Angewandte Mathematik: Elementare Numerik
Vorläufige Version

Dimitri Ovrutskiy

27. Juli 2011

Inhaltsverzeichnis

1 Vorwort

Bei der Gestaltung meiner Vorlesung (und beim Verfassen des Skriptes) habe ich mich an die von Hr. Prof. Dr. H. Salzmann an der HTW des Saarlandes gehaltenen Vorlesungen 'Mathematik 3 PI/B' (s. Vorlesungsmitschrift von Kim Meiser) und 'Praktische Mathematik PI/B', die von Hr. Prof. Dr. S. Rjasanow an der Universität des Saarlandes gehaltenen Vorlesung 'Praktische Mathematik' sowie 'Porogrammieren für Mathematiker' von Ralf Kirsch (Universität des Saarlandes) orientiert. Außerdem wurde das Script 'Numerische Methoden' von W. Kley benutzt.

"Numerik ist ein Teilgebiet der Angewandten Mathematik und beschäftigt sich damit, möglichst genaue und schnelle Algorithmen zur Lösung mathematischer Probleme zu konstruieren.

Im Grunde schließt die Numerik die Lücke zwischen der realen Welt und der perfekten Welt mathematischer Objekte. So kann man irrationale Zahlen nicht mit der begrenzten Ziffernanzahl von Maschinenzahlen darstellen, wir arbeiten also schon zu Beginn einer Rechnung meist nur mit Näherungen der Werte, mit denen wir eigentlich rechnen wollen. Die Numerik leistet nun zwei wesentliche Beiträge zum Lösen dieser alltäglichen Probleme mit unserer unvollkommenen Zahlenwelt, der Maschinenzahlen. Erstens liefert sie ein Instrumentarium zur Beobachtung und Analyse von Fehlern während einer Rechnung, und zweitens untersucht sie mit Hilfe dieser Fehleranalyse die unterschiedlichen Lösungswege mathematischer Probleme auf Vor- und Nachteile im Umgang mit Maschinenzahlen."

"Offensichtlich" ist das gefährlichste Wort in der Mathematik.[1]

[1] Eric Temple Bell, Mathematiker, 1883-1960

2 Computerzahlen und ungenaue Berechnungen

Analyse numerischer Rechnungen:
- Welche möglichen Fehler?
- Einflüss auf Endergebnis?

2.1 Fehler-Beispiele aus der Praxis

- Ariane 5

  Explosion im Juni 1996 aufgrund Softwarefehlers:

  64 bit Floating Point ⇒ 16 bit Integer ⇒ Zahl größer als 32767

- Patriot Missile Failure

  Golfkrieg, Februar 1991, Zeitberechnung in 24 bit Register:

  0.32 sec falsch ⇒ 1 km daneben ⇒ 28 Tote, 100 Verletzte

- Mars Lander Mariner 1

  Fortran Loop: DO 5 K=1.3 anstatt DO 5 K=1,3

  Der Rechner initialisiert Variable namens DO5K mit 1.3

  Problem: Blanks, keine Deklaration notwendig, kein END DO

- ROSAT

  Röntgen Satellit (MPE Garching) 1997

  Rundungsfehler "unfortunate combinatio" ⇒ Pointing ungenau

2.2 Arten der Fehler

Wir werden drei Arten der Fehler unterscheiden:

1. Fehler in Anfangsdaten, *initial data error*
   - idealisierte Annahmen (Vereinfachungen)
   - ungenaue Messdaten
   - Kopierfehler (von Zahlen), Übertragungsfehler
   - genäherte Darstellung von Konstanten (wie π oder e)

2. Abschneidefehler, *truncation error*
   - charakteristisch fur benutzte Methode (Algorithmus): liegt in der Hand des Realisateurs/Programmierers
   - z.B. bei approximativen mathematischen Techniken, Diskrete Modellierung
   Bspl.: MacLaurin Folge $e^x = 1 + x + x^2/2 + ... + x^n/n! + ...$
   Berechnung einer Zahl, die e^β approximiert:
   $e^\beta = 1 + \beta + \beta^2/2 + ... + \beta^k/k! + E$, wobei E der Abschneidefehler ist.
   Uhrsache: endliche Zahl der Iterationenen/Termen

3. Rundungsfehler, *round-off or rounding error*
   Endliche Stellenzahl bei numerischen Rechnungen
   D.h. Zahlen und Ergebnisse können nicht exakt dargestellt werden

Bemerkungen:

a) 2. existiert sogar auf Computer mit unendlicher Genauigkeit

b) 3. betrifft alle Rechenschritte

c) *ill-conditioned*: beliebig kleiner Fehler in Anfangsdaten $\rightarrow$ großer Fehler in Ergebnissen

d) Fehlerbeschreibung:
sei $\tilde{x}$ die berechnete Lösung zu 'wahrem' Wert x, dann ist
$x - \tilde{x}$ der absoluter Fehler
$(x - \tilde{x})/x$ der relativer Fehler

e) *Errorbound*: max. moglicher Fehler
Wichtig bei vielen numerischen Methoden. Berechneter Fehler typischerweise kleiner als berechneter *Errorbound*.

2.3 Fließpunkt-*Floating-Point*-Darstellung

Jedes x wird durch $\bar{x}$ dargestellt mit **Vorzeichen, Mantisse, Exponent**:
Normalisierte Darstellung:

$$\bar{a} = \underbrace{\pm(0.a_1a_2...a_m)}_{a} \times b^c$$

mit $|a| < 1 = b^0$, $0 \leq a_i \leq b-1$ und $a_1 \neq 0$, falls $\bar{x} \neq 0$.
Zum Besipiel $153.12 \equiv 0.15312 \times 10^3$.
b bezeichnet die **Basis** der Darstellung:

- binär: $b = 2$, zwei 'digits'
- dezimal: $b = 10$, zehn 'digits'
- hexadezimal: $b = 16$, sechzen 'digits'
- es gibt auch weitere Basen, die oft verwendet werden, wie $b = 12$, $b = 60$, $b = 8$, $b = 9$, $b = 5$, ...

Das hexadezimale System ist eine natürliche Erweiterung des Binärsystems.

Fehler bei arithmetischen Operationen

Sei $\bar{x}$ eine Approximation an x, der Fehler ist $e(x) = x - \bar{x}$. Addition:

$$x + y = \bar{x} + e(x) + \bar{y} + e(y) = \bar{x} + \bar{y} + (e(x) + e(y))$$

Scheinbar ist der Gesamtfehler die Summe der Einzelfehler. I.A. ist es aber so, daß $\bar{x}+\bar{y}$ nicht exakt darstellbar ist. Damit ergibt sich ein hoherer Gesamtfehler:

$$e(x) + e(y) + \bar{x} + \bar{y} - \overline{\bar{x} + \bar{y}}$$

- Addition kann zu *overflow* führen
- Addition ist i.A. nicht assoziativ - Addition ist i.A. nicht kommutativ: bei mehreren Summanden sollen die kleinere zuerst addiert werden. Substraktion, Multiplikation und Division verhalten sich analog.

Beispiele: $\sum \frac{1}{k}$, $1230+4+4$ in der Dreinachkommastellenarithmetik, $(1+1/n)^n$, $(\sqrt[n]{2})^n$

3 Interpolation und Approximation

Wer kenn das nicht: nach einem Tag in Labor stapeln sich die Messdaten, man will diese verarbeiten und endlich die Theorie entkräften oder doch unterstützen... Es ist nur so, daß die Theorien operiren mit continuierlichen Daten, und die Ergebnisse der Messungen sind diskret; schlimmer, es gibt immer endlich viel davon, egal, wie oft das Versuch wiederholt wird!

Das bedeutet, wir brauchen ein Werkzeug, um endliche diskrete Daten kontinuierlich zu erweitern, und zwar so, daß der Abweichungsfehler von der "Originalfunktion", die wir nicht kennen, kontrolierbar klein wird, zumindest an einem gewissen vorgegebenen Intervall.

Diese Aufgabe zu lösen heißt "die Messdaten zu interpolieren".

Ein anderes Problem ist mit Interpolation eng verwandt. Der größte Teil der Gleichungen, die man lösen muss, um physikalische und industrielle Aufgaben zu bewältigen, und die nachweislich lösbar sind, besitzen keine symbolische Lösung. D.h. die (existierende!) Lösung läßt sich nicht in der Form $y = f(x)$ schreiben. Die numerische Methoden zur Lösung dieser Gleichungen (die wir im Rahmen dieses Kurses nicht angehen werden, aber später, z.B. in der "Numerik und Statistik") lassen aber die Funktionswert an jeder vernünftigen Stelle berechnen, und somit eine Datentabelle beliebeiger Dimension zu erstellen.

Manche Funktionen lassen sich zwar mit einer Formel aufschreiben, die Berechnung der Werte und die Behandlung der Funktion bei durchführung 'normaler' mathemathischen Operationen wie Integration oder Differentiation ist aber ziemlich mühesam. Oft braucht man aber nicht die exakte Formel, sondern die Möglichkeit, Funktionenwerte schnell mit einer vorgegebenen Genauigkeit zu berechenen. Hier kann man die originale Funktion durch eine andere ersetzen, die sich von der Ausgangsfunktion auf dem Intervall der Interesse wenig (und kontrollierbar!) abweicht und viel einfacher zu behandeln ist, d.h., z.B., deren Stammfunktion und alle Ableitungen sind längst bekannt und leicht auszuwerten sind.

Diese zweite Aufgabe heißt "Approximation". Beherrscht man die Interpolationsverfahren, so hat man auch alles, um Approximation durchzuführen: man erstelle eine Datentabelle für die bekannte Funktion, und weiter interpoliere die Daten.

3.1 Interpolationsaufgabe

Motivation: Mögliche Fragestellung
$f : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$ sei vorgegeben. $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ seien vorgegebene Punkte. Sei $y_k = f(x_k)$, $k = 0, \ldots, n$. Suche ein Polynom $P : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $P(x_k) = y_k$ für $k = 0, \ldots, n$.

(IP) Interpolationsaufgabe:

Gegeben seien die sog. *Stützstellen* $x_0, x_1, \ldots, x_n$ und die *Stützwerte* $y_0, y_1, \ldots, y_n$ mit der Eigenschaft $x_i \neq x_k$ für $i \neq k$ (paarweise verschieden).
Suche ein Polynom $P : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $P(x_k) = y_k$ für $k = 0, \ldots, n$.[a]

Also unsere leicht zu behandelnde Funktion, die an den Messstellen die vorgegebene Werte annimmt, soll womöglich ein Polynom sein.

Gibt es so ein Polynom?

Wenn ja, unter welcher Bedingungen?

Wie groß ist die Unterschied zwischen der unbekannten Origignalfunktion und dem interpolerenden Polynom, wenn es existiert?

Alle diese Fragen beantworten wir in dem nächsten Kapitel.

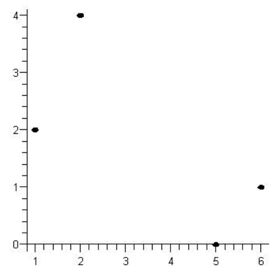

Abbildung 1: Interpolationsaufgabe (IP)

[a]D.h. man sucht ein Polynom, das die Punkte (x_n, y_n) miteinander verbindet.

