

Kapitel 2

Numerische Integration

Für eine im Intervall $[a, b]$ gegebene Funktion $f(x)$ ist das bestimmte Integral

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (2.1)$$

durch eine geeignete Näherungsformel

$$I_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k \quad (2.2)$$

mit paarweise verschiedenen Stützstellen x_k und Integrationsgewichten ω_k zu berechnen. Ein numerisches Integrationsverfahren (2.2) heißt von der Ordnung p , falls p die größte ganze Zahl ist, für die das Verfahren alle Polynome kleineren Grades als p exakt integriert,

$$\int_a^b q_m(x) dx = \sum_{k=0}^n q_m(x_k) \omega_k \quad \text{für alle } q_m(x) = \sum_{j=0}^m a_j x^j, \quad m < p.$$

Eine erste Idee für die Herleitung numerischer Integrationsformeln besteht im Ersetzen der Funktion $f(x)$ durch das Interpolationspolynom $f_n \in \Pi_n$ mit

$$f_n(x_i) = f(x_i) \quad \text{für } i = 0, \dots, n.$$

Bei Verwendung von Lagrange-Polynomen (1.11) lautet das Interpolationspolynom

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_k^n(x), \quad L_k^n(x) = \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j},$$

und für die Integrationsformel (2.2) ergibt sich

$$I_n = \int_a^b f_n(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b L_k^n(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k \quad (2.3)$$

mit den Integrationsgewichten

$$\omega_k = \int_a^b L_k^n(x) dx = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx \quad \text{für } k = 0, \dots, n. \quad (2.4)$$

Aus der Darstellung (1.14) des Interpolationsfehlers

$$f(x) - f_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

mit einer geeigneten Zwischenwertstelle $\xi(x) \in (a, b)$ folgt für den Fehler der numerischen Integrationsformel (2.3)

$$I - I_n = \int_a^b [f(x) - f_n(x)] dx = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx. \quad (2.5)$$

Die Integrationsformel (2.3) ist von der Ordnung $n+1$, d.h. Polynome $f(x) = f_m(x)$ mit dem Polynomgrad $m \leq n$ werden exakt integriert. Ist die Integrationsformel insbesondere exakt für konstante Funktionen, dann folgt für $f(x) = 1$

$$I = \int_a^b dx = b - a = I_n = \sum_{k=0}^n \omega_k$$

und somit

$$\frac{1}{b-a} \sum_{k=0}^n \omega_k = 1.$$

Für eine stabile numerische Auswertung der numerischen Integrationsformel (2.3) ist weiterhin die Positivität der Integrationsgewichte, $\omega_k > 0$, zu fordern.

Die Integrationsformel (2.3) und die Fehlerabschätzung (2.5) gelten für eine beliebige Wahl der paarweise verschiedenen Stützstellen x_k . Im folgenden betrachten wir zunächst im Intervall $[a, b]$ gleichmässig verteilte Stützstellen.

2.1 Newton–Cotes Integrationsformeln

Für eine äquidistante Verteilung der Stützstellen,

$$x_k = a + k \frac{b-a}{n} = a + kh \quad \text{für } k = 0, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n},$$

ergibt sich für die Berechnung der Integrationsgewichte (2.4) für $k = 0, \dots, n$

$$\omega_k = \int_a^b L_k^n(x) dx = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - (a + jh)}{(k - j)h} dx.$$

Mit der Substitution

$$x = a + th \quad \text{für } t \in [0, n], \quad dx = h dt$$

folgt

$$\omega_k = h \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{t-j}{k-j} dt = \frac{b-a}{n} \tilde{\omega}_k$$

mit

$$\tilde{\omega}_k = \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{t-j}{k-j} dt \quad \text{für } k = 0, \dots, n.$$

Die resultierenden numerischen Integrationsformeln sind die Newton–Cotes–Formeln

$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=0}^n f(x_k) \tilde{\omega}_k. \quad (2.6)$$

Beispiel 2.1. Für $n = 1$ sind die Stützstellen durch

$$x_0 = a, \quad x_1 = b$$

gegeben und für die Integrationsgewichte ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_0 &= \int_0^1 \frac{t-1}{0-1} dt = \int_0^1 (1-t) dt = \frac{1}{2}, \\ \tilde{\omega}_1 &= \int_0^1 \frac{t-0}{1-0} dt = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Damit ist

$$I_1 = (b-a) \left[\frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) \right] = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \quad (2.7)$$

die Trapezregel. Für den Fehler (2.5) ergibt sich

$$I - I_1 = \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b) dx.$$

Die Substitution

$$s(x) = \int (x-a)(x-b) dx = \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{2}(a+b)x^2 + abx$$

ergibt eine für $x \in (a, b)$ streng monoton fallende Funktion, für die die Umkehrfunktion $x = x(s)$ existiert. Durch Anwendung des Mittelwertsatzes der Integralrechnung folgt dann

$$I - I_1 = \frac{1}{2} \int_{s(a)}^{s(b)} f''(\xi(x(s))) ds = \frac{1}{2} [s(b) - s(a)] f''(\xi(x(\bar{s}))) = -\frac{1}{12} f''(\eta) (b-a)^3$$

mit einer Zwischenwertstelle

$$\eta = f''(\xi(x(s))) \in (a, b).$$

Insbesondere gilt

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{1}{12} f''(\eta) (b-a)^3. \quad (2.8)$$

Damit ist die Trapezregel ein Verfahren zweiter Ordnung, d.h. lineare Funktionen werden exakt integriert.

Beispiel 2.2. Wird als Stützstelle nur der Mittelpunkt

$$x_0 = \frac{a+b}{2}$$

betrachtet, so ergibt eine Taylor–Entwicklung (1.76) für $x \in (a, b)$

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x - x_0)^2$$

mit einer geeigneten Zwischenwertstelle $\xi(x) \in (a, b)$. Dann folgt

$$\begin{aligned} I = \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b \left[f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x - x_0)^2 \right] dx \\ &= (b-a) f(x_0) + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi)(x - x_0)^2 dx. \end{aligned}$$

Die Substitution

$$s(x) = \int (x - x_0)^2 dx = \frac{1}{3} (x - x_0)^3$$

ergibt eine für $x \in (a, b)$ streng monoton steigende Funktion, für die die Umkehrfunktion $x = x(s)$ existiert. Durch Anwendung des Mittelwertsatzes der Integralrechnung folgt dann

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi)(x - x_0)^2 dx &= \frac{1}{2} \int_{s(a)}^{s(b)} f''(\xi(x(s))) ds \\ &= \frac{1}{2} [s(b) - s(a)] f''(\xi(x(\bar{s}))) \\ &= \frac{1}{6} [(b - x_0)^3 - (a - x_0)^3] f''(\eta) = \frac{1}{24} (b - a)^3 f''(\eta) \end{aligned}$$

mit einer Zwischenwertstelle $\eta = \xi(x(\bar{s})) \in (a, b)$. Für die Mittelpunkformel

$$I_0 = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad (2.9)$$

folgt dann die Darstellung

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\eta) \quad (2.10)$$

mit einer Zwischenwertstelle $\eta \in (a, b)$. Die Mittelpunktformel ist wieder ein Verfahren zweiter Ordnung, d.h. lineare Funktionen werden exakt integriert. Im Vergleich zur Trapezregel ist aber nur eine Funktionsauswertung von $f(x)$ erforderlich.

