Projekt 8: Gaußquadratur und summierte Gaußquadratur für Funktionen mit Singularitäten

Ziel: verstehen, wie die klassischen Gaußregeln erzeugt werden und Analyse eines Verfahrens zur Quadratur von nicht glatten Funktionen mittels geeigneten summierten Gaußregeln.
Die *Legendrepolynome* sind "die" Orthogonalpolynome für das Skalarprodukt $\langle u, v\rangle_{L^2} := \int_{-1}^{1} u(x)v(x)\,dx$.
Sie sind explizit bekannt:

$$L_n(x) := \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(1-x^2)^n \tag{1}$$

1. **a)** Man sieht leicht, daß die durch (1) definierten Funktionen $L_n \in \mathcal{P}_n$ erfüllen. Zeigen Sie: $\langle L_n, L_m\rangle_{L^2} = 0$ für $n \neq m$. Damit ist bestätigt, daß die L_n tatsächlich "die" Orthogonalpolynome bzgl. $\langle\cdot,\cdot\rangle_{L^2}$ sind.

b) Sei L_n geschrieben als $L_n(x) = a_{n,n}x^n + a_{n,n-1}x^{n-1} + a_{n,n-2}x^{n-2} + \cdots$. Zeigen Sie:

$$a_{n,n} = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}, \qquad a_{n,n-1} = 0, \qquad a_{n,n-2} = -\frac{(2n-2)!}{2^n(n-2)!(n-1)!}$$

c) Die L_n erfüllen als Orthogonalpolynome eine 3-Term-Rekurrenzrelation der allg. Form

$$L_{n+1}(x) = (A_n x + B_n)L_n(x) + C_n L_{n-1}(x), \qquad n \geq 1.$$

Zeigen Sie mithilfe von Teilaufg. b), daß gilt:

$$(n+1)L_{n+1}(x) - (2n+1)xL_n(x) + nL_{n-1}(x) = 0, \qquad n \geq 1. \tag{2}$$

Durch direktes Nachrechnen ergibt sich außerdem $L_0(x) = 1$, $L_1(x) = x$.

2. Sei $\langle v, v\rangle = \int_{-1}^{1} u(x)v(x)\omega(x)\,dx$ ein Skalarprodukt auf $C([-1,1])$ und $(P_n)_{n=0}^{\infty}$ die zugehörigen Orthogonalpolynome. Die zugehörige Gaußquadraturformel ist $Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(\xi_i) \approx \int_{-1}^{1} f(x)\omega(x)\,dx$. Die Knoten ξ_i, $i = 0,\ldots,n$ sind die Nullstellen von P_{n+1}. Es sollen nun die Gewichte w_i bestimmt werden.

a) Zeigen Sie, daß die w_i sich als Lösung des folgenden Gleichungssystems bestimmen lassen:

$$\begin{pmatrix} P_0(\xi_0) & P_0(\xi_1) & \cdots & P_0(\xi_n) \\ P_1(\xi_0) & P_1(\xi_1) & \cdots & P_1(\xi_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ P_n(\xi_0) & P_n(\xi_1) & \cdots & P_n(\xi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{-1}^{1} \omega P_0\,dx \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

b) Das Lösen eines linearen Gleichungssystems ist mühsam. Leiten Sie folgende Formel her:

$$w_i = \frac{a_{n+1,n+1}}{a_{n,n}} \frac{\langle P_n, P_n\rangle}{P_n(\xi_i)P'_{n+1}(\xi_i)}, \qquad i = 0,\ldots,n, \tag{3}$$

wobei $a_{n,n}$ der führende Koeffizient von P_n ist.
Hinweis: Zeigen Sie $P'_{n+1}(\xi_i) = a_{n+1,n+1}\prod_{j\neq i}(\xi_i - \xi_j)$; bestimmen Sie den Koeffizienten c_i in der Darstellung $l_i(x) = c_i P_n(x) + \pi_{n-1}$ ($\pi_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$), wobei l_i das Lagrangeinterpolationspolynom für den Knoten ξ_i ist.

3. Schreiben Sie ein Programm $[x, w] = \texttt{gauss}(n)$, welches die Gaußpunkte und die Gaußgewichte für gegebenes $n \in \mathbb{N}$ bestimmt. Gehen Sie wie folgt vor:

1. Bestimmen Sie die Nullstellen von L_{n+1} mit dem Newtonverfahren. Hierzu müssen Sie L_{n+1} und L'_{n+1} bestimmen können. Die Legendrepolynome werden am besten mit der 3-Term-Rekurrenzrelation ausgewertet. Überlegen Sie sich, wie die 3-Term-Rekurrenzrelation es Ihnen auch ermöglicht, effizient L'_{n+1} auszuwerten. Als Startwerte für das Newtonverfahren verwenden Sie die Tschebyscheffpunkte

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

Verwenden Sie als Abbruchkriterium für das Newtonverfahren die Bedingung $|\xi_i^{(k+1)} - \xi_i^{(k)}| \leq \texttt{tol}$ mit $\texttt{tol} = 10^{-13}$.