3.2 Existenz und Eindeutigkeit der Lösung von der Interpolationsaufgabe

Satz 3.1 *Es gibt genau ein Polynom vom Höchstgrad n, welches (IP) löst.*

Beweis: 3.1

Sei $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_nx^n$ *ein solches Polynom.*
Für p muss gelten: $p(x_k) = y_k$ *für* $k = 0, \ldots, n$.

$$\begin{matrix} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \ldots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \ldots + a_nx_1^n = y_1 \\ \vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \ldots + a_nx_n^n = y_n \end{matrix} \Leftrightarrow \left(\overbrace{\begin{matrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ & & \vdots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{matrix}}^{\mathbf{A}} \right) \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Ein quadratisches Gleichungssystem hat genau einen Lösungsvektor, wenn $det(\mathbf{A}) \neq 0$. $\mathbf{A}$ *ist eine Vandermonde-Matrix. Im Fall* $n = 2$ *führt die Laplace'sche Determinantenentwicklung auf*

$$det(\mathbf{A}) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1^2 - x_0x_1 \\ 1 & x_2 - x_0 & x_2^2 - -x_0x_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) \\ 1 & x_2 - x_0 & x_2(x_2 - x_0) \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) \\ x_2 - x_0 & x_2(x_2 - x_0) \end{vmatrix} = (x_2 - x_0)(x_1 - x_0) \begin{vmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{vmatrix} = (x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)$$

(Aus einer 3x3 Vandermonde-Matrix wurde 2x2 Vandermonde-Matrix.)
Bei Übertragung dieser Methode auf eine allgemeine Vandermonde-Determinante erhält man

$$det \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ & & \vdots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{pmatrix} = \prod_{\substack{k=1 \\ k>i}}^{n} (x_n - x_i) \neq 0 \qquad \Bigg| \neq 0 \text{ wegen } x_i \neq x_k \text{ für } i \neq k,$$

q.e.d.

3.3 Interpolation nach Lagrange

Da die Interpolationsaufgabe fordert, daß das Interpolationspolinom an den Stützstellen genau die Stützwerte besitzt, fuhr Joseph-Louis Lagrange (1736-1813) im Jahr 1783 spezielle Polynome ein. Diese sind so gebaut, daß jedes Lagrange-Polynom $L_k(x), k = 0, \ldots, n$ nur an einer einzigen Stützstelle x_k den Wert 1 annehmen, und an allen anderen Stßstellen 0 werden:

$$L_k(x_i) = 1 \; f\ddot{u}r \; i = k$$

$$L_k(x_i) = 0 \; f\ddot{u}r \; i \neq k.$$

Man muß sagen, die Methode, die wir Lagrange-Methode nennen und in diesem Kapitel besprechen, wurde eigentlich von Waring schon 16 Jahren vor Lagrange angeboten und publiziert (E. Waring,"Problems Concerning Interpolations", Philosophical Transactions of the Royal Society of London, vol. 69, 1779, pp. 59-67.)
Die $L_k(x)$ sind nach Satz (3.1) Polynome vom Höchstgrad n. Mit diesen Polynomen ist

$$p(x) = y_0 \cdot L_0(x) + y_1 \cdot L_1(x) + \ldots + y_n \cdot L_n(x)$$

Es ist $p(x_k) = y_k$.
Die Polynome

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{x_k - x_i}$$

haben die gewünschte Eigenschaft.
Beispiel:

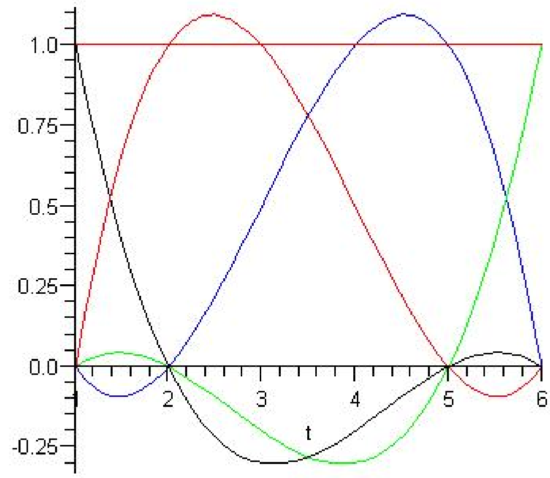

Abbildung 2: Lagrange-Polynome $L_0(x)$ - $L_3(x)$

$x_0 = 1, x_1 = 2, x_2 = 5, x_3 = 6$
$y_0 = 2, y_1 = 4, y_2 = 0, y_3 = 1$

$$L_0(x) = \frac{(x-2)(x-5)(x-6)}{(1-2)(1-5)(1-6)} = -\frac{1}{20}(x-2)(x^2-11x+30) = -\frac{1}{20}(x^3-13x^2+52x-60)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-5)(x-6)}{(2-1)(2-5)(2-6)} = \frac{1}{12}(x-1)(x^2-11x+30) = \frac{1}{12}(x^3-12x^2+41x-30)$$

$$L_2(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-6)}{(5-1)(5-2)(5-6)} = -\frac{1}{12}(x-1)(x^2-8x+12) = -\frac{1}{12}(x^3-9x^2+20x-12)$$

$$L_3(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-5)}{(6-1)(6-2)(6-5)} = \frac{1}{20}(x-1)(x^2-7x+10) = \frac{1}{20}(x^3-8x^2+17x-10)$$

$$\Rightarrow p(x) = -\frac{1}{20}(x^3-13x^2+52x-60) - \frac{1}{3}(x^3-12x^2+41x-30) - \frac{1}{20}(x^3-8x^2+17x-10)$$

$$\Leftrightarrow p(x) = \frac{17}{60}x^3 - \frac{31}{10}x^2 + \frac{559}{60}x - \frac{9}{2}$$

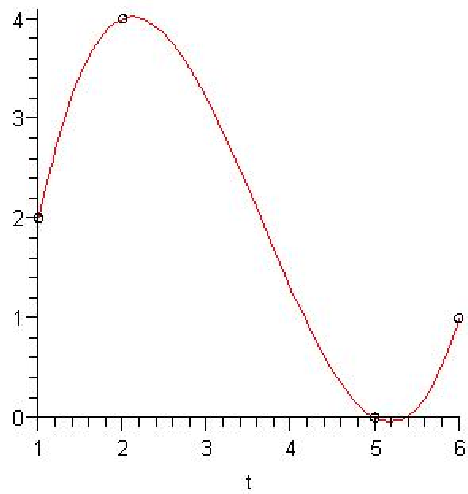

Abbildung 3: Lagrange-Interpolationspolynom $p(x)$

3.4 Fehlerabschätzung bei Interpolation

Der Satz 3.1 garantiert, daß, unabhangig davon, wie wir das Interpolationspolynom berechnet haben, es eindeutig bestimmt ist.

Das heißt unter anderem, das die Fehlerabschatzung von der Gewinnungsmethode völlig unabhängig ist.

Wir werden die Lagrange-Mathode benutzen, um die Abweichung des berechneten Interpolationspolynoms von der (in der Regel unbekannten!) Originalfunktion suf dem vorgegebenem Intervall abzuschätzen.

Motivation: Es geht bei der Fehlerabschätzung darum, eine Näherungs-Formel für den Fehler zu entwickeln, den man mit der Interpolation ($\rightarrow$ Annäherung der Funktion mittels Polynom) macht. $R(x)$ ist dabei die gesuchte Fehlerfunktion, die für jeden x-Wert die Differenz zwischen Näherung und tatsächlichem Wert angibt. Will man den maximalen Fehler abschätzen, muss man praktisch eine Extremwertaufgabe lösen.

Beispielaufgabe:
Stützstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n$ mit $x_i \neq x_k$ für i$\neq$k
Stützwerte $y_0, y_1, \ldots, y_n$

Lösung nach Lagrange:
Für $p(x) = \sum\limits_{k=0}^{n} y_n \cdot L_k(x)$ mit $L_k(x) = \prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$
gilt: $p(x_k) = y_k \qquad (k = 0, \ldots, n)$
Mit $\omega(x) = \prod\limits_{k=0}^{n} (x - x_k)$ lässt sich $L_j(x)$ darstellen als

$$L_j(x) = \begin{cases} \frac{\omega(x)}{(x-x_j)\cdot\omega(x_j)} & \text{für } x \neq x_j \\ 1 & \text{für } x = x_j \end{cases}$$

Satz 3.2 *Gegeben sind die n+1-mal in $[a, b]$ stetig differenzierbare Funktion f und die Stützstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$.*
Es sei $y_k = f(x_k)$ $(k = 0, \ldots, n)$.
p sei das eindeutig bestimmte Interpolationspolynom vom Höchstgrad n mit $p(x_k) = y_k$ $(k = 0, \ldots, n)$.
Ist $R(x) = f(x) - p(x)$ und $\omega(x) = \prod\limits_{k=0}^{n} (x - x_k)$, so gilt:

Zu jedem $x \in [a, b]$ gibt es ein $c \in [a, b]$ mit

$$|R(x)| = |f(x) - p(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(c) \cdot \omega(x)$$

Beweis: 3.2

Sei $x \in [a, b]$ fest, $t \in \mathbb{R}$ variabel. Betrachte Hilfsfunktion

$$h(t) := f(t) - p(t) - \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot \omega(t) \qquad (t \neq x)$$

$h(t)$ ist $n+1$ - mal differenzierbar; es ist $(x_k) = 0$; $h(x) = 0$.

h hat $n+2$ paarweise verschiedene Nullstellen.
h' hat $n+1$ paarweise verschiedene Nullstellen.
h'' hat n paarweise verschiedene Nullstellen.
$\vdots$
$h^{(n+1)}$ hat eine einzige Nullstelle c in $[a, b]$.

$$0 = h^{(n+1)}(c) = f^{(n+1)}(c) - 0 - \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot (n+1)!$$

$$f^{(n+1)}(c) = \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot (n+1)!$$

$$R(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} \cdot \omega(x)$$

Mit $\sup\limits_{x \in [a,b]} |f^{(n+1)}(x)| =: M_{n+1}$ erhält man

$$R(x) = |f(x) - p(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \cdot |(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)|$$

3.5 Interpolation nach Newton

Andere Methode zur Berechnnung des Interpolationspolynoms (eindeutig bestimmt!) hat Sir Isaac Newton 1675 erfunden. Er schrieb darüber in den Briefen an Smith (1675) und an Oldenburg (1676), publizirte sein Algorithmus in dem Buch *Methodus Differentialis* aber erst 1711.

Im gegensatz zu Lagrange 100 Jahre später, fuhr Newton keine speziell zu berechnende Polynome ein. Dafür definierte er ein matimatischer Objekt, das wir *dividierte Differenzen* nennen.
Sie die Interpolationsaufgabe gestellt wie folgt:
Stützstellen: $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ($x_i \neq x_k$ für $i \neq k$)
Stützwerte: $y_0, y_1, \ldots, y_n$

Zum Auffinden des Interpolationspolynoms wird der Ansatz

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}),$$

der oft auch "Entwicklung nach Newton'sche Polynombasis" genannt wird, verwendet.

Es sind also die Koeffizienten $a_0, \ldots, a_n$ zu berechnen so, daß dieser Ansatz das Interpolationspolynom liefert.