Betrachten wir für $f(x)$ das lineare Hermitesche Interpolationspolynom (1.27) für $n = 0$,

$$f_1(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

dann gilt die Darstellung (1.29)

$$f(x) = f_1(x) + \frac{1}{2}f''(\xi(x))(x - x_0)^2$$

und die Abschätzung des Integrationsfehlers folgt wie oben.

Beispiel 2.3. Für $n = 2$ sind die Stützstellen durch

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{1}{2}(a + b), \quad x_2 = b$$

gegeben und für die Integrationsgewichte ergibt sich

$$\tilde{\omega}_0 = \frac{1}{3}, \quad \tilde{\omega}_1 = \frac{4}{3}, \quad \tilde{\omega}_2 = \frac{1}{3}.$$

Die resultierende Integrationsformel

$$I_2 = \frac{1}{6}(b-a) \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (2.11)$$

ist die Simpson-Regel. Wie bei der Mittelpunktformel betrachten wir jetzt für die zu integrierende Funktion $f(x)$ das Hermitesche Interpolationspolynom $f_3(x)$ mit

$$f_3(x_0) = f(x_0), \quad f_3(x_1) = f(x_1), \quad f_3(x_2) = f(x_2), \quad f_3'(x_1) = f'(x_1).$$

Für dieses gilt die Darstellung

$$\begin{aligned} f_3(x) = & f(x_0) \frac{(x-x_1)^2}{(x_0-x_1)^2} \frac{x-x_2}{x_0-x_2} + f(x_2) \frac{(x-x_1)^2}{(x_2-x_1)^2} \frac{x-x_0}{x_2-x_0} \\ & + f(x_1) \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \frac{x-x_2}{x_1-x_2} [\alpha x + \beta] + f'(x_1) \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \frac{x-x_2}{x_1-x_2} (x-x_1) \end{aligned}$$

mit

$$\alpha = \frac{x_0 + x_2 - 2x_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, \quad \beta = 1 - \alpha x_1.$$

Weiters gilt (1.29), d.h.

$$f(x) = f_3(x) + \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi(x))(x - x_0)(x - x_2)(x - x_1)^2.$$

Mit

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{(x - x_1)^2}{(x_0 - x_1)^2} \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} dx &= \frac{1}{6}(b - a), \\ \int_a^b \frac{(x - x_1)^2}{(x_2 - x_1)^2} \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} dx &= \frac{1}{6}(b - a), \\ \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} (\alpha x + \beta) dx &= \frac{2}{3}(b - a), \\ \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} (x - x_1) dx &= 0 \end{aligned}$$

erhalten wir

$$I = I_2 + \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi(x))(x - x_0)(x - x_2)(x - x_1)^2 dx.$$

Daraus folgt

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b - a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{1}{2880} (b - a)^5 f^{(4)}(\eta) \quad (2.12)$$

mit einer Zwischenwertstelle $\eta \in (a, b)$. Die Simpson–Regel ist ein Verfahren vierter Ordnung, d.h. kubische Polynome werden exakt integriert.

Beispiel 2.4. Betrachtet wird das bestimmte Integral

$$I = \int_0^a \sin x dx = 1 - \cos a.$$

Für $f(x) = \sin x$ ist $f''(x) = -\sin x$ und somit folgt

$$|f''(\xi)| \leq f(a) \quad \text{für } \xi \in (0, a).$$

Damit ergeben sich für die Mittelpunkformel (2.9), die Trapezregel (2.7) und für die Simpsonregel (2.11) die folgenden Fehlerabschätzungen

$$|I - I_0| \leq \frac{1}{24} a^3 \sin a, \quad |I - I_1| \leq \frac{1}{12} a^3 \sin a, \quad |I - I_2| \leq \frac{1}{2880} a^5 \sin a.$$

Die in Tabelle 2.4 aufgeführten numerischen Ergebnisse spiegeln die theoretischen Fehlerabschätzungen wieder, wobei die einfache Mittelpunkformel der Trapezregel überlegen scheint.

a	Mittelpunkt		Trapez		Simpson	
	Theorie	Fehler	Theorie	Fehler	Theorie	Fehler
$\frac{\pi}{2}$	1.61 -1	1.11 -1	3.23 -1	2.15 -1	3.32 -3	2.28 -3
$\frac{\pi}{4}$	1.43 -2	7.67 -3	2.85 -2	1.52 -2	7.34 -5	3.94 -5
$\frac{\pi}{8}$	9.66 -4	4.91 -4	1.93 -3	9.81 -4	1.24 -6	6.31 -7

Tabelle 2.1: Fehler der Newton–Cotes Integrationsformeln.

Als notwendiges Kriterium für die Konvergenz der bisherigen numerischen Integrationsformeln ist

$$|b - a| < 1$$

vorauszusetzen. Der allgemeine Fall kann durch zusammengesetzte Integrationsformeln

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx$$

mit Stützstellen

$$x_k = a + k \frac{b-a}{n} \quad \text{für } k = 0, \dots, n$$

und numerischer Integration der verbleibenden Integrale behandelt werden. Mit der Simpson–Regel folgt zum Beispiel

$$\begin{aligned} I_n &= \sum_{k=1}^n \frac{1}{6} (x_k - x_{k-1}) \left[f(x_{k-1}) + 4 f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + f(x_k) \right] \\ &= \frac{b-a}{6n} \sum_{k=0}^n \left[f(x_{k-1}) + 4 f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + f(x_k) \right]. \end{aligned}$$

2.2 Gauß–Legendre Integrationsformeln

Bei den bisherigen Betrachtungen wurden die paarweise verschiedenen Integrationspunkte x_k als gegeben vorausgesetzt. Allgemein enthält die Integrationsformel

$$I_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k$$

$2(n+1)$ frei wählbare Parameter (x_k, ω_k) , $k = 0, \dots, n$. Diese können aus der Forderung der exakten Integration von Polynomen $f(x) = x^\alpha$ für $\alpha = 0, \dots, 2n+1$ gewonnen werden,

$$\int_0^1 x^\alpha dx = \sum_{k=0}^n x_k^\alpha \omega_k.$$

Beispiel 2.5. Für $n = 2$ und das Integrationsintervall $[a, b] = [0, 1]$ ergibt sich zur Bestimmung der Parameter (x_0, ω_0) , (x_1, ω_1) und (x_2, ω_2) das nichtlineare Gleichungssystem

$$\int_a^b x^\alpha dx = \frac{1}{\alpha + 1} = \sum_{k=0}^2 x_k^\alpha \omega_k \quad \text{für } \alpha = 0, \dots, 5.$$

Aus Symmetriegründen ist

$$x_0 = t, \quad x_1 = \frac{1}{2}, \quad x_2 = 1 - t \quad \text{für } t \in [0, 1]$$

und

$$\omega_0 = \omega_2 = \omega$$

zu wählen. Aus der Gleichung für $\alpha = 0$,

$$\omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = 1,$$

folgt dann

$$\omega_1 = 1 - 2\omega.$$

Man prüft leicht nach, daß dann auch die Gleichung für $\alpha = 1$ erfüllt ist,

$$\frac{1}{2} = \omega_0 x_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 = \omega t + (1 - 2\omega) \frac{1}{2} + \omega(1 - t) = \frac{1}{2}.$$

Für $\alpha = 2$ bzw. für $\alpha = 3$ ergibt sich

$$\frac{1}{12} = \omega \left[2t^2 - 2t + \frac{1}{2} \right],$$

während für $\alpha = 4$ bzw. für $\alpha = 5$

$$\frac{11}{80} = \omega \left[2t^4 - 4t^3 + 6t^2 - 4t + \frac{7}{8} \right]$$

folgt. Gleichsetzen liefert

$$40t^4 - 80t^3 + 54t^2 - 14t + 1 = 0$$

mit den Lösungen

$$t_{1/2} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{15}}{10}, \quad t_{3/4} = \frac{1}{2}.$$

Für

$$t = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$$

folgt

$$\omega = \frac{5}{18}.$$

Somit lauten die Stützstellen

$$x_0 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}, \quad x_1 = \frac{1}{2}, \quad x_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$$

und die zugehörigen Integrationsgewichte sind

$$\omega_0 = \frac{5}{18}, \quad \omega_1 = \frac{8}{18}, \quad \omega_2 = \frac{5}{18}.$$

Die resultierende Integrationsformel wird als Gauß–Legendre Integration bezeichnet.

