

Numerik Projekt 1 – Aufgabe 1

Lukas Moser & Bernhard Kepka

1. GAUSS-QUADRATUR AUF $[-1, 1]$

Die zur Gauß-Quadratur auf dem Intervall $[-1, 1]$ mit der Gewichtsfunktion $w \equiv 1$ gehörenden (normierten) Orthogonalpolynome sind durch die Legendre-Polynome L_j gegeben. Letztere erfüllen die Rekursion

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x, \quad L_{n+1}(x) = xL_n(x) - \frac{n^2}{4n^2 - 1}L_{n-1}(x), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (1)$$

Da das gegebene Intervall und die Gewichtsfunktion symmetrisch sind, folgt für die $n+1$ Knoten (x_j) und Gewichte (α_j) (nach einem Übungsbeispiel) $x_j = -x_{n-j}$ beziehungsweise $\alpha_j = \alpha_{n-j}$ für $j = 0, \dots, n$.

Zur konkreten Implementierung wurden zwei Wege verfolgt:

- (i) Die Quadraturknoten wurden gemäß Satz 4.23 des Numerik-Skriptums über eine Eigenwertaufgabe und die Quadraturgewichte über entsprechende Eigenvektoren berechnet.
- (ii) Über die rekursive Darstellung der Legendre-Polynome lassen sich örtliche Beziehungen zwischen Nullstellen zweier Polynome L_n und L_{n+1} extrahieren. Mittels bekannter Nullstellen des n -ten Polynomes und eines Sekanten-Verfahrens wurden in Folge die Nullstellen von L_{n+1} ermittelt.

In beiden Fällen können die Gewichte mit Hilfe der Nullstellen von L_{n+1} und der Legendre-Polynome L_0, \dots, L_n explizit angegeben werden.

1. Via Eigenwertaufgabe. Mit Satz 4.23 und obiger 3-Term-Rekursion folgt (Bezeichnungen wie im Satz) $\gamma_n^2 = \frac{n^2}{4n^2 - 1}$ und $\beta_n = 0$, denn $L_{n+1}(X) = \det(IX - T)$. Damit hat die entsprechende Matrix T die Form

$$T = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1 & & & \\ \gamma_1 & 0 & \gamma_2 & & \\ & \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ & & & \gamma_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}.$$

Die Nullstellen von L_{n+1} sind entsprechend die Eigenwerte von T . Für die Gewichte gilt die Beziehung

$$\alpha_j = \left(\frac{(v_j)_1}{\|v_j\|_2} \right)^2 \int_{-1}^1 w(x) dx = 2 \left(\frac{(v_j)_1}{\|v_j\|_2} \right)^2, \quad (2)$$

wobei $(v_j)_1$ die 1. Komponente eines Eigenvektors v_j von T ist.

Mit den internen Funktionen von Matlab wurden nun die Eigenwerte bzw. Eigenvektoren berechnet.

2. Rekursive Knotenberechnung. Wegen der Symmetrie um den Ursprung genügt es die positiven Nullstellen zu betrachten. Für ungerades n ist 0 stets ein Quadraturknoten. Wir nutzen nun folgende Eigenschaften zur besseren Bestimmung der Nullstellen.

