Orthogonalpolynome — Einführung, Eigenschaften und Anwendungen

Anna Weller

Seminar zur Numerik im SS 2018, Universität zu Köln
10. April 2018

Ziel dieses Vortrags: Einführung in die Theorie der Orthogonalpolynome

- Motivation und Definition
- Eigenschaften von Orthogonalpolynomen
- Ausblick: Berechnung und Anwendungen

Verwendete Literatur:

[G] W. Gautschi, Orthogonal Polynomials, Oxford University Press, 2004.

[P] R. Plato, Numerische Mathematik kompakt, Vieweg, 3. Auflage, 2006.

[W] W. Walter, Analysis 2, Springer, 5. Auflage, 2002.

Motivation — Polynominterpolation

Allgemeines Interpolationsproblem:

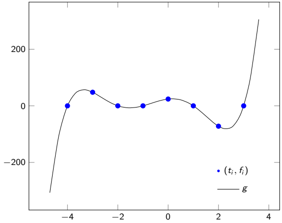
Gegeben: Stützstellen $t_0, \ldots, t_n \in \mathbb{R}$

Daten $f_0, \ldots, f_n \in \mathbb{R}$

Gesucht: Stetige Funktion g mit

$$g(t_i) = f_i$$

für alle $i = 0, \ldots, n$.



Polynome

Reelles Polynom: $p(t) = a_k t^k + a_{k-1} t^{k-1} + \cdots + a_1 t + a_0$, wobei $a_i \in \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{N}_0$

- $\mathbb{P}$: Raum aller reellen Polynome

Polynominterpolation: Interpolation mit Polynomen, d.h. $g \in \mathbb{P}$

- Einfaches Ableiten und Integrieren von Polynomen
- Nützlich zur numerischen Integration und Lösung von Differentialgleichungen

Motivation — Polynominterpolation

Wie finden wir passende Polynome?

- Basis bestimmen, durch die alle Polynome in $\mathbb{P}$ dargestellt werden können
- Warum ist eine Orthogonalbasis sinnvoll?

Exkurs Orthogonalbasis

Sei $\{v_1, v_2\}$ Basis des $\mathbb{R}^2$

- Jedes $v \in \mathbb{R}^2$ besitzt Darstellung $v = c_1 v_1 + c_2 v_2$ mit $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$
- Effiziente Berechnung der Koeffizienten c_1, c_2 und der Darstellung von v?

Betrachte nun Orthogonalbasis $\{w_1, w_2\}$ bezüglich des Skalarprodukts $\langle w_1, w_2 \rangle = w_1^T w_2$, d.h.

$$\langle w_1, w_2 \rangle = 0$$

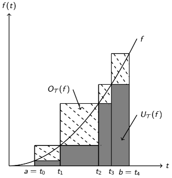
- Dann gilt $\langle v, w_1 \rangle = c_1 \langle w_1, w_1 \rangle + c_2 \langle w_2, w_1 \rangle = c_1 \langle w_1, w_1 \rangle$
- Wegen Orthogonalität ist $c_1 = \langle v, w_1 \rangle / \langle w_1, w_1 \rangle$
- Für Orthonormalbasis mit $\langle w_1, w_1 \rangle = 1$ sogar $c_1 = \langle v, w_1 \rangle$

$\Rightarrow$ Verallgemeinerung des Begriffs der Orthogonalität für Polynome nötig

Grundlagen aus der Maßtheorie

Riemann-Integral

- $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ beschränkte Funktion
- $\mathcal{T} = \{t_0, \dots t_n\}$ Partition von $[a, b]$ und $\Delta t_k := t_k - t_{k-1}$
- Obersumme: $O_{\mathcal{T}}(f) := \sum_{k=1}^{n} \sup_{t \in [t_{k-1}, t_k]} f(t)\, \Delta t_k$
- Untersumme: $U_{\mathcal{T}}(f) := \sum_{k=1}^{n} \inf_{t \in [t_{k-1}, t_k]} f(t)\, \Delta t_k$