Beispiel 2.6. Wie in Beispiel 2.4 betrachten wir wieder das bestimmte Integral

$$I = \int_0^a \sin x \, dx = 1 - \cos a.$$

Verglichen wird die Simpson–Regel (2.11) mit der in Beispiel 2.5 hergeleiteten Gauß–Legendre Integrationsformel. Bei gleicher Anzahl von Stützstellen zeigt sich eine deutlich schnellere Konvergenz.

a	Simpson–Regel	Gauß–Legendre
$\frac{\pi}{2}$	2.28 –3	8.12 –6
$\frac{\pi}{4}$	3.94 –5	3.48 –8
$\frac{\pi}{8}$	6.31 –7	1.39 –10

Tabelle 2.2: Fehler der Simpson–Regel und der Gauß–Legendre Integrationsformel

Es stellt sich die Frage, wie der in Beispiel 2.5 betrachtete Zugang und insbesondere die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems verallgemeinert werden kann. Zur Berechnung des Integrals (2.1),

$$I = \int_a^b f(x) \, dx,$$

wird eine numerische Integrationsformel

$$I_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k$$

betrachtet, welche Polynome $f_m(x)$ von möglichst maximalen Polynomgrad $m > n$ exakt integriert, d.h.

$$\int_a^b f_m(x) \, dx = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) \omega_k.$$

Bezeichnet

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) L_k^n(x)$$

das Interpolationspolynom vom Grad n , so ist

$$r_m(x) := f_m(x) - f_n(x)$$

ein Polynom vom Grad m mit den $n + 1$ Nullstellen x_k , $k = 0, \dots, n$. Für $r_m(x)$ gilt daher die Darstellung

$$r_m(x) = f_m(x) - f_n(x) = g_{m-(n+1)}(x) \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

mit einem beliebigen, aber durch $f_m(x)$ eindeutig bestimmten Polynom $g_{m-(n+1)}(x)$ vom Grad $m - (n + 1)$. Insbesondere gilt also

$$f_m(x) = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) L_k^n(x) + g_{m-(n+1)}(x) p_{n+1}(x) \quad (2.13)$$

mit

$$p_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j).$$

Einsetzen in die Integrationsformel (2.1) ergibt

$$\int_a^b f_m(x) dx = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) \int_a^b L_k^n(x) dx + \int_a^b g_{m-(n+1)}(x) p_{n+1}(x) dx = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) \omega_k$$

mit den Integrationsgewichten

$$\omega_k = \int_a^b L_k^n(x) dx,$$

falls

$$\int_a^b g_{m-(n+1)}(x) p_{n+1}(x) dx = 0$$

erfüllt ist. Für

$$g_{m-(n+1)}(x) = \sum_{j=0}^{m-(n+1)} \gamma_j p_j(x)$$

mit noch zu bestimmenden linear unabhängigen Polynomen $p_j(x)$ vom Grad j und zugehörigen Koeffizienten γ_j folgt dies aus der Orthogonalität

$$\int_a^b p_j(x) p_{n+1}(x) dx = 0 \quad \text{für } j = 0, \dots, m - (n + 1).$$

Offenbar ist

$$m - (n + 1) \leq n$$

zu fordern, d.h.

$$m \leq 2n + 1,$$

Insbesondere werden Polynome maximalen Grades $2n + 1$ exakt integriert. Benötigt wird also ein System $\{p_j\}_{j=0}^{n+1}$ von zueinander orthogonalen Polynomen $p_j(x)$ vom Grad j mit

$$\int_a^b p_j(x) p_\ell(x) dx = 0 \quad \text{für } \ell \neq j. \quad (2.14)$$

Für die Nullstellen orthogonaler Polynome gilt das folgende Resultat:

Lemma 2.1. *Gegeben sei ein System $\{p^k\}_{k=0}^{n+1}$ orthogonaler Polynome, d.h. es gilt (2.14). Das Polynom $p_{n+1}(x)$ besitzt in $[a, b]$ $n + 1$ einfache reelle Nullstellen $x_i^{(n+1)}$.*

Beweis: Sei $x_0 = \alpha + i\beta$, $\beta \neq 0$, eine komplexe Nullstelle von $p_{n+1}(x)$. Da die Koeffizienten von $p_{n+1}(x)$ reell sind, ist auch $\bar{x}_0 = \alpha - i\beta$ Nullstelle von $p_{n+1}(x)$. Für das Polynom

$$q_{n-1}(x) := \frac{p_{n+1}(x)}{(x - x_0)(x - \bar{x}_0)} = \frac{p_{n+1}(x)}{(x - \alpha)^2 + \beta^2} \quad \text{für } x \in [a, b]$$

mit dem Polynomgrad $n - 1$ ergibt sich mit, siehe (2.14)

$$0 = \int_a^b p_{n+1}(x) q_{n-1}(x) dx = \int_a^b \frac{[p_{n+1}(x)]^2}{(x - \alpha)^2 + \beta^2} dx > 0$$

ein Widerspruch, d.h. $p_{n+1}(x)$ kann keine komplexen Nullstellen besitzen.

Sei $x_0 \in \mathbb{R}$, $x_0 > b$ eine Nullstelle von $p_{n+1}(x)$. Für das Polynom

$$q_n(x) = \frac{p_{n+1}(x)}{x_0 - x} \quad \text{für } x \in (a, b)$$

folgt wieder mit (2.14)

$$0 = \int_a^b p_{n+1}(x) q_n(x) dx = \int_a^b \frac{[p_{n+1}(x)]^2}{(x_0 - x)} dx > 0$$

ein Widerspruch, wodurch eine reelle Nullstelle $x_0 > b$ ausgeschlossen wird.

Durch Betrachtung von

$$q_n(x) = \frac{p_{n+1}(x)}{x - x_0} \quad \text{für } x \in (a, b), \quad x_0 < a,$$

wird analog eine reelle Nullstelle $x_0 < a$ ausgeschlossen.