Um $a_0, a_1, \ldots, a_n$ zu bestimmen, ist das Gleichungssytem

$$p(x_k) = y_k \qquad (k = 0, \ldots, n)$$

zu lösen.

$$\begin{aligned}
p(x_0) =& y_0\\
p(x_1) =& y_1 = a_0 + a_1(x_1 - x_0)\\
p(x_2) =& y_2 = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)\\
&\vdots\\
p(x_n) =& y_n = a_0 + a_1(x_n - x_0) + a_2(x_n - x_0)(x_n - x_1) + \ldots + a_n(x_n - x_0) \cdot \ldots \cdot (x_n - x_{n-1})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_0 =& y_0\\
y_1 =& a_0 + a_1(x_1 - x_0) \Rightarrow \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = a_1;\\
\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} =&: \underbrace{[x_1, x_0]}_{\text{dividierte Differenz}}\\
y_2 =& a_0 + a_1(x_1 - x_0) + a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)\\
=& y_0 + [x_1, x_0](x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)\\
a_2 =& \big(y_2 - y_0 - [x_1, x_0](x_2 - x_0)\big) \cdot \frac{1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}\\
=& \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot \left(\frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_1} + \frac{y_1 - y_0}{x_2 - x_1} - [x_1, x_0] \cdot \frac{x_2 - x_0}{x_2 - x_1}\right)\\
=& \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot \left([x_2, x_1] + [x_1, x_0] \cdot \left(\overbrace{-\frac{x_2 - x_0}{x_2 - x_1} + \frac{x_1 - x_0}{x_2 - x_1}}^{-1}\right)\right)\\
=& \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot ([x_2, x_1] - [x_1, x_0]) := [x_2, x_1, x_0]
\end{aligned}$$

Wir definieren die **dividierten Differenzen** durch

$$[x_1, x_0] := \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

bzw.

Definition 3.1

$$[x_{k+1}, x_k] := \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}$$

oder induktiv:

$$[x_m, x_{m-1}, \ldots, x_0] := \frac{[x_m, x_{m-1}, \ldots, x_1] - [x_{m-1}, x_{m-2}, \ldots, x_0]}{x_m - x_0}$$

bzw.

$$[x_m, \ldots, x_k] := \frac{[x_m, x_{m-1}, \ldots, x_{k+1}] - [x_{m-1}, \ldots, x_k]}{x_m - x_k}$$

Mit diesen dividierten Differenzen hat das Newtonsche Interpolationspolynom die Darstellung

$$\begin{aligned} p(x) = & y_0 \\ & + [x_1, x_0] \cdot (x - x_0) \\ & + [x_2, x_1, x_0] \cdot (x - x_0)(x - x_1) \\ & + \vdots \\ & + [x_n, x_{n-1}, \ldots, x_0](x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$

Schema zur Berechnung der dividierten Differenzen:

x	y				
x_0	$y_0 = a_0$				
		$[x_1, x_0] = a_1$			
x_1	y_1		$[x_2, x_1, x_0] = \frac{[x_2,x_1]-[x_1,x_0]}{x_2-x_0} = a_2$		
		$[x_2, x_1]$			
x_2	y_2		$\vdots$	$\ddots$	
		$[x_3, x_2]$			$[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_0] = a_n$
	$\vdots$	$\vdots$	$\ldots$		
		$[x_n, x_{n-1}]$			
x_n	y_n				

Konkretes Beispiel mit den Punkten $(1, 2)$, $(2, 4)$, $(5, 0)$, $(6, 1)$:

x	y			
1	2			
		2		
2	4		$-\frac{5}{6}$	
		$-\frac{4}{3}$		$-\frac{17}{60}$
5	0		$-\frac{7}{12}$	
		1		
6	1			

$$a_0 = 2, a_1 = 2, a_2 = -\tfrac{5}{6}, a_3 = -\tfrac{17}{60}.$$

$$\begin{aligned} p(x) = & \, 2 \\ & + 2(x - 1) \\ & - \frac{5}{6}(x - 1)(x - 2) \\ & - \frac{17}{60}(x - 1)(x - 2)(x - 5) \end{aligned}$$

Die Stützstellen müssen nicht in natürlicher Reihenfolge aufgeführt sein. **Bei Hinzunahme einer weiteren Stützstelle kann das bereits berechnete Schema weiterverwendet werden.**

Nehmen wir zur Verdeutlichung den Punkt $(4, 2)$ zum Beispiel hinzu:

x	y				
1	2				
		2			
2	4		$-\frac{5}{6}$		
		$-\frac{4}{3}$		$-\frac{17}{60}$	
5	0		$-\frac{7}{12}$		?
		1		?	
6	1		?		
		?			
4	2				

$$a_0 = 2,\ a_1 = 2,\ a_2 = -\tfrac{5}{6},\ a_3 = -\tfrac{17}{60},\ a_4 = ?.$$

$$\begin{aligned} p(x) = & \, 2 \\ & + 2(x - 1) \\ & - \frac{5}{6}(x - 1)(x - 2) \\ & - \frac{17}{60}(x - 1)(x - 2)(x - 5) \\ & + \frac{?}{?}(x - 1)(x - 2)(x - 5)(x - 6) \end{aligned}$$

Schema und Polynom bleiben erhalten und werden jeweils nur ergänzt.

Angenommen, man sucht jetzt das Interpolationspolynom durch die Punkte (1,2), (2,4), (5,0), (6,2); es heiße q(x). p(x) durch (1,2), (2,4), (5,0), (6,1) ist bekannt. Für $r(x) = p(x) - q(x)$ gilt

$$\begin{aligned}
r(1) =& r(2) = r(5) = 0; \\
r(6) =& p(6) - q(6) = -1 \\
r(x) =& A \cdot (x-1)(x-2)(x-5) \\
r(6) =& A \cdot 5 \cdot 4 \cdot 1 = -1 \\
A =& -\frac{1}{20} \\
q(x) =& p(x) - r(x)
\end{aligned}$$

r nach Newton:

x	y			
1	0			
		0		
2	0		0	
		0		$-\frac{1}{20}$
5	0		$-\frac{1}{4}$	
		-1		
6	-1			

vgl. mit $r(x) = A(x-1)(x-2)(x-5)$

3.6 Aitken-Neville Algorithmus

Stützstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$
Stützwerte $y_0, y_1, \ldots, y_n, y_{n+1}$
Sei p_1 das Interpolationspolynom für $x_0, x_1, \ldots, x_n$.
Sei p_2 das Interpolationspolynom für $x_1, x_2, \ldots, x_{n+1}$.
Dann ist

$$\begin{aligned} q(x) =& \frac{1}{x_{n+1} - x_n} \cdot \begin{vmatrix} p_1(x) & x_0 - x \\ p_2(x) & x_{n+1} - x \end{vmatrix} \\ =& \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot \big((x_{n+1} - x) \cdot p_1(x) - (x_0 - x) \cdot p_2(x) \big) \end{aligned} \tag{1}$$

das Interpolationspolynom für $x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}$.
q ist ein Polynom vom Grad $n+1$.
Für $1 \leq k \leq n$ ist

$$q(x_k) = \frac{1}{x_{k+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} y_k & x_0 - x_k \\ y_k & x_{n+1} - x_k \end{vmatrix} = \frac{y_k}{x_{n+1} - x_0} \cdot (x_{n+1} - x_k - (x_0 - x_k)) = y_k$$

$$q(x_0) = \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} y_0 & 0 \\ p_2(x_0) & x_{n+1} - x_0 \end{vmatrix} = y_0$$

ebenso $q(x_{n+1}) = y_{n+1}$.

Sei $p_{k,k-1,\ldots,m}$ das Interpolationspolynom für die Punkte $x_k, x_{k-1}, \ldots, x_m$. Nach der Formel 1 lässt sich das folgende Schema von Interpolationspolynomen berechnen:

x_0	y_0					
		p_{01}				
x_1	y_1		p_{012}			
		p_{02}		p_{0123}		
x_2	y_2		p_{123}		$\ddots$	
			$\vdots$			$p_{0\ldots n}$
	$\vdots$	$\vdots$	$\ldots$			
		p_{n-1n}				
x_n	y_n					

Satz 3.3 *Das Interpolationspolynom durch die Punkte $x_0, x_1, \ldots, x_n$ hat die Gestalt*

$$\begin{aligned} p_n(x) =& y_0 + [x_1, x_0](x - x_0) + \ldots + [x_n, \ldots, x_0] \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_n) \\ =& y_0 + \sum_{k=1}^{n} [x_k, x_{k-1}, \ldots, x_0] \cdot \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j) \end{aligned} \tag{2}$$

Beweis: 3.3

Induktionsanfang: n=1: $p_1(x) = y_0 + \frac{y_1-y_0}{x_1-x_0} \cdot (x - x_0)$
$n \to n+1$*: Das Interpolationspolynom durch* $x_0, x_1, \dots, x_n$ *sei durch (2) gegeben. Das Interpolationspolynom durch* $x_1, \dots, x_{n+1}$ *lautet*

$$\tilde{p}_n = y_1 + \sum_{k=1}^{n} (x_{k+1}, \dots, x_1) \cdot \prod_{j=1}^{k} (x - x_j)$$

Nach Aitken-Neville ist das Interpolationspolynom zu den Punkten $x_0, x_1, \dots, x_{n+1}$:

$$\begin{aligned} p_{n+1}(x) = & \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} p_n(x) & x_0 - x \\ \tilde{p}_n(x) & x_{n-1} - x \end{vmatrix} \\ = & \frac{1}{x_{n-1} - x_0} \cdot \big(p_n(x)(x_{n+1} - x) - \tilde{p}_n(x)(x_0 - x) \big) \end{aligned}$$

und hat den Grad n+1.
Sein höchster Koeffizient ist $\frac{-(x_n,\dots,x_0)+(x_{n+1},\dots,x_1)}{(x_{n+1}-x_0)}$.
Oder:
Das ist der Höchstkoeffizient des Newtonpolynoms durch $x_0, \dots, x_{n+1}$.

3.7 Interpolation mit Splines

Stützstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n$ $(x_0 < x_1 < \ldots < x_n)$
Stützwerte $y_0, y_1, \ldots, y_n$
Die quadratische Interpolation, die mit Polynomen 2. Grades arbeitet, wird nicht weiter betrachtet. Wir beschränken uns auf die kubische Spline-Interpolation, die mit Polynomen 3. Grades arbeitet.

Suche eine abschnittsweise definierte Funktion $S : [x_0, x_n] \to \mathbb{R}$,

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) & \text{falls } x \in [x_0, x_1], \\ S_1(x) & \text{falls } x \in [x_1, x_2], \\ & \vdots \\ S_{n-1}(x) & \text{falls } x \in [x_{n-1}, x_n]. \end{cases}$$

Dabei sind $S_i(x), (i = 0, \ldots, n-1)$ Polynome 3. Grades.