- Für die Nullstellen der Legendre-Polynome L_1, \dots, L_n gilt: Zwischen je zwei positiven Nullstellen von L_{n-1} befindet sich genau eine von L_n .
Dies sieht man induktiv ein: für $n = 1, 2, 3$ gilt die Aussage durch die entsprechenden Nullstellen. Seien nun $x^{(n)}, y^{(n)}$ zwei Nullstellen von L_n . Nach Induktionsannahme befindet sich eine Nullstelle $z^{(n-1)}$ von L_{n-1} in $(x^{(n)}, y^{(n)})$. Da $z^{(n-1)}$ einfach ist, hat L_{n-1} einen Vorzeichenwechsel in diesem Intervall. $xL_n(x)$ hat konstantes Vorzeichen. Wegen (1) folgt also, dass das Vorzeichen von L_{n+1} in den Randpunkten (beziehungsweise in einer Umgebung von diesen) alleine von L_{n-1} bestimmt wird. Aus dem Zwischenwertsatz folgt, dass sich eine Nullstelle in $(x^{(n)}, y^{(n)})$ befindet. Da L_{n-1} genau einmal sein Signum wechselt, kann es nur genau eine sein.
- Nun folgt: es gibt eine Nullstelle von L_n , die größer ist als alle von L_{n-1} .
Für $n = 1, 2, 3, 4, 5$ gilt dies.
Seien $x_1^{(n-1)}, \dots, x_k^{(n-1)}$ die positiven Nullstellen von L_{n-1} mit $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. In den Intervallen $(x_1^{(n-1)}, x_2^{(n-1)}), \dots, (x_{k-1}^{(n-1)}, x_k^{(n-1)})$ befinden sich genau eine Nullstelle von L_n , also $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1$. Ist n ungerade, so ist 0 eine weitere und wir haben $n - 2$ Nullstellen in $(-1, 1)$ gefunden. Die letzten zwei müssen sich ebenfalls in diesem Intervall befinden. Da sie nicht mit $\pm x_k^{(n-1)}$ übereinstimmen, befinden sie sich in den Intervallen $(-1, -x_k^{(n-1)})$ und $(x_k^{(n-1)}, 1)$. Wegen der Symmetrie folgt die Behauptung.

Darauf aufbauend führt man bei bekannten (positiven) Nullstellen von L_n ein Sekantenverfahren zwischen aufeinanderfolgende durch. Zusätzlich macht man selbiges mit dem Intervall $(x_k^{(n)}, 1)$, wobei $x_k^{(n)}$ die größte Nullstelle von L_n sei. Je nachdem, ob n gerade oder ungerade ist, muss man noch ein Sekantenverfahren zwischen Null und der kleinsten Nullstelle durchführen oder Null selbst als Knoten wählen.

3. Explizite Darstellung der Gewichte. Ein Eigenvektor v_k zum Eigenwert x_k von $T \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ hat die Form $(c_0 L_0(x_k), \dots, c_n L_n(x_k))^T$, wobei c_j noch zu spezifizierende Konstanten sind. Letztere ergeben sich aus $Tv_k \stackrel{!}{=} x_k v_k$ durch komponentenweisen Vergleich. Für die erste Zeile gilt

$$\gamma_1 c_1 L_1(x_k) = \gamma_1 c_1 x_k \stackrel{!}{=} x_k c_0 L_0(x_k) = x_k c_0,$$

also $c_1 = c_0 / \gamma_1$. Wir setzen $c_0 := 1$, damit dann $(v_k)_1 = 1$ erfüllt ist. In der i -te Zeile ist mit der Rekursion (1)

$$\begin{aligned} & \gamma_{i-1} c_{i-2} L_{i-2}(x_k) + \gamma_i c_i L_i(x_k) \stackrel{!}{=} x_k c_{i-1} L_{i-1}(x_k) \\ \iff & \gamma_{i-1} c_{i-2} L_{i-2}(x_k) + \gamma_i c_i (x_k L_{i-1}(x_k) - \gamma_{i-1}^2 L_{i-2}(x_k)) = \\ & (\gamma_{i-1} c_{i-2} - \gamma_i c_i \gamma_{i-1}^2) L_{i-2}(x_k) + \gamma_i c_i x_k L_{i-1}(x_k) \stackrel{!}{=} x_k c_{i-1} L_{i-1}(x_k). \end{aligned}$$

Wir haben folglich die Forderungen

$$\begin{aligned}\gamma_{i-1}c_{i-2} - \gamma_i c_i \gamma_{i-1}^2 &= 0 \\ \gamma_i c_i &= c_{i-1}.\end{aligned}$$