Somit besitzt $p_{n+1}(x)$ in $[a, b]$ $n + 1$ reelle Nullstellen. Für eine mehrfache Nullstelle x_0 ist

$$q_{n-1}(x) := \frac{p_{n+1}(x)}{(x - x_0)^2}$$

und mit (2.14) ergibt sich wegen

$$0 = \int_a^b p_{n+1}(x)q_{n-1}(x) dx = \int_a^b \frac{[p_{n+1}(x)]^2}{(x - x_0)^2} dx > 0$$

wieder ein Widerspruch. Damit gibt es im Intervall $[a, b]$ $n + 1$ einfache reelle Nullstellen $x_i^{(n+1)}$ des Polynoms $p_{n+1}(x)$. ■

Die Stützstellen der numerischen Integrationsformel ergeben sich dann aus den Nullstellen von

$$p_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j), \quad (2.15)$$

und die Integrationsgewichte ergeben sich entsprechend aus

$$\omega_k = \int_a^b L_k^n(x) dx = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx \quad \text{für } k = 0, \dots, n. \quad (2.16)$$

Mit den durch (2.15) bestimmten Stützstellen x_k und den durch (2.16) gegebenen Integrationsgewichten ω_k ergibt sich die Integrationsformel

$$I_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k. \quad (2.17)$$

Ausgehend von der Basis $\{x^j\}_{j=0}^{n+1}$ der Monome x^j kann durch Anwendung des Orthogonalisierungsverfahrens von Gram–Schmidt ein System orthogonaler Polynome konstruiert werden, vergleiche Algorithmus 2.1.

Setze

$$p_0(x) := 1.$$

Für $k = 0, \dots, n$ berechne

$$p_{k+1}(x) := x^{k+1} - \sum_{\ell=0}^k \beta_{k\ell} p_\ell(x), \quad \beta_{k\ell} := \frac{1}{\alpha_\ell} \int_a^b x^{k+1} p_\ell(x) dx,$$

$$\alpha_{k+1} := \int_a^b [p_{k+1}(x)]^2 dx.$$

Algorithmus 2.1: Konstruktion orthogonaler Polynome.

Beispiel 2.7. Für $n = 2$ und $[a, b] = [0, 1]$ ist zunächst

$$p_0(x) = 1, \quad \alpha_0 = \int_0^1 [p_0(x)]^2 dx = 1.$$

Für $k = 0$ ist

$$\beta_{00} = \frac{1}{\alpha_0} \int_0^1 x p_0(x) dx = \int_0^1 x dx = \frac{1}{2}$$

und somit

$$p_1(x) = x - \beta_{00}p_0(x) = x - \frac{1}{2}, \quad \alpha_1 = \int_0^1 [p_1(x)]^2 dx = \frac{1}{12}.$$

Für $k = 1$ ist

$$\begin{aligned} \beta_{10} &= \frac{1}{\alpha_0} \int_0^1 x^2 p_0(x) dx = \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3}, \\ \beta_{11} &= \frac{1}{\alpha_1} \int_0^1 x^2 p_1(x) dx = 12 \int_0^1 x^2 \left(x - \frac{1}{2}\right) dx = 1 \end{aligned}$$

und somit

$$p_2(x) = x^2 - \beta_{11}p_1(x) - \beta_{10}p_0(x) = x^2 - \left(x - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{3} = x^2 - x + \frac{1}{6},$$

d.h.

$$\alpha_2 = \int_0^1 [p_2(x)]^2 dx = \frac{1}{180}.$$

Für $k = 2$ ist

$$\begin{aligned} \beta_{20} &= \frac{1}{\alpha_0} \int_0^1 x^3 p_0(x) dx = \int_0^1 x^3 dx = \frac{1}{4}, \\ \beta_{21} &= \frac{1}{\alpha_1} \int_0^1 x^3 p_1(x) dx = 12 \int_0^1 x^3 \left(x - \frac{1}{2}\right) dx = \frac{9}{10}, \\ \beta_{22} &= \frac{1}{\alpha_2} \int_0^1 x^3 p_2(x) dx = 180 \int_0^1 x^3 \left(x^2 - x + \frac{1}{6}\right) dx = \frac{3}{2} \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} p_3(x) &= x^3 - \beta_{22}p_2(x) - \beta_{21}p_1(x) - \beta_{20}p_0(x) \\ &= x^3 - \frac{3}{2} \left(x^2 - x + \frac{1}{6}\right) - \frac{9}{10} \left(x - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4} \\ &= x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{5}x - \frac{1}{20}. \end{aligned}$$

Zu bestimmen sind die Nullstellen von $p_3(x)$ durch Lösen der kubischen Gleichung

$$20x^3 - 30x^2 + 12x - 1 = 0$$

mit den Lösungen

$$x_0 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}, \quad x_1 = \frac{1}{2}, \quad x_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}.$$

Für die zugehörigen Integrationsgewichte ist zunächst

$$\omega_0 = \int_0^1 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} dx = \frac{5}{18}$$

und die Werte für $\omega_1 = \frac{4}{9}$ und $\omega_2 = \frac{5}{18}$ ergeben sich analog.

Der Fehler $I - I_n$ der Integrationsformel (2.17) für eine beliebige Funktion $f(x)$ kann auf die Fehlerdarstellung (1.29) des Hermiteschen Interpolationspolynoms zurückgeführt werden.

Satz 2.1. Sei $\{p_j\}_{j=0}^{n+1}$ ein System von orthogonalen Polynomen $p_j(x)$ vom Grad j mit

$$\int_a^b p_j(x) p_\ell(x) dx = 0 \quad \text{für } \ell \neq j.$$

Für $k = 0, \dots, n$ seien x_k die Nullstellen von $p_{n+1}(x)$. Sei f in $[a, b]$ $(2n + 2)$ -mal stetig differenzierbar. Dann gilt

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k + \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \quad (2.18)$$

mit einer geeigneten Zwischenwertstelle $\eta \in (a, b)$.

Beweis: Für die gegebene Funktion f sei f_{2n+1} das Hermitesche Interpolationspolynom vom Grad $2n + 1$ mit

$$f_{2n+1}(x_i) = f(x_i), \quad f'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i) \quad \text{für } i = 0, \dots, n.$$

Mit (1.29) ist

$$f(x) = f_{2n+1}(x) + \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi(x)) \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2$$

mit einer geeigneten Zwischenwertstelle $\xi(x) \in (a, b)$ und somit folgt, nach Konstruktion der numerischen Integrationsformel zur exakten Integration von Polynomen vom Grad $2n + 1$,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b f_{2n+1}(x) dx + \frac{1}{(2n+2)!} \int_a^b f^{(2n+2)}(\xi(x)) \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \\ &= \sum_{k=0}^n f_{2n+1}(x_k) \omega_k + \frac{1}{(2n+2)!} \int_a^b f^{(2n+2)}(\xi(x)) \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \\ &= \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k + \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 dx \end{aligned}$$

mit einer Zwischenwerstelle $\eta \in (a, b)$. Im letzten Schritt wurde die Interpolationsbedingung $f_{2n+1}(x_k) = f(x_k)$ benutzt, sowie ein verallgemeinerter Mittelwertsatz der Integralrechnung verwendet. ■

Ausgehend von $p_0(x) = 1$ können orthogonale Polynome $p_k(x)$ durch das Gram–Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren bestimmt werden, siehe Algorithmus 2.1. Als Ausgangspolynom kann aber auch $xp_k(x)$ gewählt werden, d.h. für $k = 0, \dots, n$ ist

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \sum_{\ell=0}^k \beta_{k\ell} p_\ell(x)$$

mit den Koeffizienten

$$\beta_{k\ell} = \frac{\int_a^b xp_k(x)p_\ell(x) dx}{\int_a^b [p_\ell(x)]^2 dx} \quad \text{für } \ell = 0, \dots, k.$$