Es soll gelten:

A: S verläuft durch die Stützstellen und Stützwerte:

$$S(x_i) = y_i \text{ für } i = 0, 1, \ldots, n$$

B: Die linksseitige Steigung stimmt mit der rechtsseitigen überein:

$$\lim_{x \to x_i+} S'(x_i) = \lim_{x \to x_i-} S'(x_i) \text{ für } i = 0, 1, \ldots, n-1$$

C: Die linksseitige Krümmung stimmt mit der rechtsseitigen überein:

$$\lim_{x \to x_i+} S''(x_i) = \lim_{x \to x_i-} S''(x_i) \text{ für } i = 0, 1, \ldots, n-1$$

Wir wählen für S_i den Ansatz

$$S_i(x) = y_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \textbf{ für } i = 0, 1, \ldots, n-1$$

Forderungen:[2]

$$\begin{aligned} S_i(x_{i+1}) &= y_{i+1} && \text{für} && i = 0, \ldots, n-1 && \text{(A)} \\ S_i'(x_{i+1}) &= S_{i+1}'(x_{i+1}) && \text{für} && i = 0, \ldots, n-2 && \text{(B)} \\ S_i''(x_{i+1}) &= S_{i+1}''(x_{i+1}) && \text{für} && i = 0, \ldots, n-2 && \text{(C)} \end{aligned}$$

Aus (A), (B), (C) ergeben sich 3n-2 Forderungen für die 3n zu bestimmenden Koeffizienten b_i, c_i und d_i $(i = 0, \ldots, n-1)$.
Fordert man nun zusätzlich

$$S_0''(x_0) = 0 \text{ und } S_{n-1}''(x_n) = 0 \qquad \text{(D1)}$$

[2] Genau genommen müssten hier die Grenzwerte betrachtet werden.

so ist die eindeutig bestimmte Lösung ein *natürlicher* kubischer Spline.
Fordert man stattdessen

$$y_0 = y_n \text{ und } S'(x_0) = S'_{n-1}(x_n) \tag{D2}$$

so ist die eindeutig bestimmte Lösung ein *periodischer* kubischer Spline.

Für die Koeffizienten bedeuten diese Forderungen
mit $x_{i+1} - x_i =: h_i$ (i=0,...,n-1):[3]

$$y_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 = y_{i+1} \text{ für } (i = 0, \ldots, n-1)$$

$$\text{od. } y_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_{i+1} \tag{A}$$

$$b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1} \text{ für } (i = 0, \ldots, n-2) \tag{B}$$

$$2c_i + 6d_i h_i = 2c_{i+1} \text{ für } (i = 0, \ldots, n-2) \tag{C}$$

Zusatzforderung für natürliche Splines:

$$c_0 = 0, \qquad 2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1} = 0 \tag{D1}$$

$$(d_{n-1} = \frac{c_{n+1}}{3h_{n-1}} \text{ setzt man } c_n \text{ künstlich auf 0.)}$$

Aus (C) erhält man $d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i} \qquad (i = 0, \ldots, n-2)$
Mit $c_n := 0$ ist $d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}$ (für i=0,...,n-1). Dies ergibt n Gleichungen.
Setzt man das in (A) ein, lässt sich jede Gleichung von (A) nach b_i auflösen:

$$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{2c_i + c_{i+1}}{3} h_i \qquad (i = 0, \ldots, n-1,\ c_0 = 0 \text{ berücksichtigt})$$

Eingesetzt in (B) erhält man

$$h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_i c_{i+1} = 3\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}\right) \text{ (für } i = 1, \ldots, n-1)$$

Es kommen in dieser Gleichung nur c_{i-1}, c_i, c_{i+1} vor.
Die Gleichung kann als *Triagonalmatrix* angegeben werden:

$$\begin{pmatrix} \diamond & \diamond & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \diamond & \diamond & \diamond & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \diamond & \diamond & \diamond & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \diamond & \diamond & \diamond \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \diamond & \diamond \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = \begin{pmatrix} \\ \vdots \\ \\ \end{pmatrix}$$

[3] Notiz: Ableitungen von S_i :
$S'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2$
$S''_i(x) = 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1}$

3.8 Aufgaben

Aufgabe 1

Approximieren Sie $\cos(x)$ *auf* $[-\pi/2, \pi/2]$ *an drei Stützstellen und schätzen Sie den Fehler ab.*
Skizzieren Sie mittels Matlab das Interpolationspolynom und die Cos-Funktion in ein Koordinatensystem.

Aufgabe 2

Bestimmen Sie das Interpolationspolynom durch die vier Punkte $(0, 1)$, $(1, 2)$, $(3, 3)$, $(4, 2)$ *mit verschiedenen Methoden (Gleichungssystem mit Van der Monde-Matrix, Lagrange, Newton).*

Aufgabe 3

Vervollständigen Sie das folgende Differenzenschema für ein Newtonisches Interpolationspolynom:

x	y			
*	-2			
		2		
0	0		-1	
		0		*
1	*		2	
		*		
2	4			

Ergänzen Sie das Schema und geben Sie das Newtonsche Interpolationspolynom an.

Aufgabe 4

Bestimmen Sie die Zahlen α *und* β *derart, daß die Funktion*

$$S : [0, 2] \to \mathbb{R}, \qquad S(x) = \begin{cases} \frac{1}{4}(-x^3 + \alpha x + 4)) & \text{für} \quad 0 \leq x \leq 1 \\ \frac{1}{4}(x^3 + \beta x^2 + 7x + 2)) & \text{für} \quad 1 < x \leq 2 \end{cases}$$

ein natürlicher kubischer Spline ist.

Aufgabe 5

Zur Interpolation einer Funktion $f : [0, 2] \to \mathbb{R}$ *werde eine äquidistante Zerlegung des Intervalls verwendet, d.h. bei gegebenem* $0 < N \in \mathbb{N}$ *wählt man* $x_k := (2k)/N$ *für* $k = 0, ..., N$. *Zeigen Sie, daß in diesem Fall die in der Vorlesung eingeführte Funktion* $\omega(x) := \prod_{k=0}^{N}(x - x_k)$ *die folgende Abschätzung erfüllt:*

$$|\omega(x)| \leq (N + 1)! \left(\frac{2}{N}\right)^{N+1} \qquad \forall x \in [0, 2].$$

Aufgabe 6

Die Funktion $f : [-1, 1] \to \mathbb{R}$

$$f(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

soll auf dem Intervall $I = [-1, 1]$ *durch ein Polynom interpoliert werden. Dazu soll das Intervall* I *durch ein äquidistantes Gitter unterteilt werden, d.h. die Stützstellen der Interploation sind*

$$x_k = -1 + k\frac{2}{N}, \qquad k = 0, ..., N.$$

Wie muß man N *wählen, so daß der Interpolationsfehler auf jeden Fall kleiner als* $\epsilon = 10^{-4}$ *wird? Benutzen Sie hierbei die aus der Aufgabe 5 bekkante Abschätzung.*

Aufgabe 7

Durch eine ungenaue Übertragung der Funktionswerte f_k *hat sich in der folgenden Tabelle zur Bestimmung eines* **quadratischen** *Polynoms ein Fehler eingeschlichen.*

x_k	-2	-1	0	1	2
y_k	10	3	0	2	6

Es ist bekannt, daß **genau ein** *Funktionswert* f_k *falsch übermittelt wurde. Formulieren Sie zunächst eine allgemeine und eine speziell auf diesen Fall ausgerichtete Strategie, wie man den fehlerhaften Wert* f_k *auffinden kann. Benutzen Sie sie dann, um den fehlerhaften Wert herauszufinden und berichtigen Sie den entsprechenden Eintrag in der Tabelle.*

Aufgabe 8

Polynominterpolation der Daten

x_i	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$
$\tan(x_i)$	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1

liefert ein Näherungspolynom p *für die Tangensfunktion.*

a) *Mit welchem Fehler* $R(x) = |\tan(x) - p(x)|$ *ist an der Stelle* $x = 0.4$ *höhstens zu rechnen?*

b) *Bestimmen Sie das Interpolationspolynom* p *und berechnen Sie den wirklichen Fehler* $R(0.4) = |\tan(0.4) - p(0.4)|$ *mit dem (Taschen)rechner.*

Aufgabe 9

Gegeben sind die Daten:

a)

x_i	-1	0	1
f_i	1	-3	-3

b)

x_i	0	1	2
g_i	-3	-3	-1

c)

x_i	-1	0	1	2
h_i	1	-3	-3	-1

.

a) *Bestimmen Sie das Interpolationspolynom $p(x)$ zu f nach Lagrange und nach Newton.*

b) *Bestimmen Sie das Interpolationspolynom $q(x)$ zu g nach Newton*

c) *Berechnen Sie das Interpolationspolynom $r(x)$ zu h nach Aitken-Neville unter Verwendung der Resultate von a) und b), sowie in der Newton'schen Form, wobei Sie die schon berechneten Tabellen aus a) und b) verwenden.*

Aufgabe 10

(4 Punkte)
Während eines Experiments hat man die Werte an fünf Stellen gemessen und folgende Wertepaare ermittelt:

$$(1, 10), (2, 5), (3, 10/3), (4, 5/2), (5, 2).$$

Interpolieren Sie die Daten und geben Sie das Polynom in Normalform $p(x) = \sum_{i=0}^{4} a_i x^i$ an.
Welches Interpolationspolynom ergibt sich, wenn die 5 vorgegebene Punkte durch den weiteren Punkt $(-1, 1)$ ergänzt werden?
Lösen Sie die Aufgabe effizient und begrunden Sie Ihre Wahl des Verfahrens!

4 Hermite-Interpolation

Bis jetzt war an jeder Stelle x_i genau eine Wert $y_i = f(x_i)$ gegeben. Nun lassen wir aber mehrfachen Knoten zu, d.h., die Vielfachheit von x_i bedeutet $H_n^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i),\ j = 0, ..., k_i - 1$, wobei H_n das Hermite-Interpolationspolynom ist und $g^{(k)}(z)$ die $k-$te Ableitung der Funktion g an der Stelle z bezeichnet.
Wenn m paarweise verschiedene Knoten mit Vielfachheiten $k_1, ..., k_m$ gegeben sind, dann gibt $n = k_1 + k_2 + ... + k_{m-1}$ die Ordnung von H_n-
Sei $a \leq x_0 \leq x_1 \leq ... \leq x_n \leq b$.

Satz 4.1 *H_n ist eindeutig.*

Beweis: 4.1

Falls P, Q die verallgemeinerte Interpolationsaufgabe lösen, so ist $P - Q$ ein Polynom vom Grad$\leq$ n und wegen $(P - Q)^{(j)}(x_i) = 0$, $j = 0, 1, ..., k_{i-1}$ mit $n + 1 = k_1 + ... + k_m$ nullstellen (mit Vielfachheit).
$\Rightarrow$ $P - Q \equiv 0$.