Wenn wir letztere als rekursive Definition von c_j nutzen, $c_i := c_{i-1}/\gamma_i$, gilt auch die erstere

$$\gamma_i \gamma_{i-1}^2 c_i = \gamma_{i-1}^2 c_{i-1} = \gamma_{i-1} c_{i-2}.$$

Da T symmetrisch ist und nur einfache Eigenwerte besitzt, sind (v_k) zueinander orthogonal. Aus der Definition der Quadratur-Formel folgt dann

$$Q^{(n)}(c_k L_k) = \sum_{i=0}^n \alpha_i c_k L_k(x_i) = (c_0 L_0, c_k L_k)_w = 2\delta_{k0}$$

und damit unter Berücksichtigung von $(v_k)_1 = 1$

$$\begin{aligned}2 &= v_k^T 2e_1 = v_k \left(\sum_{j=0}^n \alpha_j c_0 L_0(x_j), \dots, \sum_{j=0}^n \alpha_j c_n L_n(x_j) \right)^T = \\ &= v_k^T \sum_{j=0}^n \alpha_j v_j = \alpha_k v_k^T v_k = \alpha_k \sum_{j=0}^n c_j^2 L_j(x_k)^2\end{aligned}$$

Für die Gewichte (α_j) gilt in Folge

$$\alpha_j = \frac{2}{\sum_{j=0}^n c_j^2 L_j(x_k)^2} \quad j = 0, \dots, n. \quad (3)$$

2. QUADRATUR AUF $[a, b]$ UND $[a, b] \times [c, d]$

Mit Hilfe der Transformation

$$\psi : [-1, 1] \rightarrow [a, b] : \xi \mapsto a + \frac{b-a}{2} + \xi \frac{b-a}{2} = \frac{b+a}{2} + \xi \frac{b-a}{2}$$

wird die Quadratur-Formel aus dem ersten Teil auf $[a, b]$ übertragen:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f(\psi(\xi)) \left(\frac{b-a}{2} \right) d\xi \approx \sum_j \left(\frac{b-a}{2} \right) \alpha_j f(\psi(x_j)).$$

Die Quadratur-Knoten (\tilde{x}_j) beziehungsweise Gewichte $(\tilde{\alpha}_j)$ sind also gegeben durch

$$\tilde{x}_j = \psi(x_j) = \frac{b+a}{2} + x_j \frac{b-a}{2} \quad \tilde{\alpha}_j = \left(\frac{b-a}{2} \right) \alpha_j. \quad (4)$$

Seien nun zwei Quadraturen $Q^{(x)}$, $Q^{(y)}$ auf $[a, b]$ respektive auf $[c, d]$ mit Knoten (x_i) , (y_j) und Gewichten (α_i) , (β_j) gegeben. Auf $R := [a, b] \times [c, d]$ folgt mit Fubini

$$\int_c^d \int_a^b f(x, y) dx dy \approx \int_c^d \sum_{i=1}^{N_x} \alpha_i f(x_i, y) dy = \sum_{i=1}^{N_x} \alpha_i \int_c^d f(x_i, y) dy \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \alpha_i \beta_j f(x_i, y_j).$$

Jede einzelne Quadratur-Formel ist für Polynome vom Grad $2N_x + 1$ bzw. $2N_y + 1$ exakt. Für den Funktionenraum $\Pi_{2N_y+1}^{2N_x+1} := \{p_x(x)p_y(y) \mid p_x \in \Pi_{2N_x+1}, p_y \in \Pi_{2N_y+1}\}$ ist die Quadratur auf R es ebenso:

$$\int_a^b \int_c^d p_x(x)p_y(y)dydx = \int_a^b p_x(x)Q^{(y)}(p_y)dx = Q^{(x)}(p_x)Q^{(y)}(p_y).$$

4. Testen der Implementierung. Beispiele, a priori Fehlerschätzer (Satz 4.18), Konvergenz (Satz 4.20).

$$Q(f) - Q_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b w(x) \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx$$

$$|Q(f) - Q_n(f)| \leq \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty}{(2n+2)!} (b-a)^{2n+3} \quad (5)$$

Für symmetrische Intervalle $[-c, c]$ erhält man wegen der Symmetrie der Knoten mit

$$(x - x_j)^2 (x - x_{n-j})^2 = (x^2 - x_j^2)^2 \leq c^4 \quad \text{also}$$

$$|Q(f) - Q_n(f)| \leq 2 \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty}{(2n+2)!} c^{2n+3}.$$