Für $\ell < k - 1$ ist $xp_\ell(x)$ ein Polynom vom Grad $\ell + 1$. Dieses kann als Linearkombination der orthogonalen Polynome $\{p_j(x)\}_{j=0}^{\ell+1}$, dargestellt werden,

$$xp_\ell(x) = \sum_{j=0}^{\ell+1} c_j p_j(x), \quad c_j = \frac{\int_a^b xp_\ell(x)p_j(x) dx}{\int_a^b [p_j(x)]^2 dx}.$$

Für den Zähler von $\beta_{k\ell}$ folgt dann

$$\int_a^b xp_k(x)p_\ell(x) dx = \sum_{j=0}^{\ell+1} c_j \int_a^b p_k(x)p_j(x) dx = 0 \quad \text{für alle } \ell < k - 1.$$

Damit ist

$$p_0(x) = 1, \quad p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \beta_{kk}p_k(x) - \beta_{kk-1}p_{k-1}(x) \quad \text{für } k = 0, \dots, n, \quad (2.19)$$

mit den Koeffizienten

$$\beta_{kk} = \frac{\int_a^b xp_k(x)p_k(x) dx}{\int_a^b [p_k(x)]^2 dx}, \quad \beta_{kk-1} = \frac{\int_a^b xp_k(x)p_{k-1}(x) dx}{\int_a^b [p_{k-1}(x)]^2 dx}, \quad (2.20)$$

wobei $p_{-1}(x) = 0$ gesetzt sei.

Lemma 2.2. *Gegeben sei die Rekursionsvorschrift (2.19) und (2.20). Für $[a, b] = [-1, 1]$ gilt*

$$p_{2j}(-x) = p_{2j}(x), \quad p_{2j+1}(-x) = -p_{2j+1}(x) \quad \text{für } j = 0, 1, 2, \dots$$

sowie

$$\beta_{kk} = 0.$$

Beweis: Offensichtlich ist $p_0(x) = 1$ gerade und es folgt

$$p_1(x) = x - \beta_{00}, \quad \beta_{00} = \frac{\int_{-1}^1 x \, dx}{\int_{-1}^1 dx} = 0,$$

d.h.

$$p_1(x) = x, \quad p_1(-x) = -p_1(x),$$

und für den Zähler von β_{11} folgt

$$\int_{-1}^1 x [p_1(x)]^2 \, dx = 0.$$

Nach Induktionsvoraussetzung für $k = 1$ gilt also

$$p_k(-x) = -p_k(x), \quad p_{k-1}(-x) = p_{k-1}(x), \quad \beta_{kk}(x) = 0.$$

Dann folgt

$$p_{k+1}(x) = x p_k(x) - \beta_{kk-1} p_{k-1}(x),$$

d.h.

$$\begin{aligned} p_{k+1}(-x) &= -x p_k(-x) - \beta_{kk-1} p_{k-1}(-x) \\ &= x p_k(x) - \beta_{kk-1} p_{k-1}(x) = p_{k+1}(x) \end{aligned}$$

ist gerade und für den Zähler von β_{k+1k+1} folgt

$$\int_{-1}^1 x [p_{k+1}(x)]^2 \, dx = 0, \quad \text{d.h.} \quad \beta_{k+1k+1} = 0.$$

Ist $p_k(x)$ gerade und $p_{k-1}(x)$ ungerade, so folgt entsprechend, daß $p_{k+1}(x)$ ungerade ist und $\beta_{k+1k+1} = 0$ gilt. ■

Für das Intervall $[a, b] = [-1, 1]$ folgt also die Rekursionsvorschrift

$$p_0(x) = 1, \quad p_{k+1}(x) = x p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x) \quad \text{für } k = 0, \dots, n, \quad (2.21)$$

mit den Koeffizienten

$$\beta_k = \frac{\int_{-1}^1 x p_k(x) p_{k-1}(x) \, dx}{\int_{-1}^1 [p_{k-1}(x)]^2 \, dx}. \quad (2.22)$$

Lemma 2.3. Für die durch (2.21) und (2.22) erzeugte Folge orthogonaler Polynome gilt

$$\int_{-1}^1 [p_k(x)]^2 dx = \frac{2[p_k(1)]^2}{1+2k}. \quad (2.23)$$

Beweis: Für $p_0(x) = 1$ ist

$$\int_{-1}^1 [p_0(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 dx = 2, \quad \frac{2[p_0(1)]^2}{1+2 \cdot 0} = 2$$

und für $p_1(x) = x$ ist

$$\int_{-1}^1 [p_1(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}, \quad \frac{2[p_1(1)]^2}{1+2 \cdot 1} = \frac{2}{3}$$

ist die Behauptung offensichtlich richtig. Für $k > 1$ folgt durch partielle Integration

$$\int_{-1}^1 [p_k(x)]^2 dx = x [p_k(x)]^2 \Big|_{-1}^1 - 2 \int_{-1}^1 x p_k(x) p'_k(x) dx.$$

Nach Konstruktion ist

$$p_k(x) = x^k + q_{k-1}(x),$$

d.h.

$$p'_k(x) = k x^{k-1} + q'_{k-1}(x)$$

bzw.

$$\begin{aligned} x p'_k(x) &= k x^k + x q'_{k-1}(x) \\ &= k [p_k(x) - q_{k-1}(x)] + x q'_{k-1}(x) \\ &= k p_k(x) + x q'_{k-1}(x) - k q_{k-1}(x) \\ &= k p_k(x) + r_{k-1}(x). \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\int_{-1}^1 x p_k(x) p'_k(x) dx = \int_{-1}^1 p_k(x) [k p_k(x) + r_{k-1}(x)] dx = k \int_{-1}^1 [p_k(x)]^2 dx,$$

woraus sich unmittelbar die Behauptung ergibt. ■

Lemma 2.4. Für den in (2.22) erklärten Koeffizienten gilt die Darstellung

$$\beta_k = \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{[p_{k-1}(1)]^2}.$$

Beweis: Für den Zähler von β_k ist

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 x p_k(x) p_{k-1}(x) dx &= \int_{-1}^1 p_k(x) x [x^{k-1} + q_{k-2}(x)] dx \\ &= \int_{-1}^1 p_k(x) [x^k + x q_{k-2}(x)] dx \\ &= \int_{-1}^1 p_k(x) [p_k(x) - q_{k-1}(x) + x q_{k-2}(x)] dx \\ &= \int_{-1}^1 [p_k(x)]^2 dx \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\beta_k = \frac{\int_{-1}^1 [p_k(x)]^2 dx}{\int_{-1}^1 [p_{k-1}(x)]^2 dx} = \frac{\frac{2[p_k(1)]^2}{1+2k}}{\frac{2[p_{k-1}(1)]^2}{1+2(k-1)}} = \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{[p_{k-1}(1)]^2}.$$

■

Damit folgt

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x, \quad p_{k+1}(x) = x p_k(x) - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{[p_{k-1}(1)]^2} p_{k-1}(x) \quad (2.24)$$

und

$$p_0(1) = 1, \quad p_1(1) = 1, \quad p_{k+1}(1) = p_k(1) - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{p_{k-1}(1)}. \quad (2.25)$$

Lemma 2.5. Für die in (2.25) erklärte Rekursion gilt

$$p_k(1) = \frac{k}{2k-1} p_{k-1}(1). \quad (2.26)$$

Beweis: Für $k=1$ ist (2.26) offensichtlich richtig. Mit der Induktionsvoraussetzung

$$p_k(1) = \frac{k}{2k-1} p_{k-1}(1)$$

ergibt sich mit

$$p_{k+1}(1) = p_k(1) - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{p_{k-1}(1)} = \left[1 - \frac{k}{2k+1}\right] p_k(1) = \frac{k+1}{2(k+1)-1} p_k(1)$$

die Behauptung für $k+1$.