Folgerung 4.1 *H_n existiert!*

Folgerung 4.2 *$x_i \neq x_j, i \neq j$ $\Rightarrow$ Lagrange-Interpolation*

Folgerung 4.3 *$x_0 = x_1 = ... = x_n$ $\Rightarrow$ $H_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{f^{(j)}(x_0)}{j!}(x - x_0)^j$ Taylor-Polynom.*

Die dividierten Differenzen (s. Newton-Interpolation!) für $x_i = x_{i+1} = ... = x_{i+j},\ j = 0, 1, ..., k_{i-1}$

$$[x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+j}] = \frac{f^{(j)}(x)}{j!}.$$

Daher gilt $H_n = \sum_{j=0}^{n}[x_0, x_1, ..., x_j]\omega_j(x)$, wobei $\omega_j(x) = \Pi_{i=0}^{j}(x - xi)$.
Es gilt auch

$$f(x) - H_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x), \qquad \min(x, x_0) \leq \xi \leq \max(x, x_n).$$

Beispiel-Algorithmus (Hermite-Interpolation):
Gegeben seien folgende Messwertpaare:

$$f(0) = -1 \quad f'(0) = -2 \quad f(1) = 0 \quad f'(1) = 10 \quad f''(1) = 40$$

a) Falls $x_i = x_{i+k}$:

$$[x_i, ..., x_{i+k}] = \frac{f_{r(i)+k}}{k!},$$

wobei $r(i)$ die kleinste Zahl mit $x_r = x_{r+1}$ ist.

b) Anderfalls:

$$[x_i, ..., x_{i+k}] = \frac{[x_{i+1}, ..., x_{i+k}] - [x_i, ..., x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}.$$

Im Zähler des Bruchs steht "Tabellenwert von links unten"-"Tabellenwert von links oben".

c) Für die Basispolynome gilt: $p_0 = 1$
$p_j = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{j-1})$

Zurück zu unseren Daten. Die Tabelle zur Berechnung der finiten differezensiehr wie folgt aus:

$$\begin{array}{llllll}
x_0 = 0 & [x_0] \overset{(1)}{=} -1 & & & & \\
 & & [x_0, x_1] \overset{(1)}{=} -2 & & & \\
x_1 = 0 & [x_1] \overset{(1)}{=} -1 & & [x_0, x_1, x_2] \overset{(2)}{=} 3 & & \\
 & & [x_1, x_2] \overset{(2)}{=} 1 & & [x_0, ..., x_3] \overset{(2)}{=} 6 & \\
x_2 = 1 & [x_2] \overset{(1)}{=} 0 & & [x_1, x_2, x_3] \overset{(2)}{=} 9 & & [x_0, ..., x_4] \overset{(2)}{=} 5 \\
 & & [x_2, x_3] \overset{(1)}{=} 10 & & [x_1, ..., x_4] \overset{(2)}{=} 11 & \\
x_3 = 1 & [x_3] \overset{(1)}{=} 0 & & [x_2, x_3, x_4] \overset{(1)}{=} 20 & & \\
 & & [x_3, x_4] \overset{(1)}{=} 10 & & & \\
x_4 = 1 & [x_4] \overset{(1)}{=} 0 & & & &
\end{array}$$

Die Koeffizienten des Hermite-Polynoms stehen nun auf der oberen Diagonalen:

$$\begin{aligned}
H_n(x) &= -1p_0 - 2p_1 + 3p_2 + 6p_3 + 5p_4 = \\
&= -1 - 2x + 3x^2 + 6x^2(x - 1) + 5x^2(x - 1)^2
\end{aligned}$$

4.1 Aufgaben

Aufgabe 11

Bestimmen Sie das Hermite-Interpolationspolynom zu folgender Wertetabelle. Geben Sie eine Darstellung der Form $p(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x^i$.

x_k	-1	0	2	3
f_k	12	3	15	12
f_k'				0

Aufgabe 12

(3 Punkte)
Bestimmen Sie das zu der folgenden Wertetabelle gehörende interpolierende Polynom in der Form $p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$:

x_k	1	3	4
$f(x_k)$	-2	3	0
$f'(x_k)$		4	
$f''(x_k)$		2	

5 Gleichungen mit einer Veränderlichen (Nullstellenbestimmung)

Motivation: Lösung jeder algebraischen Gleichung kann als die Suche nach den Nullstellen einer Funktion interpretiert werden. Wie es oft in der Mathematik ist, viele Gleichungen lassen zwar die Existenz der Lösungen beweisen; die symbolische Berechnung ist aber nicht moglich.

Sogar die Polynomgleichungen der Form

$$\sum_{i=0}^{n} a_i x^i = 0,$$

die nach dem Hauptsatz der Algebra genau n komplexe Nullstellen besitzen, besitzen keine allgemeine Lösungsformeln mit geschachtelten Wurzelausdrücken (sog. Lösung in Radikalen), wie sie für Polynome vom Grad ≤ 4 auch gefunden wurden. Alle Lösungsversuche für allgemeine Gleichungen von Grad 5 schlugen fehl; um nachweisen zu können, daß es unmöglich ist, benötigt man fortgeschrittene Techniken der Algebra, die wir nicht besprechen werden. Dieser Nachweis gelang nach Vorarbeiten von Paulo Ruffini (1765-1822) erst 1826 dem norwegischen Mathematiker Niels Henrik Abel (1802-1829). Eine allgemiene Theorie hat 1832 der französische Mathematiker Evariste Galois (1811-1832) gegeben.

Was soll man also machen, wenn die Lösungen einer solchen Gleichung gesucht wird? Man kann diese **numerisch approximieren**!

Gesucht sind Nullstellen einer Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$.

5.1 Bisektionsverfahren (Intervallhalbierungsverfahren)

ist $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ stetig und gilt $f(a) \cdot f(b) < 0$, so hat f eine Nullstelle in $[a, b]$ (vgl. Beweis aus Analysis).

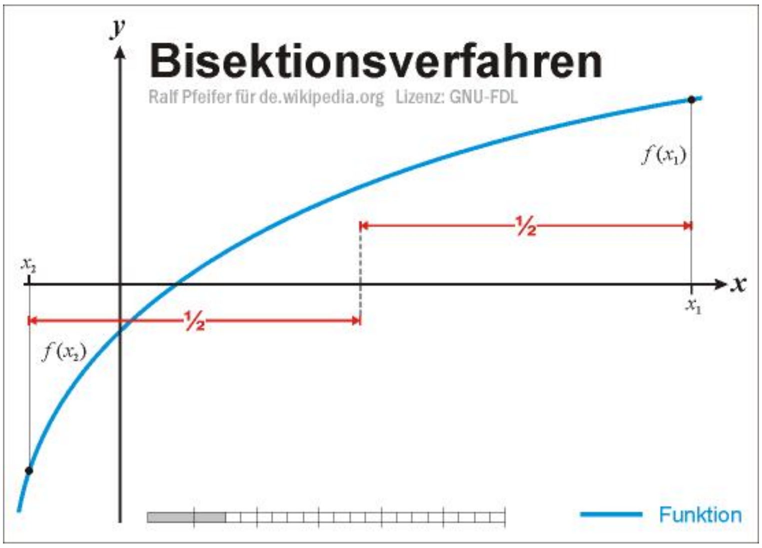

Abbildung 4: Intervallhalbierungsverfahren / Bisektion

5.2 Banach'sche Fixpunkt-Iterationsverfahren

...zum lösen der Gleichung $x = \varphi(x) \Leftrightarrow \varphi(x) - x = 0$, Lösung sei ω. Konstruktion einer Iterationsfolge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ mit dem Startwert x_0 und der Iterationsvorschrift $x_{n+1} = \varphi(x_n)$

$x_0 =$ beliebiger Startwert
$x_1 = \varphi(x_0)$
$x_2 = \varphi(x_1)$
$\vdots$

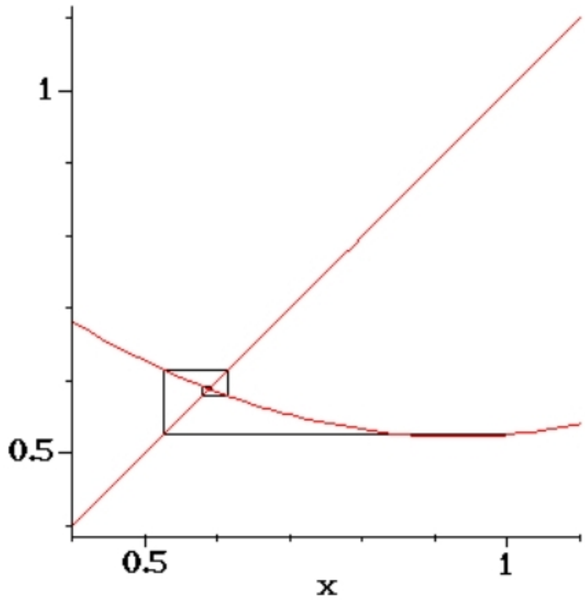

Abbildung 5: Iterationsverfahren

Definition 5.1

Eine Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ hat die Kontraktionseigenschaft mit der Kontraktionskonstanten $0 < q < 1$, wenn für alle $x, y \in [a, b]$ gilt:

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q \cdot |x - y|$$

Ist $\varphi : [a, b] \in \mathbb{R}$ differenzierbar, so gilt für $x, y \in [a, b]$ nach dem Mittelwertsatz

$$\frac{\varphi(x) - \varphi(y)}{x - y} = \varphi'(c) \qquad \text{(c zwischen x und y)}$$

Ist jetzt $q := \sup\limits_{x \in [a,b]} |\varphi'(x)| < 1$, so ist

$$\left|\frac{\varphi(x) - \varphi(y)}{x - y}\right| = |\varphi'(c)| < q \Leftrightarrow |\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q \cdot |x - y|$$

Also hat mit $q < 1$ die Funktion φ die Kontraktionseigenschaft.

Satz 5.1 *Sei $\varphi : [a, b] \to [a, b]$ eine kontraktive Funktion mit der Kontraktionskonstanten $q < 1$. Dann konvergiert die rekursiv definierte Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $x_{n+1} = \varphi(x_n) \forall n \in \mathbb{N}$ bei beliebigen Startwert $x_0 \in [a, b]$ gegen die einzige Lösung ω der Gleichung $x = \varphi(x)$.*

Beweis: 5.1

Sei $x_0 \in I$. Dann ist $x_n \in I \; \forall n \in \mathbb{N}$.

$$\begin{aligned}
|x_{n+1} - x_n| &= |\varphi(x_n) - \varphi(x_{n-1})| \\
&\leq q \cdot |x_n - x_{n-1}| \\
&\overset{4}{\leq} q^n \cdot |x_1 - x_0| \qquad (n > m) \\
|x_n - x_m| &= x_n - x_{n-1} + x_{n-1} - x_{n-2} + x_{n-2} - \ldots + x_{m-1} - x_m| \\
&\leq \sum_{k=m+1}^{n} \cdot |x_k - x_{k-1}| \leq \left(\sum_{k=m+1}^{n} q^{k-1} \right) \cdot |x_1 - x_0| \\
&\leq \left(\sum_{k=m+1}^{\infty} q^{k-1} \right) \cdot |x_1 - x_0| \\
&\overset{5}{=} \frac{q^m}{1 - q} \cdot |x_1 - x_0| \overset{6}{<} \epsilon
\end{aligned}$$

[4] Induktion

[5] vgl.: $\sum\limits_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q} = 1 + q + q^2 + \ldots$

[6] falls m hinreichend groß

$(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ist also Cauchy-Folge und deshalb konvergent; Grenzwert ω. Aus der Kontraktionseigenschaft von φ folgt die Stetigkeit, denn
$|\varphi(x+h)-\varphi(x)| \leq q \cdot |h|$, also $\lim\limits_{h\to 0} \varphi(x+h) = \varphi(x)$.
Dann ist $\omega = \lim\limits_{h\to\infty} x_{n+1} = \lim\limits_{h\to\infty} \varphi(x_n) \underbrace{=}_{\text{Stetigkeit von } \varphi} \varphi(\omega)$.