Genauso kann man aber das Integral folgendermaßen abschätzen:

$$\int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \leq (b-a)^2 \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n (x - x_j)^2 dx = (b-a)^2 \alpha_k \prod_{j=0, j \neq k}^n (x_k - x_j)^2, \quad (6)$$

denn es liegt ein Polynom vom Grad $2n$ vor. Man wähle k natürlich so, dass die Differenzen möglichst klein sind. Im Falle symmetrischer Intervalle erhält man

$$\int_{-c}^c \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \leq 4c^2 \alpha_k \prod_{j=0, j \neq k}^n x_j^2,$$

wenn man schätzungsweise $x_k = 0$ setzt.

3. QUADRATUR AUF \hat{T}

Sei das zweidimensionale Dreieck $\hat{T} = \text{conv}\{e_0, e_1, e_2\}$ mit $e_0 = (0, 0)^T$, $e_1 = (1, 0)^T$, $e_2 = (0, 1)^T$ gegeben. Die Kantenmittelpunkte seien $k_1 = (1/2, 0)^T$, $k_2 = (0, 1/2)^T$, $k_3 = (1/2, 1/2)^T$ und

$$P_n := \left\{ \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^{n-j} a_{jk} x^j y^k \mid a_{jk} \in \mathbb{R} \right\}$$

der Funktionenraum der Polynome in x, y mit maximalem Grad n .

Um Quadraturen $Q^{(1)}$, $Q^{(2)}$ auf \hat{T} zu definieren betrachten wir die Interpolationsaufgaben:

(a) Gesucht $p_1 \in P_1$ mit $p_1(e_j) = f(e_j)$ für $j = 0, 1, 2$ bzw.

(b) gesucht $p_2 \in P_2$ mit $p_2(e_j) = f(e_j)$ für $j = 0, 1, 2$ und $p_2(k_j) = f(k_j)$ für $j = 1, 2, 3$.

Beide Probleme lassen sich stets und eindeutig durch Basispolynome lösen.

Ad(a): Man wähle

$$E_0(x, y) := 1 - x - y, \quad E_1(x, y) := x, \quad E_2(x, y) := y.$$

Für diese Polynome gilt $E_j(e_k) = \delta_{jk}$. Die Lösung der Interpolation ist gegeben durch $p_1(x, y) = \sum_{j=0}^2 E_j(x, y) f(e_j)$ und die Gewichte (α_j) der Quadratur-Formel $Q^{(1)}$

$$\alpha_j = \int_{\hat{T}} E_j(x, y) d(x, y) \quad \text{also} \quad \alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{6}.$$

Ad(b) Im selben Sinne ist mit

$$E_0(x, y) := 2x^2 + 2y^2 + 4xy - 3x - 3y + 1, \quad E_1(x, y) := 2x^2 - x, \quad E_2(x, y) := 2y^2 - y, \\ K_1(x, y) := -4x^2 - 4xy + 4x, \quad K_2(x, y) := -4y^2 - 4xy + 4y, \quad K_3(x, y) := 4xy$$

stets $E_j(e_k) = \delta_{jk}$ und $K_j(k_i) = \delta_{ji}$ erfüllt und damit das Interpolationsproblem stets unzweideutig lösbar. Die Gewichte (α_j) sind gegeben durch $\alpha_j = \int_{\hat{T}} E_j(x, y) d(x, y)$ für $j = 0, 1, 2$ und $\alpha_j = \int_{\hat{T}} K_j(x, y) d(x, y)$ für $j = 3, 4, 5$. Es folgt $\alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2 = 0$ und $\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = \frac{1}{6}$.