- oberes und unteres Riemann-Integral

$$\overline{\int_a^b} f(t)dt = \inf_{\mathcal{T}} O_{\mathcal{T}}(f) \quad \text{und} \quad \underline{\int_a^b} f(t)dt = \sup_{\mathcal{T}} U_{\mathcal{T}}(f)$$

Verallgemeinerung: Riemann-Stieltjes Integral [W]

- $\lambda : [a, b] \to \mathbb{R}$ monoton wachsende Funktion, $\Delta\lambda_k := \lambda(t_k) - \lambda(t_{k-1})$
- $O_{\mathcal{T},\lambda}(f) := \sum_{k=1}^{n} \sup_{t \in [t_{k-1}, t_k]} f(t)\, \Delta\lambda_k$ und $U_{\mathcal{T},\lambda}(f) := \sum_{k=1}^{n} \inf_{t \in [t_{k-1}, t_k]} f(t)\, \Delta\lambda_k$
- oberes und unteres Riemann-Stieltjes Integral

$$\overline{\int_a^b} f(t)d\lambda(t) = \inf_{\mathcal{T}} O_{\mathcal{T},\lambda}(f) \quad \text{und} \quad \underline{\int_a^b} f(t)d\lambda(t) = \sup_{\mathcal{T}} U_{\mathcal{T},\lambda}(f)$$

- $\lambda : [a, b] \to \mathbb{R}$ monoton wachsend mit induziertem positiven Maß $d\lambda$
- $d\lambda$ mit endlichen Momenten $\mu_r(d\lambda) := \int_{\mathbb{R}} t^r d\lambda(t)$, d.h. $\mu_r < \infty$ für $r = 0, 1, 2, \ldots$
- $\mathbb{P}$ Raum der reellen Polynome, $\mathbb{P}_d$ Raum der reellen Polynome mit Grad $\leq d$
- Für $u, v \in \mathbb{P}$ definiere inneres Produkt

$$(u, v)_{d\lambda} := \int_{\mathbb{R}} u(t)v(t)d\lambda(t)$$

mit zugehöriger Norm $\|u\|_{d\lambda} := \sqrt{(u, u)_{d\lambda}}$

Orthogonalität: Zwei Polynome u und v aus $\mathbb{P}$ heißen orthogonal, falls $(u, v)_{d\lambda} = 0$

Bemerkung

- In Anwendungen meistens absolut stetige Maße $d\lambda$
- Dann ist $d\lambda(t) = \omega(t)dt$
- ω Gewichtsfunktion auf $\mathbb{R}$, nicht negativ und integrierbar

$$\Rightarrow (u, v)_{d\lambda} = \int_{\mathbb{R}} u(t)v(t)\, d\lambda(t) = \int_{\mathbb{R}} u(t)v(t)\, \omega(t)\, dt$$

Im Folgenden häufig $(\cdot, \cdot) = (\cdot, \cdot)_{d_\lambda}$ und $\| \cdot \| = \| \cdot \|_{d\lambda}$, wenn Maß aus Zusammenhang bekannt

Normierte Orthogonalpolynome und Orthonormalpolynome

Normiertes Polynom: $\pi_k(t) = a_k t^k + a_{k-1} t^{k-1} + \cdots + a_1 t + a_0$ mit $a_k = 1$.

Normierte Orthogonalpolynome $\pi_k(\cdot\,; d\lambda) = \pi_k(\cdot)$ im Hinblick auf das Maß $d\lambda$ erfüllen

(i) $(\pi_k, \pi_\ell) = 0$ für $k \neq \ell$ und $k, \ell = 0, 1, 2, \ldots$

(ii) $\|\pi_k\| > 0$ für $k = 0, 1, 2, \ldots$

Eigenschaften

- $\pi_0, \pi_1, \ldots \pi_n$ linear unabhängig
- Jedes $p \in \mathbb{P}_n$ besitzt eindeutige Darstellung

$$p = \sum_{k=0}^{n} c_k \pi_k$$

für $c_k \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow \pi_0, \pi_1, \ldots \pi_n$ bilden Orthogonalbasis von $\mathbb{P}_n$