ω heißt Fixpunkt der Iteration. ω ist einzigster Fixpunkt, denn wäre $\omega_2 \neq \omega$ ein weiterer Fixpunkt, so würde gelten

$$|\omega-\omega_2| = |\varphi(\omega)-\varphi(\omega_2)| \leq q \cdot \omega - \omega_2| \leq |\omega-\omega_2|$$

Also existiert nur genau ein Fixpunkt.
Aus der Abschätzung folgt

$$\begin{aligned} |\omega - x_n| &\leq \frac{q^m}{1-q} \cdot |x_1 - x_0| (\text{A-priori-Abschätzung}) \\ q^m &< 10^{-5} \rightarrow \text{Nst. auf 5 Nachkommastellen berechnet.} \\ |\omega - x_n| &\leq \frac{q}{1-q} \cdot |x_n - x_{n-1}| (\text{A-posterio-Abschätzung}) \end{aligned}$$

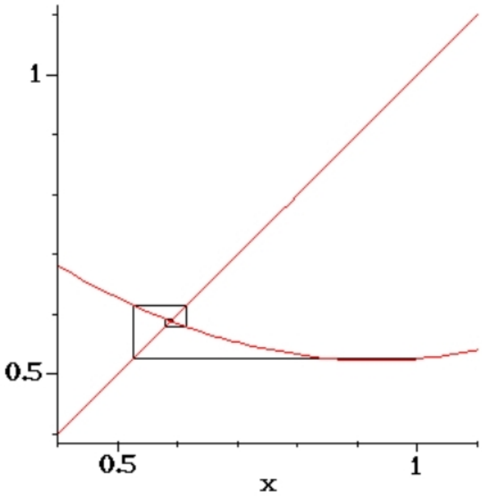

Abbildung 6: pos. Beispiel

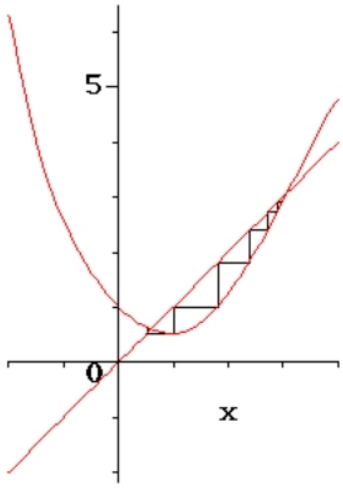

Abbildung 7: pos. Beispiel

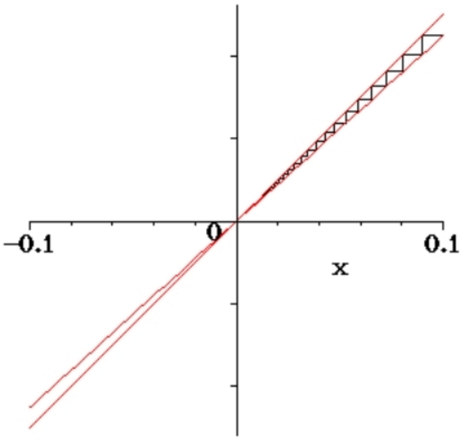

Abbildung 8: neg. Beispiel

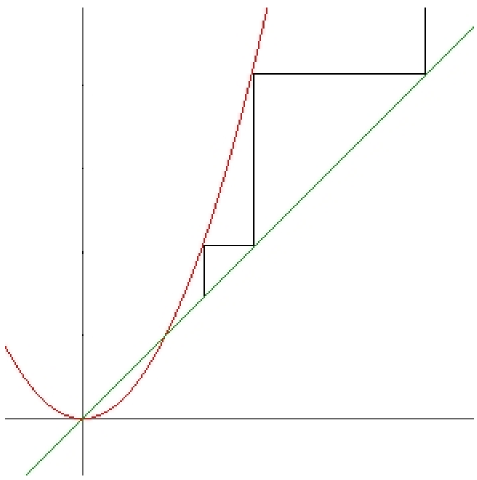

Abbildung 9: neg. Beispiel

Satz 5.2 *Ist $g : I \to I$ gegebene Funktion und existiert $q \in [0,1]$ mit $\forall x_1, x_2 \in I$ ist $|g(x_1) - g(x_2)| \leq q \cdot |x_1 - x_2|$, so heißt g* ***Kontraktion*** *(kontraktive Abbildung) mit der Kontraktionskonstanten q.*

Beweis: 5.2

ohne Beweis.

Ist g differenzierbar und ist

$$\max_{x \in I} \left| g'(x) \right| =: q < 1$$ [7]

so ist q Kontraktionskonstante.

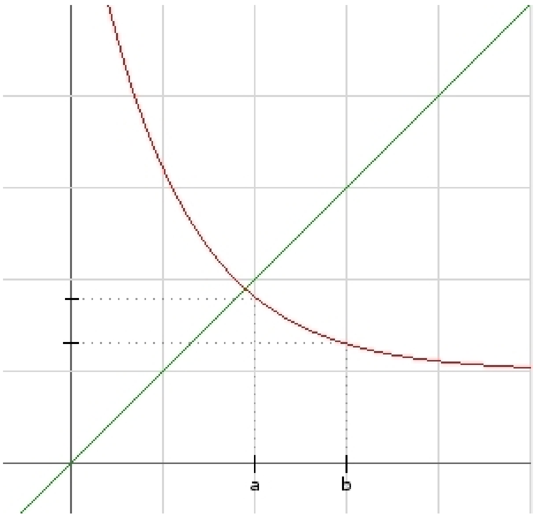

Abbildung 10: Streng monotone Funktion

Bei streng monotonen Funktionen reicht die Betrachtung der Intervallgrenzen, um zu zeigen, dass die Funktion in sich abbildet.

[7] Je kleiner q, desto schneller konvergiert die Folge ("flache" Funktion)

5.3 Newton-Raphson-Verfahren zur Nullstellenbestimmung

Motivation: Die grundlegende Idee dieses Verfahrens ist, die Funktion in einem Ausgangspunkt zu linearisieren, d.h. ihre Tangente zu bestimmen und die Nullstelle der Tangente als verbesserte Näherung der Nullstelle der Funktion zu verwenden. Die dadurch erhaltene Näherung kann wieder als Ausgangspunkt für einen weiteren Verbesserungsschritt dienen. Diese Iteration wird so oft wiederholt, bis die Änderung in der Näherungslösung eine festgesetzte Schranke unterschreitet. Das unendlich oft fortgesetzte Iterations-Verfahren konvergiert im günstigsten Fall mit quadratischer Konvergenzordnung, die Zahl der korrekten Dezimalstellen verdoppelt sich dann in jedem Schritt.

Sei $f : I \to \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion.
Tangente in $\big(x_n, f(x_n)\big)$ ist $y - f(x_n) = f'(x_n) \cdot (x - x_n)$

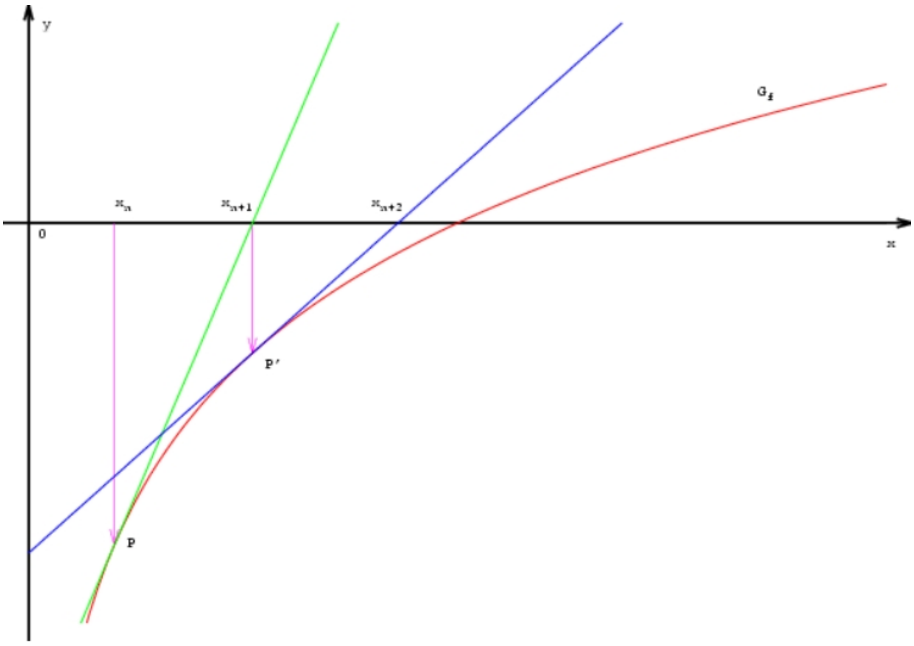

Abbildung 11: funktionierendes Newton-Verfahren

Schnitt mit x-Achse ($y = 0$) liefert die Iterationsvorschrift:
x_0: Startwert
$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

Negativ-Beispiele:

a) Verfahren entfernt sich von der Nullstelle, anstatt sich ihr zu nähern

Im Beispiel wird der (ungeeignete) Startwert x_0 rechts neben dem lokalen Extremum gewählt.
Die Iteration bewegt sich daher immer weiter von der Nullstelle weg.

Die sich ergebenden Werte nähern sich immer mehr der 0 an. Da die Funktion für $x > 0$ keine Nullstelle besitzt, wird vom Verfahren nie eine gefunden.

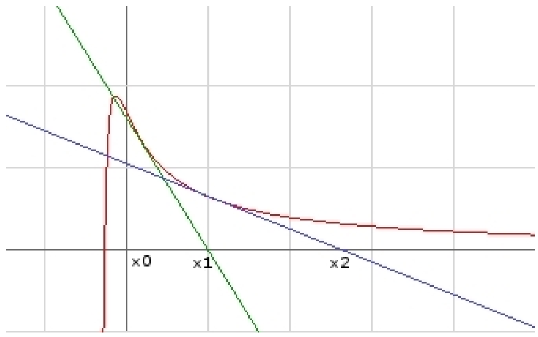

Abbildung 12: Verfahren entfernt sich

b) Endlosschleife im Newton-Verfahren

Wir betrachten die Funktion $f(x) = x^3 - 2x + 2$ (rot) und wählen für das Newton-Verfahren den Startwert $x_0 = 0$.

1. Iterationsschritt (grün):
$x_1 = 1$.

2. Iterationsschritt (blau):
$x_2 = 0$!

Nach 2 Iterationen sind wir wieder am Anfang, denn x_2 hat den gleichen Wert wie x_0. Das Verfahren endet also nie (Endlosschleife).

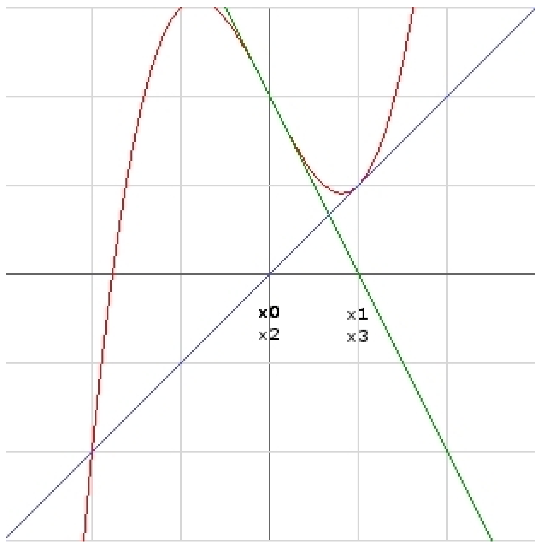

Abbildung 13: Endlosschleife: 0,1,0,1,...