Die Quadratur-Formeln sind also

$$Q^{(1)}(f) = \frac{1}{6} (f(0, 0) + f(1, 0) + f(0, 1)) \quad (7)$$

$$Q^{(2)}(f) = \frac{1}{6} (f(1/2, 0) + f(0, 1/2) + f(1/2, 1/2)). \quad (8)$$

Mit der Duffy-Transformation

$$\Psi : [0, 1]^2 \rightarrow \hat{T} : (\xi, \eta) \mapsto (\xi, (1 - \xi)\eta)$$

lässt sich eine Quadratur auf dem Einheitsquadrat auf dem Dreieck definieren. (Diese Transformation lässt die erste Koordinate invariant und die zweite wird entsprechend der Höhe des Dreiecks \hat{T} gestaucht.) Mit der Transformationsformel folgt

$$\int_{\hat{T}=\Psi([0,1]^2)} f(x, y) d(x, y) = \int_{[0,1]^2} f(\xi, (1 - \xi)\eta) (1 - \xi) d(\xi, \eta) \quad \text{mit } |\det D\Psi| = (1 - \xi).$$

Also folgt mit zwei Quadraturen auf $[0, 1]$

$$\int_{\hat{T}} f(x, y) d(x, y) \approx \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{k=0}^{N_y} \alpha_i \beta_k f(x_i, (1 - x_i)y_k) (1 - x_i).$$

Um die Ordnung der Quadratur auf \hat{T} zu untersuchen, sei $p \in P_n$, also

$$p(\Psi(x, y))(1 - x) = \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^{n-k} a_{jk} x^k (1 - x)^{j+1} y^j.$$

In x hat p folglich den Grad $k + j + 1 = n + 1$ und in y also n . Damit p exakt integriert wird, muss $n + 1 = 2N_x + 1$ oder $N_x > \lfloor n/2 \rfloor$ und $N_y \geq \lfloor n/2 \rfloor$ erfüllt sein.

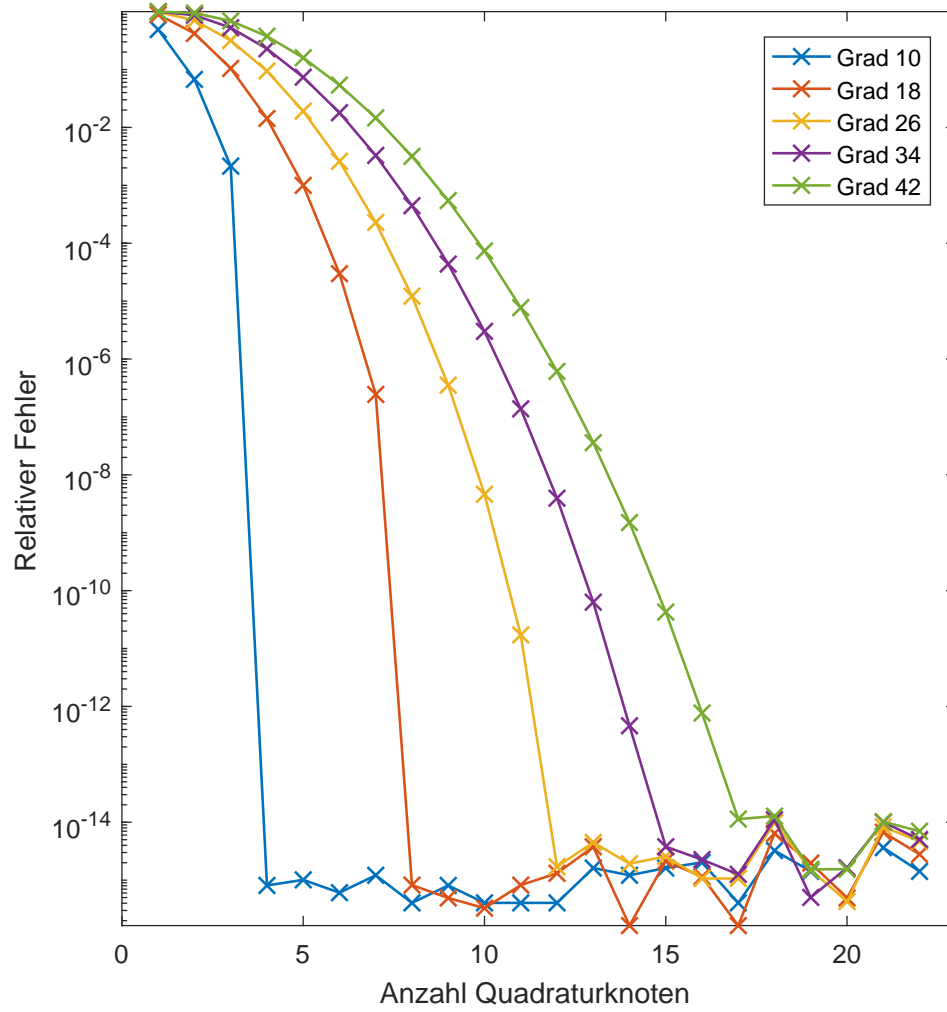


Figure 1: Vergleich relativer Fehler der Quadratur von Polynomen verschiedenen Grades über verschiedene Anzahl von Quadraturknoten.

