstellen von P_{n+1} sind. Leiten Sie folgende Formel für die Gewichte w_i her:

$$w_i = \frac{a_{n+1,n+1}}{a_{n,n}} \frac{\gamma_n}{P'_{n+1}(\xi_i) P_n(\xi_i)}, \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Hier sind die $a_{n,n}$ und γ_n wie in Aufg. 2 definiert. *Hinweis:* Wenden Sie die Quadraturformel auf $K_n(\cdot, y)$ für geeignetes y an.

4. **a)** Zeigen Sie, daß $P_n^{(\alpha,\beta)} \in \mathcal{P}_n$ für jedes n. *Hinweis:* Es gilt die verallgemeinerte Leibnizregel $(fg)^{(n)} = \sum_{\nu=0}^{n} \binom{n}{\nu} f^{(\nu)} g^{(n-\nu)}$

b) Zeigen Sie, daß der führende Koeffizient $a_{n,n}$ von $P_n^{(\alpha,\beta)}$ durch die Formel

$$a_{n,n} = 2^{-n} \binom{2n+\alpha+\beta}{n}$$

gegeben ist. Hierzu dürfen Sie die Beziehung

$$\sum_{\nu=0}^{n} \binom{a}{\nu} \binom{b}{n-\nu} = \binom{a+b}{n} \tag{2}$$

verwenden.[1]

c) Zeigen Sie: die Polynome $P_n^{(\alpha,\beta)}$ sind “die” Orthogonalpolynome bzgl. des Skalarproduktes $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\alpha,\beta}$. *Hinweis:* Zeigen Sie Bedingung (ii) aus Aufg. 1

d) Zeigen Sie

$$\gamma_n = \langle P_n^{(\alpha,\beta)}, P_n^{(\alpha,\beta)} \rangle_{\alpha,\beta} = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}. \tag{3}$$

Hinweis: Gehen Sie vor wie in Teilaufg. c). Verwenden Sie die Beziehung

$$\int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\, dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \qquad x, y > 0$$

[2], wobei Γ die Gammafunktion bezeichnet (insb. ist $\Gamma(n+1) = n!$ für $n \in \mathbb{N}_0$).

---

[1] (2) kann man mittels Taylor zeigen: Taylorentwicklung um $x = 0$ liefert $(1+x)^a = \sum_{\nu=0}^\infty \binom{a}{\nu} x^\nu$ für jedes $a \in \mathbb{R}$. Also folgt $\sum_{\nu=0}^\infty \binom{a+b}{\nu} x^\nu = (1+x)^{a+b} = (1+x)^a (1+x)^b = \sum_{\nu=0}^\infty \binom{a}{\nu} x^\nu \sum_{\nu=0}^\infty \binom{b}{\nu} x^\nu = \sum_{\nu=0}^\infty x^\nu \sum_{\mu=0}^{\nu} \binom{a}{\mu}\binom{b}{\nu-\mu}$.

[2] der Beweis findet sich z.B. in `http://en.wikipedia.org/wiki/Beta_function`

e) Die Jacobipolynome erfüllen als Orthogonalpolynome eine Dreitermrekurrenzrelation der Form

$$a_n^1 P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = (a_n^2 + a_n^3 x) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) - a_n^4 P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x). \tag{4}$$

Die Koeffizienten sind explizit bekannt und gegeben durch:

$$\begin{aligned} a_n^1 &= 2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta) \\ a_n^2 &= (2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2) \\ a_n^3 &= (2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta+2) \\ a_n^4 &= 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2). \end{aligned}$$

Zeigen Sie diese 3-Term-Rekurrenzrelation für den Spezialfall $\alpha = \beta = 0$, d.h. zeigen Sie

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1)xL_n(x) - nL_{n-1}(x), \qquad n \geq 1. \tag{5}$$

Hinweis: Geben Sie $a_{n,n}$, $a_{n,n-1}$, $a_{n,n-2}$ in der Entwicklung $L_n(x) = a_{n,n}x^n + a_{n,n-1}x^{n-1} + a_{n,n-2}x^{n-2}\cdots$ an.

f) Zeigen Sie: $\frac{d}{dx}P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = c_{n,\alpha,\beta}P_{n-1}^{(\alpha+1,\beta+1)}(x)$ für geeignete Konstanten $c_{n,\alpha,\beta}$. *Hinweis:* Zeigen Sie Bedingung (ii) aus Aufg. 1

g) Zeigen Sie $c_{n,\alpha,\beta} = \frac{1}{2}(\alpha+\beta+n+1)$ durch Koeffizientenvergleich.