Als Kontraktion interpretiert (wann genau funktioniert das Verfahren nicht?):

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= \varphi(x_n) \text{ mit} \\
\varphi(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)} \\
|\varphi'(x)| &= \left| 1 - \frac{f'^2(x) - f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)} \right| \\
&= \left| \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)} \right| \overbrace{<}^{8} 1
\end{aligned}
$$

Ist x_0 nahe einer Nullstelle, so ist dort

$$\left|\frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)}\right| < 1$$

sofern $f'^2(x) \geq k > 0$

[8] Kontraktionskonstante muß < 1 sein, damit Verfahren gegen die Nullstelle konvergiert.

5.4 Aufgaben

Aufgabe 13

Eine Lösung der Gleichung $x = \tan x$ im Intervall $(0; 2\pi)$ kann ermittelt werden, wenn man die Gleichung $x = \arctan x + \pi$ lost. Die Lösung ist im Intervall $[4; 5]$ zu erwarten.
Untersuchen Sie die Banach-Iteration für diese Gleichung, d.h.: Zeigen Sie, daß $\phi(x) = \pi + \arctan x$ das Intervall $[4; 5]$ in sich abbildet und daß diese Abbildung eine Kontraktion ist.
Schätzen Sie damit ab, wieviele Folgenglieder zu berechnen sind, damit

$$|x_n - \omega| < 10^{-5}.$$

Aufgabe 14

Gegeben sei die Funktion $f(x) = \frac{1}{2}e^{x/2}$.

a) *Zeigen Sie, daß es im Intervall $[0; 1]$ genau eine Lösung der Gleichung $x = f(x)$ gibt indem Sie*

   (i) *überprüfen, daß f das Intervall $[0; 1]$ in sich selbst abbildet und*

   (ii) *nachweisen, das f kontrahirend ist.*

b) *Wieviele Iterationsschritte sind, ausgehend vom Startwert $x_0 = 0$, laut a-priori-Abschätzung höhstens nötig, um den Fispunkt mit einer Genauigkeit von $\epsilon = 10^{-2}$ zu approximieren?*

c) *Stellen Sie die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens zur Nullstellenbestimmung der Funktion $g(x) = x - f(x)$ auf und berechnen Sie, beginnend mit dem Startwert $x_0 = 1/2$, die erste drei Folgenglieder.*

Aufgabe 15

Gegeben sei die Funktion $f(x) = \frac{4}{5} + \frac{1}{5}\sin x$.

a) *Zeigen Sie, daß es im Intervall $[\pi/4; \pi/2]$ genau eine Lösung der Gleichung $x = f(x)$ gibt indem Sie*

   (i) *überprüfen, daß f das Intervall $[0; 1]$ in sich selbst abbildet und*

   (ii) *nachweisen, das f kontrahirend ist.*

b) *Wieviele Iterationsschritte sind, ausgehend vom Startwert $x_0 = 0$, laut a-priori-Abschätzung höhstens nötig, um den Fispunkt mit einer Genauigkeit von $\epsilon = 10^{-6}$ zu approximieren?*

c) *Stellen Sie die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens zur Nullstellenbestimmung der Funktion $g(x) = x - f(x)$ auf und berechnen Sie, beginnend mit dem Startwert $x_0 = \pi/4$, die erste drei Folgenglieder.*

Aufgabe 16

Sei die Funktion $f(x) = \frac{1}{2}e^{\sqrt{x}} - x$ gegeben.
Untersuche, ob diese Funktion auf dem Intervall $[2; 3]$ Nullstellen hat. Falls ja, wieviel? Beweis!
Sollte es nur eine Nullstelle auf dem Intervall geben, wieviele Schritte der Banach-Iteration sind nötig (falls das Verfahren anwendbar ist: überprüfe die Voraussetzungen!), um diese mit der Genauigkeit 10^{-2} zu bestimmen?
Führe die erste 5 Schritte des Bisektionsverfahrens aus.

Aufgabe 17

Die Gleichung

$$1 + \xi^2 = e^{2\xi - 2}$$

soll gelöst werden. Geben Sie eine Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ an, die unabhängig vom gewählten Startpunkt x_0 gegen die Lösung der Gleichung konvergiert.
Wählen Sie als Startwert $x_0 = 0$ und geben Sie an, wieveile Iterationen Sie höhstens benötigen, um die gesuchte Lösung ξ auf 3 Nachkommastellen genau zu berechnen.

Aufgabe 18

Sei f auf dem Intervall $[a; b]$ eine stetige differenzierbare Funktion mit der stetigen auf $[a; b]$ Ableitung ($f \in C^1[a; b]$). Weiter besitze f die Eigenschaft

$$\min_{x \in [a;b]} |f'(x)| > 1.$$

a) *Zeigen Sie anhand eines einfachen Beispiels, das eine solche Funktioneine Fixpunkt $x_* \in [a; b]$ besitzen kann.*

b) *Zeigen Sie, daß bei Funktionen mit der obigen eigenschaft die Fixpunktiteration $x_{n+1} = f(x_n)$ für jeden Startwert x_0, der kein Fixpunkt ist, divergiert.*

Aufgabe 19

(3+2 Punkte)

Gegeben ist die Funktion

$$f(x) = \frac{1}{4} e^{\frac{\sqrt{x}}{2}}.$$

a) *Zeigen Sie, daß es im abgeschlossenen Intervall* $[0.1,\ 1]$ *genau eine Lösung der Gleichung x=f(x) gibt, indem Sie*

- *überprüfen, daß* f *das Intervall* $[0.1,\ 1]$ *in sich abbildet und*
- *nachweisen, daß* f *kontrahierend ist.*

b) *Wieviele Iterationsschritte sind ausgehend vom Startwert* $x_0 = 0.1$ *höhstens nötig, um den Fixpunkt mit einer Genauigkeit von* $\epsilon = 10^{-2}$ *zu approximieren?*

(Sollten Sie bei a) keine Lipschitz-Konstante ermittelt haben, arbeiten Sie bitte mit $L = 0.9$*.)*

6 Numerische Quadratur (numerische Integration)

Motivation: Aus der Geometrie wissen wir, wie der Flächeninhalt von geradlinig begrenzten Flächen zu berechnen ist. Beliebig krummlinig begrenzte Flächen berechnen wir mit Hilfe von Integralen. Diese lassen sich jedoch nur lösen, wenn die Stammfunktion durch die uns geläufigen elementaren Funktionen analytisch bestimmt werden kann. Wie ermittelt man aber Flächeninhalte (näherungsweise), wenn die Stammfunktion sich nicht durch die geläufigen Funktionen analytisch bestimmen lässt (z.B. bei $\int_a^b \frac{sin(x)}{x} dx$)?

Es soll $\int\limits_a^b f(x)dx$ für eine stetige Funktion f näherungsweise berechnet werden. Dazu gibt es mehrere Möglichkeiten:

6.1 Ober- bzw. Untersummen

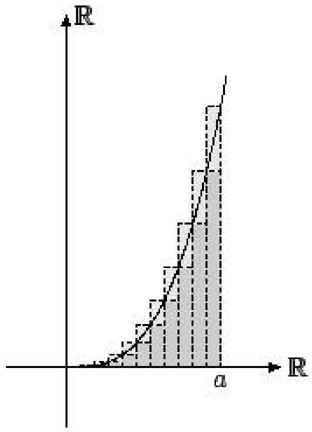

Abbildung 14: Ober- und Untersummen

Zerlege $[a, b]$ gemäß $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$

$$\text{Obersumme } O_s := \sum_{i=1}^{n} M_i(x_i - x_{i-1}) \text{ wobei } M_i = \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]} f(x)$$

$$\text{Untersumme } U_s := \sum_{i=1}^{n} m_i(x_i - x_{i-1}) \text{ wobei } m_i = \min_{x \in [x_{i-1}, x_i]} f(x)$$

6.2 Mittelpunktsregel

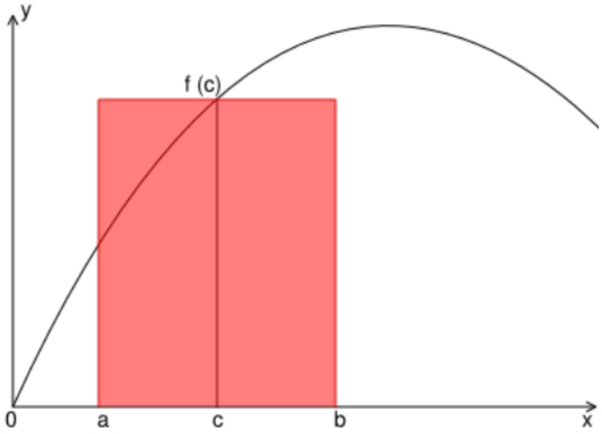

Abbildung 15: Mittelpunktsregel

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot f\Big(a + \frac{h}{2}\Big)$$

Lineares Interpolationspolynom durch $\big(a, f(a)\big)$, $\big(a+h, f(a+h)\big)$:

$$y - f(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \cdot (x - a)$$

Integration dieses linearen Polynoms zwischen a und $a + h$ liefert

$$\begin{aligned}
&\int_a^{a+h} \Big(f(a) + \frac{f(a+h)-f(a)}{h}(x-a)\Big)dx \\
&= \int_a^{a+h} \Big(f(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}a + \frac{f(a+h)-f(a)}{h}x\Big)dx \\
&= \left[\Big(f(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}a\Big)x + \frac{1}{2}\frac{f(a+h)-f(a)}{h}x^2\right]_{x=a}^{x=a+h} \\
&= \Big(f(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}a\Big)h + \frac{1}{2h}\Big(f(a+h)-f(a)\Big)\Big((a+h)^2 - a^2\Big) \\
&= f(a)h - \Big(f(a+h)-f(a)\Big)a + \frac{1}{2h}\Big(f(a+h)-f(a)\Big)(2ah + h^2) \\
&= f(a)h - \Big(f(a+h)-f(a)\Big)a + \Big(f(a+h)-f(a)\Big)a + \frac{h}{2}\Big(f(a+h)-f(a)\Big) \\
&= \frac{h}{2}f(a+h) + \frac{h}{2}f(a) \\
&= \frac{h}{2}\Big(f(a+h)+f(a)\Big)
\end{aligned}$$

6.3 Zusammengesetzte Sehnentrapezregel

Seit $[a, b]$ in n Teilintervalle zerlegt. $a < a + h < \ldots < a + ah = b$ $(h = \frac{b-a}{h})$

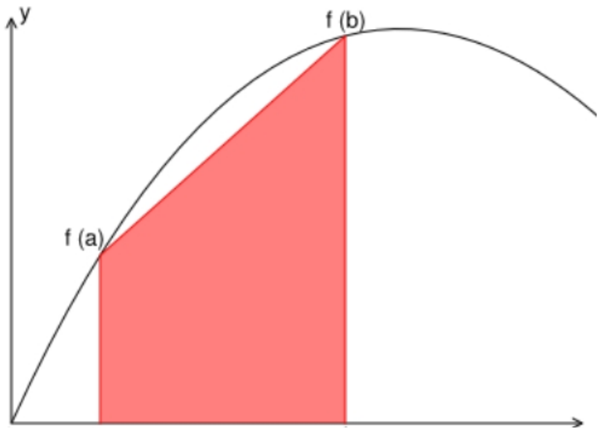

Abbildung 16: Sehnentrapezregel

$$\int_{a+(n-1)h}^{a+nh} f(x)\, dx \approx \frac{h}{2}\Big(f(a+n-1)h\Big) + f(a+nh)$$
$$\int_a^b f(x)\, dx = \int_a^{a+nh} f(x)\, dx$$
$$\approx h\Big(\frac{f(a)}{2} + f(a+h)\Big) + f(a+2h) + \ldots + f(a+(n-1)h) + \frac{f(b)}{2}\Big)$$

Bezeichnet man die Funktionswerte von f an den Stellen $a + ih$ $(i = 0, \ldots, n)$ mit $y_0, \ldots, y_n$, so lautet die Formel

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx h\Big(\frac{y_0}{2} + y_1 + \ldots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2}\Big)$$

Beispiel:

$$\int_1^2 (\frac{1}{2}x^2 - 2x)\, dx = \frac{1}{6}x^3 - x^2\Big|_1^2$$
$$= \frac{8}{6} - 4 - \frac{1}{6} + 1 = \frac{7}{6} - 3 = -\frac{11}{6} = -\frac{88}{48}$$

zum Vergleich: gleiches Beispiel, Sehnentrapezregel mit 2 Teilintervallen.
$1, \frac{3}{2}, 2$, Funktionswerte sind $-\frac{3}{2}, -\frac{15}{8}, -2$, $h = \frac{1}{2}$

$$\int_1^2 (\frac{1}{2}x^2 - 2x)\, dx \approx \frac{1}{2}\Big(-\frac{3}{4} - \frac{15}{8} - 1\Big) = -\frac{29}{16} = -\frac{87}{48}$$

Wie groß ist der Fehler? Man sieht, dass die Differenz lediglich $\frac{1}{48}$ beträgt.