■

Für die durch (2.24) erklärten Polynome $p_k(x)$ definieren wir die skalierten Polynome

$$P_k(x) = \frac{p_k(x)}{p_k(1)} \quad \text{mit} \quad P_k(1) = 1.$$

Aus (2.24) folgt dann, unter Verwendung von (2.26),

$$\begin{aligned} p_{k+1}(x) &= xp_k(x) - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{[p_k(1)]^2}{[p_{k-1}(1)]^2} p_{k-1}(x) \\ &= p_k(1) \left[x \frac{p_k(x)}{p_k(1)} - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{p_k(1)}{p_{k-1}(1)} \frac{p_{k-1}(x)}{p_{k-1}(1)} \right] \\ &= p_k(1) \left[x P_k(x) - \frac{2k-1}{2k+1} \frac{p_k(1)}{p_{k-1}(1)} P_{k-1}(x) \right] \\ &= p_k(1) \left[x P_k(x) - \frac{k}{2k+1} P_{k-1}(x) \right]. \end{aligned}$$

Mit

$$p_{k+1}(1) = \frac{k+1}{2k+1} p_k(1)$$

ergibt sich dann

$$P_{k+1}(x) = \frac{p_{k+1}(x)}{p_{k+1}(1)} = \frac{2k+1}{k+1} \left[x P_k(x) - \frac{k}{2k+1} P_{k-1}(x) \right],$$

d.h.

$$(k+1) P_{k+1}(x) = (2k+1) x P_k(x) - k P_{k-1}(x) \quad \text{für } k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

Mit $P_0(x) = 1$ und $P_1(x)$ ist dies die Rekursionsvorschrift der Legendre-Polynome. Aus (2.23) folgt sofort

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{1+2n}.$$

Die Legendre-Polynome $P_n(x)$ können auch als Lösung der Differentialgleichung

$$(x^2 - 1)P_n''(x) + 2xP_n'(x) - n(n+1)P_n(x) = 0 \quad \text{für } x \in (-1, 1)$$

erklärt werden. Ein Potenzreihenansatz und die Skalierungsbedingung $P_n(1) = 1$ führt dann zu der als Rodrigues-Formel bekannten Darstellung

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (2.28)$$

Die Orthogonalität und die Rekursion der Legendre-Polynome folgt dann unter Verwendung der Differentialgleichung.

Für die ersten sechs Legendre–Polynome erhalten wir

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \\ P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \\ P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x). \end{aligned}$$

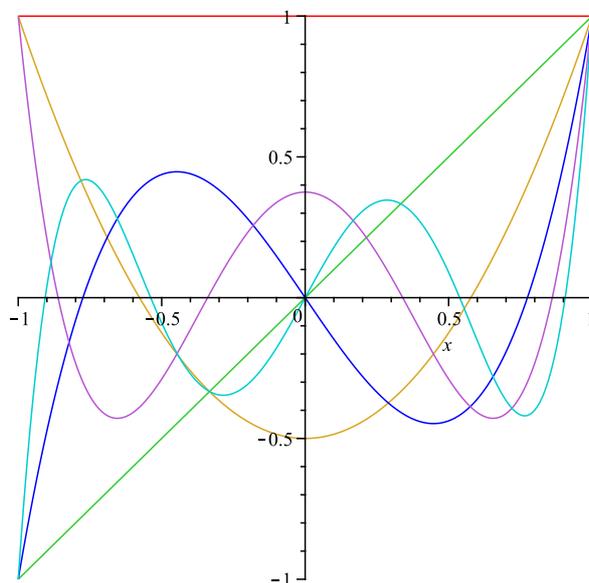


Abbildung 2.1: Legendre–Polynome $P_0(x), \dots, P_5(x)$.

2.3 Gauß–Tschebyscheff Integrationsformeln

Abschließend sollen geeignete numerische Integrationsformeln für gewichtete Integrale der Form

$$I = \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad I_n = \sum_{k=0}^n f(x_k) \omega_k \quad (2.29)$$

betrachtet werden. Wie bei der Herleitung der Gauß–Legendre Integrationsformeln sollen zunächst Polynome $f_m(x)$ von möglichst maximalen Polynomgrad $m = 2n + 1$ exakt

integriert werden. Für Polynome f_m vom Grad $m = 2n + 1$ gilt die Darstellung (2.13),

$$f_m(x) = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) L_k^n(x) + g_{m-(n+1)}(x) \prod_{j=0}^n (x - x_j).$$

Einsetzen in die Integrationsformel (2.29) ergibt

$$\int_{-1}^1 \frac{f_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{-1}^1 \frac{g_{m-(n+1)}(x) p_{n+1}(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{k=0}^n f_m(x_k) \omega_k$$

mit den Integrationsgewichten

$$\omega_k = \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad p_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j),$$

falls

$$\int_{-1}^1 \frac{g_{m-(n+1)}(x) p_{n+1}(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0$$

erfüllt ist. Gesucht sind also orthogonale Polynome $p_j(x)$ vom Grad j mit

$$\int_{-1}^1 \frac{p_j(x) p_\ell(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0 \quad \text{für } \ell \neq j.$$

Lemma 2.6. Für die durch (1.16) definierten Tschebyscheff-Polynome $T_k(x)$ gilt die Orthogonalität

$$\int_{-1}^1 \frac{T_j(x) T_\ell(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & \text{für } \ell \neq j, \\ \frac{\pi}{2} & \text{für } \ell = j \neq 0, \\ \pi & \text{für } \ell = j = 0. \end{cases} \quad (2.30)$$

Beweis: Mit der Substitution

$$x = \cos \varphi, \quad \frac{dx}{d\varphi} = -\sin \varphi, \quad \varphi \in [\pi, 0]$$

und der Darstellung (1.17) ist zunächst

$$\int_{-1}^1 \frac{T_j(x) T_\ell(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \int_{-1}^1 \frac{\cos(j \arccos x) \cos(\ell \arccos x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \int_0^\pi \cos j\varphi \cos \ell\varphi d\varphi.$$

Aus dem Additionstheorem

$$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2}$$

folgt mit

$$\alpha = (j + \ell)\varphi, \quad \beta = (j - \ell)\varphi$$

für den Integranden

$$\cos j\varphi \cos \ell\varphi = \frac{1}{2} [\cos(j + \ell)\varphi + \cos(j - \ell)\varphi].$$

Damit ist

$$\int_{-1}^1 \frac{T_j(x)T_\ell(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(j + \ell)\varphi + \cos(j - \ell)\varphi] d\varphi.$$

Für $j \neq \ell$ und $m = j \pm \ell \neq 0$ folgt die Behauptung aus

$$\int_0^\pi \cos m\varphi d\varphi = 0.$$

Für $j = \ell = 0$ ist $T_0(x) = 1$ und somit

$$\int_{-1}^1 \frac{T_0(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \int_0^\pi d\varphi = \pi,$$

und für $j = \ell \neq 0$ ergibt sich

$$\int_{-1}^1 \frac{T_j(x)T_j(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{1}{2} \int_0^\pi d\varphi = \frac{\pi}{2}.$$