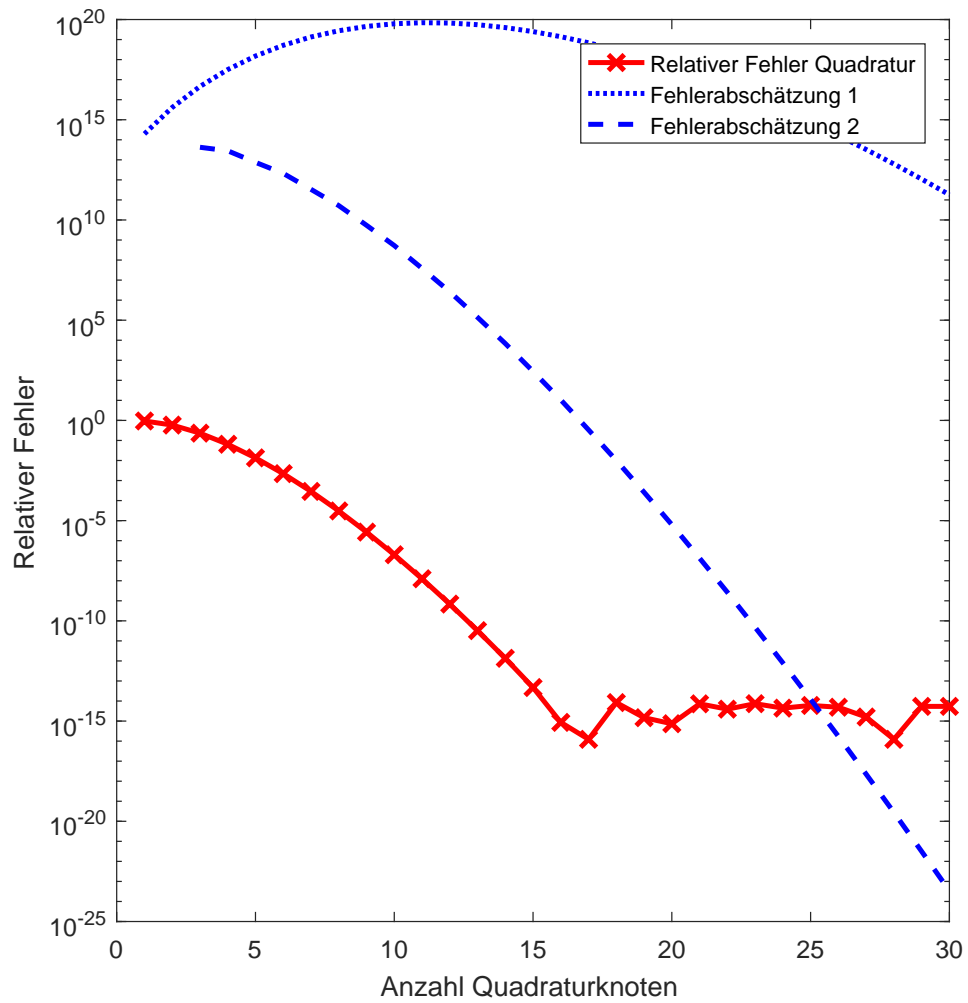


Figure 2: Relativer Fehler der Quadratur e^x verschiedene Anzahl von Quadraturknoten. Die Fehlerabschätzungen wurden durch (5) bzw (6) berechnet.