Orthonormal-Polynome $\tilde{\pi}(\cdot\,; d\lambda) = \tilde{\pi}(\cdot)$

- Normalisierung $\tilde{\pi}_k = \pi_k / \|\pi_k\|$, $k = 0, 1, 2, \ldots$
- $(\tilde{\pi}_k, \tilde{\pi}_\ell) = \delta_{k\ell} := \begin{cases} 0 & \text{falls } k \neq \ell, \\ 1 & \text{falls } k = \ell. \end{cases}$

Positiv-Definitheit des inneren Produkts

Erinnerung

- Maß $d\lambda$ mit endlichen Momenten $\mu_r = \int_{\mathbb{R}} t^r d\lambda(t)$ für $r = 0, 1, 2, \ldots$
- inneres Produkt $(u, v) = \int_{\mathbb{R}} u(t)v(t)d\lambda(t)$
- zugehörige Norm $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$

Das innere Produkt heißt positiv definit, falls $\|u\| > 0$ für alle $u \in \mathbb{P}$

Kriterium für die Positiv-Definitheit

Hankel-Determinante in den Momenten μ_r:

$$\Delta_n := \det M_n \quad \text{mit} \quad M_n := \begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-2} \end{bmatrix}, \; n = 1, 2, 3, \ldots$$

Satz: Inneres Produkt positiv definit auf $\mathbb{P}$ genau dann, wenn $\Delta_n > 0$ für $n = 1, 2, 3, \ldots$

Beweis: Siehe Gautschi [G]

Existenz normierter Orthogonalpolynome [G]

Satz: Inneres Produkt $(\cdot\,,\cdot)$ positiv definit auf $\mathbb{P}$

$\Rightarrow$ Es existiert eindeutig bestimmte unendliche Folge normierter Orthogonalpolynome $\{\pi_k\}_{k\in\mathbb{N}_0}$

Beweis:

- Sei $e_k(t) := t^k$ für $k = 0, 1, 2, \ldots$
- Wende Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren mit $\pi_0 = 1$ auf e_k an

$$\Rightarrow \pi_k = e_k - \sum_{\ell=0}^{k-1} c_\ell \pi_\ell, \quad c_\ell = \frac{(e_k, \pi_\ell)}{(\pi_\ell, \pi_\ell)}$$

Mit vollständiger Induktion folgt:

- π_k existiert, da $(\cdot,\cdot)$ positiv definit und somit $(\pi_\ell, \pi_\ell) > 0$
- π_k eindeutig bestimmt nach Konstruktion
- π_k orthogonal zu allen Polynomen π_j mit $j < k$ nach Konstruktion

Beispiel: Tschebyscheff-Polynome [P]

Betrachte Maß

$$d\lambda(t) := \frac{1}{\sqrt{1-t^2}}dt$$

auf $(-1,1)$ und zugehöriges n-tes Tschebyscheff-Orthogonalpolynom

$$T_n(t) = \cos(n \arccos(t))$$

Orthogonalität

Trigonometrische Beziehung: $2\cos(mx)\cos(nx) = \cos((m+n)x) + \cos((m-n)x)$

Substitution $t = cos(x)$ liefert

$$\begin{aligned}
(T_n(t), T_m(t))_{d\lambda} &= \int_{-1}^{1} \frac{\cos(n \arccos(t))\cos(m \arccos(t))}{\sqrt{1-t^2}}dt \\
&= \int_0^{\pi} \cos(nx)\cos(mx)dx \\
&= \frac{1}{2}\int_0^{\pi} [\cos((m+n)x) + \cos((m-n)x)]\, dx \\
&= 0 \text{ für } n \neq m.
\end{aligned}$$

Trigonometrische Beziehung $\cos((n+1)x) + \cos((n-1)x) = 2\cos(x)\cos(nx)$ für $m = 1$ liefert