2. Bestimmen Sie die Gewichte w_i mit der Formel (3). Hierzu können Sie verwenden, daß

$$\int_{-1}^{1} L_n(x)^2 \, dx = \frac{2}{2n+1}.$$

Hinweis: Zum Testen können Sie die Routine $[x, w] = \texttt{gauleg}(n)$ verwenden[1] verwenden, welche eine Gaußregel mit n (sic!) Punkten und Gewichten erzeugt.

4. Es werden summierte Gaußregeln für die Auswertung von $\int_0^1 f(x)\,dx$ betrachtet. Hierbei sei das Intervall $[0, 1]$ in N Teilintervalle $[a_i, a_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, N-1$, zerlegt und auf jedem Intervall werde eine Gaußformel mit n Punkten verwendet. Die summierte Gaußregel möge mit $S_{N,n}$ bezeichnet werden.

a) Zeigen Sie:

$$\left| \int_0^1 f(x)\,dx - S_{N,n}(f) \right| \leq \sum_{i=0}^{N-1} 2h_i \inf_{v \in \mathcal{P}_{2n-1}} \|f - v\|_{C([a_i, a_{i+1}])}, \qquad h_i = a_{i+1} - a_i.$$

b) Sei $f_\alpha(x) = x^\alpha$ mit $\alpha \in (0, 1)$ und sei für $q \in (0, 1)$ die Punkte a_i gegeben durch

$$a_0 = 0, \qquad a_i = q^{N-i}, \quad i = 1, \ldots, N.$$

Zeigen Sie:

$$\left| \int_0^1 f_\alpha(x)\,dx - S_{N,n}(f_\alpha) \right| \leq 2q^{(N-1)(\alpha+1)} + \frac{2}{1-\overline{q}}\overline{q}^{2n}, \qquad \overline{q} := \frac{1-q}{1+q}.$$

Hinweis: Zeigen Sie, daß $|f_\alpha^{(n)}(x)| \leq n! x^{\alpha-n}$. Wählen Sie für $i = 1, \ldots, N-1$, im Infimum aus a) das Taylorpolynom in der Intervallmitte. Da die Taylorreihe um den Intervallmittelpunkt auf den Intervall konvergiert, können Sie den Fehler einfach durch den "Schwanz" der Taylorreihe abschätzen.
Wählen Sie weiters ein geeignetes Polynom im Intervall $[a_0, a_1]$.

c) Betrachten Sie die summierte Quadraturformel für Funktionen f von der Bauart $f(x) = x^\alpha g(x)$ mit einer Funktion g, deren Taylorreihe (bei Entwicklung um $x_0 = 1/2$) gegen g konvergiert und deren Konvergenzradius $r > 1/2$ ist. Zeigen Sie: Es gibt Konstanten $C > 0$, $\tilde{q} \in (0, 1)$ unabhängig von n, N, so daß

$$\left| \int_0^1 f(x)\,dx - S_{N,n}(f) \right| \leq C \left[q^{(N-1)(\alpha+1)} + \tilde{q}^n \right]. \tag{4}$$

[1] siehe `http://www.math.tuwien.ac.at/~melenk/teach/numerik_WS0809/projekte`

d) Betrachten Sie den Fall $n = N$ und geben Sie die Anzahl Funktionauswertungen F in der summierten Quadraturformel $S_{N,n}$ an. Geben Sie für die Wahl $n = N$ an, wie schnell der Fehler in Abhängigkeit von der Anzahl Funktionsauswertungen F gegen Null strebt.

e) Programmieren Sie die obige summierte Gaußquadratur mit $q = 0.15$ und $n = N = 1, \ldots, 15$. Erzeugen Sie 2 Plots, indem Sie den Fehler semilogarithmisch einmal gegen n und einmal gegen die Anzahl der Funktionsauswertungen plotten. Betrachten Sie die beiden Integranden

$$f_1(x) = x^{0.1} e^x \quad \text{und} \quad f_2(x) = x^{0.1\cos x} \frac{1}{1+x^2}$$

mit $\int_0^1 f_1(x)\,dx \approx 1.59698130813572675 89$ und $\int_0^1 f_2(x)\,dx \approx 0.70640670530836028833$ Vergleichen Sie Ihre summierte Gaußregel mit der reinen Gaußregel.

5. Oben haben Sie das Newtonverfahren zur Bestimmung der Nullstellen einer Funktion F verwendet. Das Newtonverfahren konvergiert quadratisch. Zeigen Sie, daß die Iteration

$$\xi^{(k+1)} := \xi^{(k)} - \frac{F(\xi^{(k)})}{F'(\xi^{(k)})} \left(1 + \frac{F(\xi^{(k)})}{F'(\xi^{(k)})} \frac{F''(\xi^{(k)})}{2F'(\xi^{(k)})}\right)$$

lokal sogar kubisch gegen eine Nullstelle von F konvergiert. *Bemerkung:* Dies ist im Kontext der Nullstellenbestimmung von Legendrepolynomen von Interesse, da $L_n''(x)$ sich aus $L_n(x)$ und $L_n'(x)$ via $(1-x^2)L_n''(x) - 2xL_n'(x) + n(n+1)L_n(x) = 0$ bestimmen läßt.