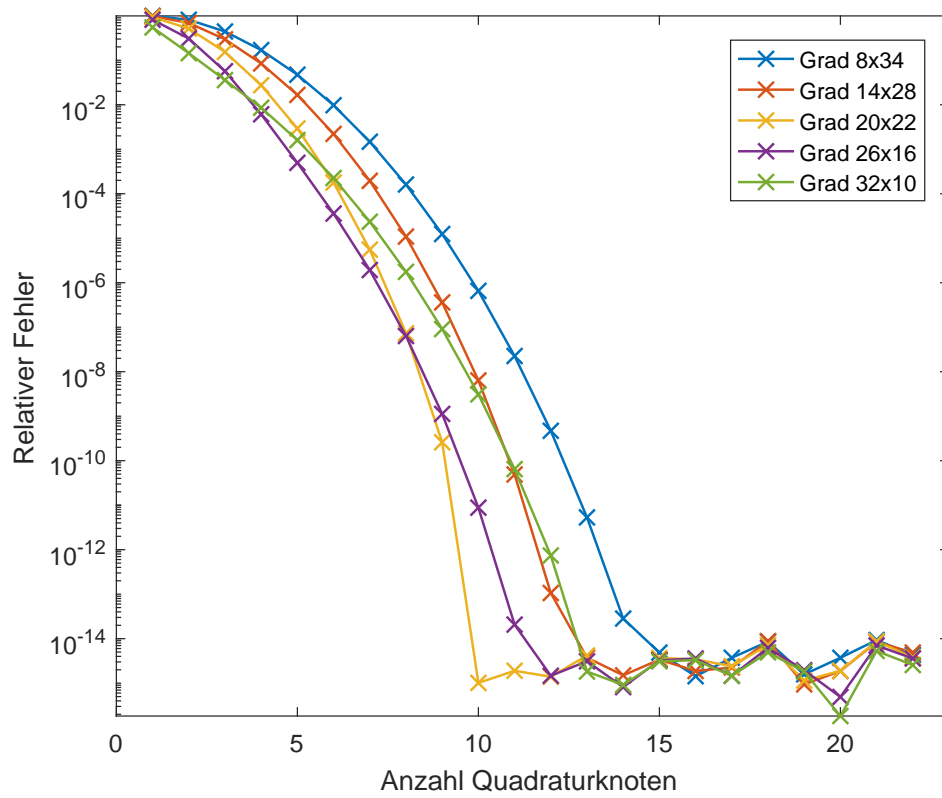


Figure 3: Vergleich von relativen Fehler der Quadratur von Polynomen mit 2 Unbestimmten konstanten Grades auf $[0,1]^2$ über verschiedene Anzahl von Quadraturknoten.