Als Stützstellen x_k der numerischen Integrationsformel I_n sind also die Nullstellen $x_k^{(n+1)}$ des Tschebyscheff–Polynoms $T_{n+1}(x)$ zu wählen, ■

$$x_k^{(n+1)} = \cos \frac{(1 + 2k)\pi}{2(n + 1)} \quad \text{für } k = 0, \dots, n.$$

Zu berechnen bleiben die Integrationsgewichte

$$\omega_k = \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x)}{\sqrt{1-x^2}} \quad \text{für } k = 0, \dots, n.$$

Stellen wir das Lagrange-Polynom $L_k^n(x)$ in der Basis der Tschebyscheff-Polynome dar,

$$L_k^n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i T_i(x),$$

so erhalten wir für die Zerlegungskoeffizienten

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

bzw.

$$a_i = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x) T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Da die Integrationsformel exakt für Polynome vom maximalen Grad $2n+1$ ist, folgt

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{1}{\pi} \sum_{\ell=0}^n L_k^n(x_\ell) \omega_\ell = \frac{1}{\pi} \omega_k$$

bzw.

$$a_i = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{L_k^n(x) T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{2}{\pi} \sum_{\ell=0}^n L_k^n(x_\ell) T_i(x_\ell) \omega_\ell = \frac{2}{\pi} T_i(x_k) \omega_k \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Dann ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{[L_k^n(x)]^2}{\sqrt{1-x^2}} dx &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \alpha_i \alpha_j \int_{-1}^1 \frac{T_i(x) T_j(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \\ &= \alpha_0^2 \pi + \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \\ &= \omega_k^2 \left[\frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n [T_i(x_k)]^2 \right]. \end{aligned}$$

Andererseits ist

$$\int_{-1}^1 \frac{[L_k^n(x)]^2}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{\ell=0}^n [L_k^n(x_\ell)]^2 \omega_\ell = \omega_k,$$

und somit folgt

$$\begin{aligned} \omega_k &= \left[\frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n [T_i(x_k)]^2 \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n \left[\cos i \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} \right]^2 \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Mit

$$\left[\cos \frac{\alpha}{2} \right]^2 = \frac{1}{2} [1 + \cos \alpha]$$

folgt

$$\begin{aligned} \omega_k &= \pi \left[1 + \sum_{i=1}^n \left[1 + \cos \frac{(2k+1)i\pi}{n+1} \right] \right]^{-1} \\ &= \pi \left[n+1 + \sum_{i=1}^n \cos \frac{(2k+1)i\pi}{n+1} \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Für $n = 2m$ ist

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \cos \frac{(2k+1)i\pi}{n+1} &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} + \cos \frac{(2k+1)(2m+1-i)\pi}{2m+1} \right] \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} + \cos \left((2k+1)\pi - \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} \right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} + \cos(2k+1)\pi \cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} \right] \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} - \cos \frac{(2k+1)i\pi}{2m+1} \right] = 0. \end{aligned}$$

Entsprechend ist für $n = 2m+1$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \cos \frac{(2k+1)i\pi}{n+1} &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2(m+1)} + \cos \frac{(2k+1)(2(m+1)-i)\pi}{2(m+1)} \right] + \cos(2k+1)\frac{\pi}{2} \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\cos \frac{(2k+1)i\pi}{2(m+1)} + \cos \left((2k+1)\pi - \frac{(2k+1)i\pi}{2(m+1)} \right) \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

Für die Integrationsgewichte ω_k ergibt sich somit

$$\omega_k = \frac{\pi}{n+1} \quad \text{für } k = 0, \dots, n.$$

Damit folgt die numerische Integrationsformel

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{n+1} \sum_{k=0}^n f(x_k^{(n+1)}) + \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 \prod_{j=0}^n (x - x_j^{(n+1)})^2 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad (2.31)$$

mit einer geeigneten Zwischenwertstelle $\eta \in (-1, +1)$. Die Integrationsformel (2.31) ist nach Konstruktion exakt für alle Polynome vom Grad $2n+1$. Insbesondere für $f(x) = T_k(x)T_\ell(x)$ mit $k, \ell = 0, \dots, n$ folgt also

$$\int_{-1}^1 \frac{T_k(x)T_\ell(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^n T_k(x_i^{(n+1)})T_\ell(x_i^{(n+1)}).$$

Mit der Orthogonalität (2.30) folgt daraus

$$\sum_{i=0}^n T_k(x_i^{(n+1)})T_\ell(x_i^{(n+1)}) = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq \ell, \\ \frac{1}{2}(n+1) & \text{für } k = \ell \neq 0, \\ n+1 & \text{für } k = \ell = 0. \end{cases} \quad (2.32)$$

Wird für das globale Interpolationspolynom $f_n(x)$ vom Grad n der Ansatz

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k T_k(x)$$

mit den Tschebyscheff-Polynomen $T_k(x)$ gewählt, so lauten die Interpolationsgleichungen in den Nullstellen $x_i^{(n+1)}$ des Tschebyscheff-Polynoms $T_{n+1}(x)$

$$f_n(x_i^{(n+1)}) = \sum_{k=0}^n a_k T_k(x_i^{(n+1)}) = f(x_i^{(n+1)}) \quad \text{für } i = 0, \dots, n.$$

Für die Bestimmung der Zerlegungskoeffizienten ist also ein lineares Gleichungssystem mit einer vollbesetzten Matrix, d.h. mit einer Matrix mit $(n+1)^2$ Nichtnulleinträgen, zu lösen. Die Anwendung eines direkten Lösungsverfahrens, zum Beispiel des Gaußschen Eliminationsverfahrens, erfordert $\mathcal{O}(n^3)$ wesentliche Operationen, d.h. eine Verdoppelung von n verachtfacht die erforderliche Rechenzeit.

Zu bestimmen bleiben die Zerlegungskoeffizienten von f_n als Lösung des zugehörigen linearen Gleichungssystems. Der Ansatz

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k T_k(x)$$

mit Tschebyscheff-Polynomen $T_k(x)$ führt dann auf die Interpolationsgleichungen

$$f_n(\bar{x}_i^{(n+1)}) = \sum_{k=0}^n a_k T_k(\bar{x}_i^{(n+1)}) = f_i \quad \text{für } i = 0, \dots, n.$$

Zur Bestimmung der Zerlegungskoeffizienten a_k werden die Interpolationsgleichungen mit $T_\ell(\bar{x}_i^{(n+1)})$ multipliziert und über $i = 0, \dots, n$ summiert,

$$\sum_{i=0}^n \sum_{k=0}^n a_k T_k(\bar{x}_i^{(n+1)}) T_\ell(\bar{x}_i^{(n+1)}) = \sum_{i=0}^n f_i T_\ell(\bar{x}_i^{(n+1)}).$$

Es gilt

$$\sum_{i=0}^n T_k(\bar{x}_i^{(n+1)}) T_\ell(\bar{x}_i^{(n+1)}) = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq \ell, \\ \frac{1}{2}(n+1) & \text{für } k = \ell \neq 0, \\ n+1 & \text{für } k = \ell = 0 \end{cases}$$

und somit

$$a_0 = \frac{1}{(n+1)} \sum_{i=0}^n f_i \quad \text{für } k = 0$$

bzw.

$$a_k = \frac{2}{n+1} \sum_{i=0}^n f_i T_k(\bar{x}_i^{(n+1)}) \quad \text{für } k = 1, \dots, n.$$

Dies ist gleichbedeutend mit

$$a_k = \frac{2}{n+1} \sum_{i=0}^n f_i \cos k \frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)} \quad \text{für } k = 1, \dots, n.$$

Eine effiziente Berechnung der Zerlegungskoeffizienten a_k kann schließlich durch eine schnelle Fouriertransformation realisiert werden, siehe zum Beispiel [14].