5. (Newtonverfahren mit Deflation) Sei f eine glatte Funktion und x_i, $i = 0, \ldots, s$ paarweise verschiedene bereits bekannte Nullstellen von f. Definieren Sie $q(x) = \prod_{i=0}^{s}(x - x_i)$ und formulieren Sie das Newtonverfahren zur Bestimmung der Nullstellen der Funktion

$$\frac{f(x)}{q(x)}.$$

6. Erstellen Sie ein Matlab-Programm, welches für gegebenes $n \in \mathbb{N}_0$ und α, $\beta > -1$ die Gaußquadraturformel

$$Q_n^{\alpha,\beta}(f) := \sum_{i=0}^{n} w_i f(\xi_i) \approx \int_{-1}^{1} f(x) w_{\alpha,\beta}(x)\, dx$$

bestimmt. Hierzu müssen die Quadraturpunkte ξ_i und die Gewichte w_i berechnet werden.

Gehen Sie wie folgt vor:

1. Berechnen Sie die Punkte ξ_i, $i = 0, \ldots, n$ mittels des Newtonverfahrens als Nullstellen von $P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}$. Bestimmen Sie die Nullstellen sukzessive. Verwenden Sie das Newtonverfahren mit Deflation, wobei Sie die bereits bekannten Nullstellen wie in Aufg. 5 beschrieben "abspalten". Die Auswertung von $P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}$ und seiner Ableitung realisieren Sie über die obigen 3-Term-Rekurrenzen (vgl. (4)). Als Startwerte $\xi_i^{(0)}$, $i = 0, \ldots, n$, für das Newtonverfahren wählen Sie die Tschebyscheffpunkte

$$\xi_i^{(0)} := \xi_i^{Tsch} = \cos(\frac{2i+1}{2n+2}\pi), \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Als Abbruchkriterium für das Newtonverfahren wählen Sie

$$|\xi_i^{(k+1)} - \xi_i^{(k)}| \leq \texttt{tol}$$

mit $\texttt{tol} = 10^{-13}$.

2. Berechnen Sie die Gewichte w_i. *Hinweis:* Weil die Werte im Nenner und Zähler von (3) bereits für moderate Werte von n groß sein können, ist es geschickter, die MATLAB-Funktion `gammaln` zu verwenden; es gilt: `gammaln`$(x) = \ln \Gamma(x)$.

   Zum Testen können Sie die Routine $[x, w] =$ `gaujac`(n) verwenden[3], welche die gewünschte Regel mit n (sic!) Punkten und Gewichten erzeugt.

7. Es soll das Integral

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx 1.59698130813572675 89, \qquad f(x) = x^b e^x, \qquad b = 0.1$$

numerisch mit 3 verschiedenen gewichteten Gaußquadraturen ausgewertet werden:

1. der gewichteten Gaußregel für das Skalarprodukt $\langle u, v\rangle = \int_0^1 x^{0.1} u(x)v(x)\,dx$
2. der ungewichteten Gaußregel für das Skalarprodukt $\langle u, v\rangle = \int_0^1 u(x)v(x)\,dx$
3. der gewichteten Gaußregel für das "fast richtige" Skalarprodukt $\langle u, v\rangle = \int_0^1 x^{0.1-\delta} u(x)v(x)\,dx$ mit $\delta = 0.001$.

Überlegen Sie sich, wie sie für die 3 Fälle die zugehörigen Punkte und Gewichte mit Ihrer Routine aus Aufg. 6 erhalten. Plotten Sie den Quadraturfehler für alle 3 Fälle semilogarithmisch über n für $n = 1, \ldots, 50$. Was beobachten Sie? Begründen Sie.

[3]siehe `http://www.math.tuwien.ac.at/~melenk/teach/numerik_WS0708/projekte`