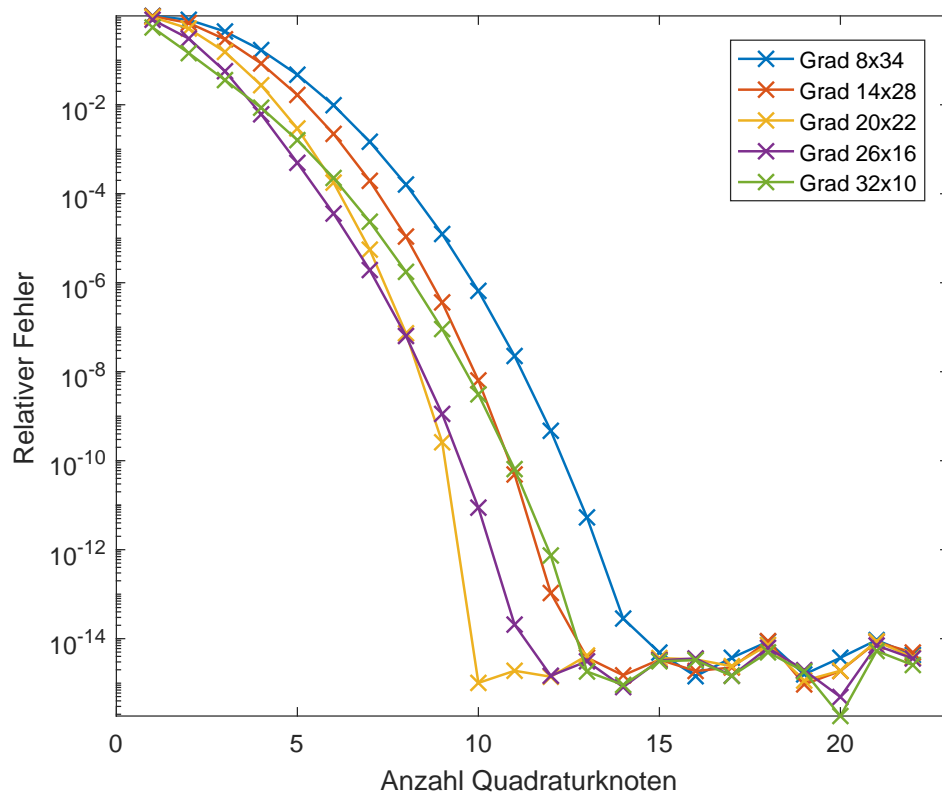
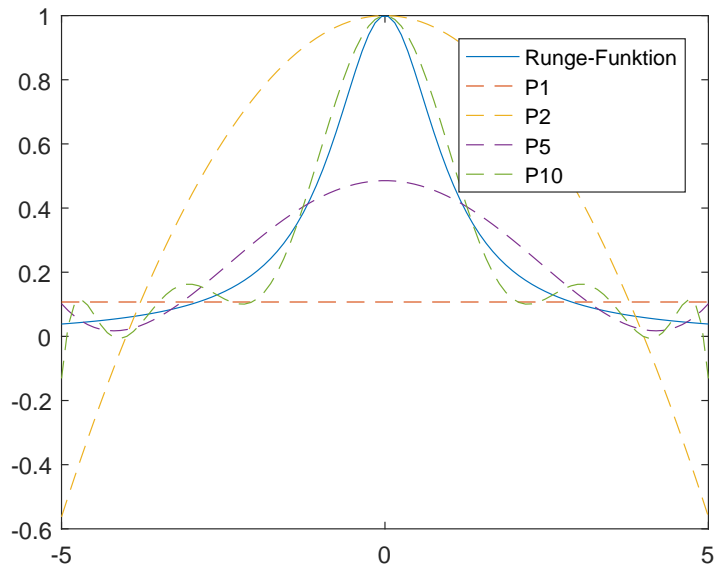
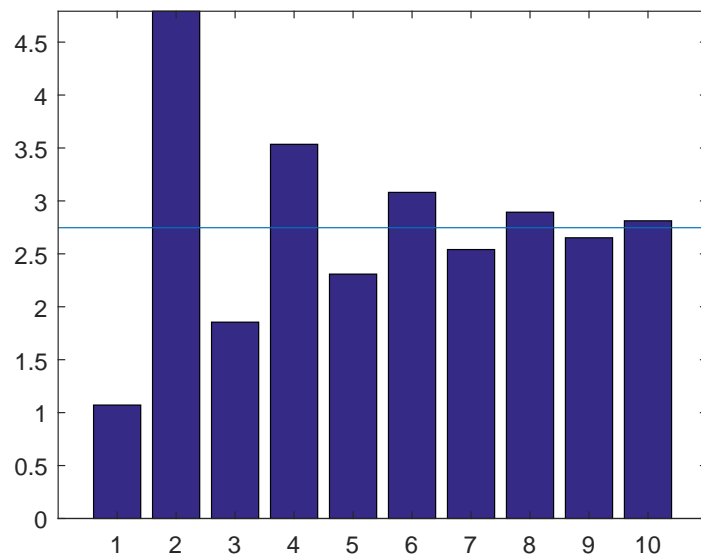


Figure 4: Vergleich von relativen Fehler der Quadratur von Polynomen mit 2 Unbestimmten verschiedenen Grades auf \hat{T} über verschiedene Anzahl von Quadraturknoten.



(a) Vergleich von Runge-Funktion und den Polynomen, die die implizit in der Gauß-Quadratur genutzt werden.



(b) Vergleich der Werte der Quadratur Runge-Funktion, entsprechend der Anzahl der Quadraturknoten.

Figure 5: Runge-Funktion und Interpolation