2.4 Schnelle Fouriertransformation

In diesem Abschnitt sollen effiziente Verfahren zur Realisierung der diskreten Kosinus-Transformation

$$a_k = \sum_{j=0}^{n-1} f_j \cos \frac{2\pi k j}{n} \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1 \quad (2.33)$$

beziehungsweise der diskreten Sinus-Transformation

$$b_k = \sum_{j=1}^{n-1} f_j \sin \frac{2\pi k j}{n} \quad \text{für } k = 1, \dots, n-1 \quad (2.34)$$

betrachtet werden. Durch Übergang ins Komplexe sind diese gleichbedeutend mit der komplexen Fouriertransformation

$$c_k = \sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-i2\pi k j/n} \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1. \quad (2.35)$$

Anwendungen dieser Art ergeben sich beispielsweise bei der Interpolation mit Tschebyscheff-Polynomen oder bei der Beschreibung zirkulanter Matrizen.

Eine direkte Auswertung der Koeffizienten c_k in (2.35) erfordert n^2 komplexe Multiplikationen. Ziel ist deshalb die Herleitung eines schnelleren Berechnungsverfahrens. Die Idee dafür

besteht in der Rückführung der ursprünglichen Aufgabe auf eine Folge ähnlicher Probleme kleinerer Dimension.

Sei $n = 2m$. Dann ergibt sich für die Koeffizienten c_k mit geradzahligem Index $k = 2\ell$ für $\ell = 0, \dots, m-1$ durch Aufspalten der Summe

$$\begin{aligned}
 c_{2\ell} &= \sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-i2\pi 2\ell j/n} \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j e^{-i2\pi 2\ell j/n} + f_{m+j} e^{-i2\pi 2\ell(m+j)/n}] \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j + f_{m+j} e^{-i2\pi 2\ell m/n}] e^{-i2\pi 2\ell j/n} \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j + f_{m+j}] e^{-i2\pi \ell j/m}.
 \end{aligned}$$

Für die Koeffizienten c_k mit ungeradem Index $k = 2\ell + 1$ und $\ell = 0, \dots, m-1$ ergibt sich analog

$$\begin{aligned}
 c_{2\ell+1} &= \sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-i2\pi(2\ell+1)j/n} \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j e^{-i2\pi(2\ell+1)j/n} + f_{m+j} e^{-i2\pi(2\ell+1)(m+j)/n}] \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j + f_{m+j} e^{-i2\pi(2\ell+1)m/n}] e^{-i2\pi(2\ell+1)j/n} \\
 &= \sum_{j=0}^{m-1} [f_j - f_{m+j}] e^{-i2\pi j/n} e^{-i2\pi \ell j/m}.
 \end{aligned}$$

Damit kann die Fourier-Transformation (2.35) für n Koeffizienten realisiert werden durch zwei Fourier-Transformation für $m = n/2$ Koeffizienten, wobei die modifizierten Koeffizienten

$$\hat{f}_j = f_j + f_{m+j}, \quad \hat{f}_{m+j} = [f_j - f_{m+j}] e^{-i2\pi j/n} \quad (2.36)$$

für $j = 0, \dots, m-1$ zu berechnen sind. Für $n = 2^p$ ist dieses Vorgehen rekursiv anwendbar, und nach p Reduktionsschritten sind n Fourier-Transformationen für jeweils einen Koeffizienten durchzuführen. Bei der Berechnung der Koeffizienten mit ungeradem Index sind dabei jeweils $m = n/2$ komplexe Multiplikationen zu realisieren. Damit ergeben sich insgesamt

$$p \frac{n}{2} = \frac{1}{2} n \log n$$

komplexe Multiplikationen.

Beispiel 2.8. *Betrachtet wird die komplexe Fourier-Transformation (2.35) für die Berechnung von $n = 2^3 = 8$ Koeffizienten,*

$$c_k = \sum_{j=0}^7 f_j e^{-i2\pi kj/8} \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1.$$

Die rekursive Anwendung der Vorschrift (2.36) für die Berechnung der Koeffizienten c_k ergibt das folgende Schema:

$$\begin{array}{r}
 \begin{array}{ccc}
 c_0 & f_0^1 = f_0 + f_4 & c_0 & f_0^2 = f_0^1 + f_2^1 & c_0 & f_0^3 = f_0^2 + f_1^2 \\
 c_2 & f_1^1 = f_1 + f_5 & c_4 & f_1^2 = f_1^1 + f_3^1 & c_4 & f_1^3 = f_0^2 - f_1^2 \\
 c_4 & f_2^1 = f_2 + f_6 & c_2 & f_2^2 = (f_0^1 - f_2^1)\omega_4^0 & c_2 & f_2^3 = f_2^2 + f_3^2 \\
 c_6 & f_3^1 = f_3 + f_7 & c_6 & f_3^2 = (f_1^1 - f_3^1)\omega_4^1 & c_6 & f_3^3 = f_2^2 - f_3^2 \\
 \hline
 c_1 & f_4^1 = (f_0 - f_4)\omega_8^0 & c_1 & f_4^2 = f_4^1 + f_6^1 & c_1 & f_4^3 = f_4^2 + f_5^2 \\
 c_3 & f_5^1 = (f_1 - f_5)\omega_8^1 & c_5 & f_5^2 = f_5^1 + f_7^1 & c_5 & f_5^3 = f_4^2 - f_5^2 \\
 c_5 & f_6^1 = (f_2 - f_6)\omega_8^2 & c_3 & f_6^2 = (f_4^1 - f_6^1)\omega_4^0 & c_3 & f_6^3 = f_6^2 + f_7^2 \\
 c_7 & f_7^1 = (f_3 - f_7)\omega_8^3 & c_7 & f_7^2 = (f_5^1 - f_7^1)\omega_4^1 & c_7 & f_7^3 = f_6^2 - f_7^2
 \end{array}
 \end{array}$$

Dabei sind

$$\omega_m^k = e^{i2\pi k/m} \quad \text{für } k = 0, \dots, m-1$$

die komplexen Einheitswurzeln.

Nach der dreifachen Anwendung der Vorschrift (2.36) sind schließlich die erhaltenen Werte f_j^3 den Koeffizienten c_k zuzuordnen. Dabei sind die durch die Umnummerierungen erfolgten Permutationen der Indizes der Koeffizienten c_k zu berücksichtigen. Dies kann durch eine Spiegelung der Binärdarstellung der Indizes erfolgen:

Zuordnung	Index von f_j^3	binär	Index von c_k	binär
$c_0 = f_0^3$	0	0 0 0	0	0 0 0
$c_4 = f_1^3$	1	0 0 1	4	1 0 0
$c_2 = f_2^3$	2	0 1 0	2	0 1 0
$c_6 = f_3^3$	3	0 1 1	6	1 1 0
$c_1 = f_4^3$	4	1 0 0	1	0 0 1
$c_5 = f_5^3$	5	1 0 1	5	1 0 1
$c_3 = f_6^3$	6	1 1 0	3	0 1 1
$c_7 = f_7^3$	7	1 1 1	7	1 1 1

Für eine weitergehende Diskussion der schnellen Fouriertransformation sei hier auf [3] verwiesen, siehe auch [17] für eine Implementierung für allgemeines $n \in \mathbb{N}$.