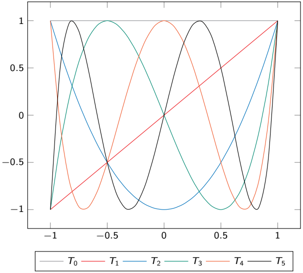
$$\begin{aligned} T_{n+1} &= \cos((n+1)\arccos(t)) \\ &= 2\cos(\arccos(t))\cos(n\arccos(t)) - \cos((n-1)\arccos(t)) \\ &= 2tT_n(t) - T_{n-1}(t) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ T_{n+1} lässt sich rekursiv aus T_n und T_{n-1} konstruieren, wobei $T_0(t) = 1$ und $T_1(t) = t$

$\Rightarrow$ T_n ist ein Polynom, da $T_n(t) = 2^{n-1}t^n + \dots$

Die ersten Tschebyscheff Orthogonalpolynome sind gegeben durch...

$$\begin{aligned} T_0(t) &= 1 \\ T_1(t) &= t \\ T_2(t) &= 2t^2 - 1 \\ T_3(t) &= 4t^3 - 3t \\ T_4(t) &= 8t^4 - 8t^2 + 1 \\ T_5(t) &= 16t^5 - 20t^3 + 5t \end{aligned}$$



Ausblick — Berechnung von Orthogonalpolynomen

Drei-Term-Rekursion: Für normierte Orthogonalpolynome $\pi_k(\cdot)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ gilt

$$\pi_{k+1}(t) = (t - \alpha_k)\pi_k(t) - \beta_k \pi_{k-1}(t) \quad \text{für } k = 0, 1, 2, \dots$$
$$\pi_{-1}(t) = 0, \pi_0(t) = 1,$$

wobei

$$\alpha_k := \frac{(t\pi_k, \pi_k)}{(\pi_k, \pi_k)} \quad \text{für} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

$$\beta_k := \frac{(\pi_k, \pi_k)}{(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})} \quad \text{für } k = 1, 2, \dots$$

Aufgabe: Berechnung der ersten n Rekursionskoeffizienten $\alpha_k(d\lambda)$ und $\beta_k(d\lambda)$

Hier:

- Maß $d\lambda$ ist implizit gegeben durch Momente $\mu_r = \int_{\mathbb{R}} t^r d\lambda(t)$ für $r = 0, 1, 2, \dots$
- Konstruiere Rekursionskoeffizienten über die Momente des zugehörigen Maßes
- Effizienz Momente-basierter Verfahren hängt stark von der Kondition des zugrunde liegenden Problems ab
- Algorithmus von Tschebyscheff

Ausblick — Anwendungen

Quadratur-Regeln

- Verfahren zur numerischen Integration
- Approximiere Integral mithilfe von Stützstellen
- Zusammenhang zwischen der Güte der Approximation und der Wahl der Stützstellen
- Berechnung der Gauss-Quadratur in Matlab

Kleinste-Quadrate-Approximation

- Verfahren zur Lösung von Ausgleichsproblemen
- Zu N gegebenen Datenpunkten (t_i, f_i) finde Polynom $\hat{p}$ mit

$$\sum_{i=1}^{N} \omega_i(\hat{p}(t_i) - f_i)^2 = \min_{p \in \mathbb{P}_n} \omega_i(p(t_i) - f_i)^2$$

  für positive Gewichte ω_i
- Üblich: $\hat{p}$ Polynom vom Grad $n \ll N$
- Routinen zur kleinste-Quadrate-Approximation in Matlab

Ausblick — Sobolev-Orthogonalpolynome

- Gleichzeitige Approximation einer Funktion und deren Ableitung
- Betrachte inneres Produkt, das Ableitungen enthält
- Sobolev-Skalarprodukt

$$(u,v)_S = (u,v)_{d\lambda_0} + (u',v')_{d\lambda_1} + \cdots + (u^{(s)},v^{(s)})_{d\lambda_s}$$

- Unterschiedliche Maße $d\lambda_\sigma$ möglich
- Klassische Drei-Term-Rekursionsrelation gilt nicht für Sobolev-Orthogonalpolynome
- Finde erweiterte Rekursionsrelation zur Konstruktion von Sobolev-Orthogonalpolynomen