6.4 Simpson-Regel oder Keplersche Fassregel

$f : [a, a+2h] \mapsto \mathbb{R}$ stetig soll näherungsweise berechnet werden.
Durch die Stützstellen $x_0 = a, x_1 = a+h, x_2 = a+2h$ mit den Stützwerten

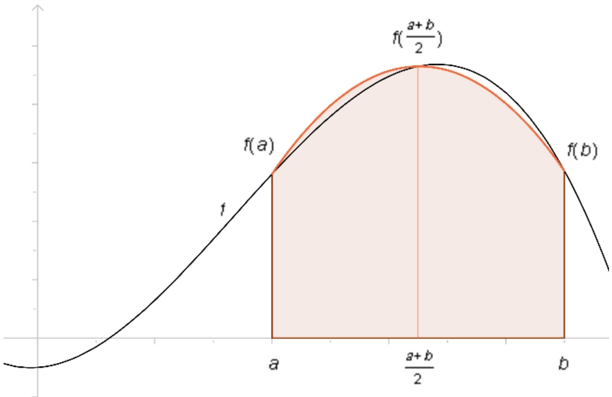

Abbildung 17: Simpson-Regel od. Keplersche Fassregel

$f(a) = y_0, f(a+h) = y_1, f(a+2h) = y_2$ wird das Interpolationspolynom vom Maximalgrad 2 gelegt und integriert. Man erhält

$$\int_a^{a+2h} f(x)\,dx \approx \int_a^{a+2h} IP\,dx = \frac{h}{3}\Big(f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h)\Big)$$

Wir berechnen unser Beispiel nun mit der Keplerschen Fassregel:

$$\int_1^2 (\frac{1}{2}x^2 - 2x)\,dx \approx \frac{1}{6}\Big(f(1) + 4\cdot f(\frac{3}{2}) + f(2)\Big)$$
$$= \frac{1}{6}(-\frac{3}{2} + 4\cdot(-\frac{15}{8}) - 2) = \frac{1}{6}\Big(\frac{-3-15-4}{2}\Big) = -\frac{22}{12} = -\frac{88}{48}$$

$\Rightarrow$ Mit der Keplerschen Fassregel erhalten wir den exakten Wert.[9]

[9] Achtung: Die Keplersche Fassregel liefert immer nur dann einen exakten Wert, wenn das zu integrierende Polynom vom Höchstgrad 3 ist.

6.5 Beispiele

Quadraturformeln:

$$\begin{aligned}
\text{Trapezregel} \quad & \int_a^{a+h} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(y_0 + y_1) \\
\text{Keplersche Fassregel} \quad & \int_a^{a+2h} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \\
\text{Newtonsche } \frac{3}{8}\text{ -Regel} \quad & \int_a^{a+3h} f(x)\,dx \approx \frac{3}{8}h(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3) \\
\text{Milne-Regel} \quad & \int_a^{a+4h} f(x)\,dx \approx \frac{2}{45}h(7y_0 + 32y_1 + 12y_2 + 32y_3 + 7y_4)
\end{aligned}$$

Fehler bei Sehnentrapezregel
Sekante hat die Gestalt $p(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - a)$.

$$\int_a^{a+h} p(x)\,dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$

Fehler bei Polynominterpolation ist $x := a, a + h =: x_1$

$$|p(x) - f(x)| = \frac{f^{n-1}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$$

Der Fehler bei Integration ist bei Verwendung der Sehnentrapezregel

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{x_0}^{x_1} p(x)\,dx - \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \right| = \left| \int_{x_0}^{x_1} \Big(p(x) - f(x)\Big)\,dx \right| \\
&= \int_{x_0}^{x_1} \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_0)(x - x_1)\,dx \\
&= \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot \int_{x_0}^{x_1} (\underbrace{x - x_0}_{f'})(\underbrace{x - x_1}_{g})\,dx
\end{aligned}$$

Nebenrechnung: Lösen des Integrals

$$\begin{aligned}
&\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\,dx \\
&= (x - x_0)\frac{1}{2}(x - x_1)^2\Big|_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}(x - x_0)^2\,dx \\
&= \frac{1}{6}(x - x_0)^3\Big|_{x_0}^{x_1} \\
&= \frac{1}{6}(x_1 - x_0)^3
\end{aligned}$$

Diese Lösung des Integrals eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned}
F_{ST} &= \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot \frac{1}{6}(x_1 - x_0)^3 \\
&= \frac{f''(\xi)}{12}h^3
\end{aligned}$$

Mit gleicher Vorgehensweise erhält man für die Keplersche Fassregel die Fehlerformel

$$F_{KF} = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi).$$

bei Newtons $\frac{3}{8}$ -Regel erhält man

$$F_{N\frac{3}{8}} = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi)$$

6.6 Tabelle zu Quadraturformeln

Die Quadraturformel hat die Gestalt $\frac{h}{s}\sum\limits_{i=0}^{n} w_i y_i$.

Name	n	Gewichte (ω_i)	s	Ordnung[10]	Fehler
Trapezregel	1	1 1	2	1	$\frac{f''(\xi)}{12}h^3$
Fassregel	2	1 4 1	3	3	$-\frac{1}{90}h^5 f^(4)(\xi)$
Newton $\frac{3}{8}$	3	1 3 3 1	$\frac{8}{3}$	3	$-\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi)$
Milne	4	7 32 12 32 7	$\frac{45}{2}$	5	...

Beispiel $f(x) = 4x^3 - 2x^2 + x - 1$:

$$\begin{aligned}\int_{x=0}^{4} f(x)dx &= \frac{2}{3}\Big(f(0) + 4f(2) + f(4)\Big) \\ &= \frac{2}{3}(-1 + 4 \cdot 25 + 227) = \frac{2 \cdot 326}{3} \\ &= \frac{652}{3}\end{aligned}$$

[10]Die Ordnung einer Quadraturformel ist der grösste Polynomgrad für den die Formel exakte Werte liefert.

6.7 Aufgaben

Aufgabe 20

Berechnen Sie das Integral

$$\int_0^1 x^2 e^{-x} dx$$

mit der Simsponschen Regel und schätzen Sie den Fehler mit der Fehlerformel zur Simpsonregel ab.
Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem wahren Wert des Integrals (zweimalige partielle Integration).

Aufgabe 21

Approximieren Sie unter Verwendung der Simpson-Regel und der Trapez-Regel

$$S(f) = (b-a)\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)\right)$$

die folgende Integrale und geben Sie den auftretenden Quadraturfehler an, indem Sie die Integrale exakt berechen. Vergleichen Sie jeweils den exakten Fehler mit dem a priori abgeschätzten Fehlerwert für das Trapez-Verfahren.

$$I_1 = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\sin^3 x - \cos 2x) dx,$$

$$I_2 = \int_2^3 \frac{x^3 - x}{2x^4 - 4x^2} dx.$$

Erläutern Sie kurz das jeweilige Resultat.

Aufgabe 22

Approximieren Sie unter Verwendung der Simpson-Regel

$$S(f) = (b-a)\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)\right)$$

die folgende Integrale und geben Sie den auftretenden Quadraturfehler an:

$$I_1 = \int_{-1}^{1} (x^3 + 2x^2 + 1) dx,$$

$$I_2 = \int_{-a}^{a} x e^{x^2} dx, \quad (a > 0).$$

Erlautern Sie kurz das jeweilige Resultat.

Aufgabe 23

Sei $[a,b] \subset \mathbb{R}$ ein Intervall. Leiten Sie die Simpson-Regel auf der folgende Art und Weise her:
Zu bestimmen sind Gewichte $w_0, w_1, w_2 \in \mathbb{R}$ derart, daß die Quadraturformel

$$S(f) = w_0 f(a) + w_1 f(\frac{a+b}{2}) + w_2 f(b)$$

das Integral $\int_a^b P(x)dx$ für alle Polynome P zweites Grades exakt berechnet.

Aufgabe 24

Sei $[a,b] \subset \mathbb{R}$ ein Intervall und $f \in C^2([a,b])$ (f ist eine zweimal stetig differenzierbar auf dem Intervall $[a,b]$, d.h. auf $[a,b]$ existieren stetige f' und f'').
Leiten Sie für die Trapezregel

$$T(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$$

mit Hilfe von Taylor-Formel für f an der Stelle $x \in [a,b]$ die Fehlerabschätzung

$$\left| \int_a^b f(x)dx - T(x)) \right| \leq \frac{1}{12} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|(b-a)^3$$

ab.

Aufgabe 25

(5 Punkte)
Approximieren Sie unter Verwendung der Simpson-Regel

$$S(f) = (b-a)\left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)\right)$$

und der Trapez-Regel folgende Integrale

a)

$$I = \int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x+2}}dx$$

b)

$$I_2 = \int_2^3 \frac{x^3 - x}{2x^4 - 4x^2}dx.$$

und geben Sie die auftretende Quadraturfehler an, indem Sie die Integrale exakt berechen.
Vergleichen Sie jeweils die exakten Fehlerwerte mit den a priori für die Trapezregel abgeschätzten Fehlerwerte.
Erläutern Sie kurz das jeweilige Resultat.

Hinweis: alle Ableitungen des Integranden sind auf $[0,1]$ monoton.

7 Lineare Regression (Methode der kleinsten Quadrate)

Motivation: Man versucht für eine gegebene Punktmenge (z.B. durch konkrete Messungen bestimmt) den Mittelwert in Form einer Geraden zu approximieren. Diese Trendgerade oder Regressionsgerade stellt dann eine einfache Näherungsfunktion dar.
Intuitiv würde man, um die Trendgerade zu ermitteln, folgenden Ansatz verwenden: Bestimme die Gerade, die von allen Punkten den minimalen Abstand besitzt. Die entstehende Extremwertaufgabe besteht aus einer zusammengesetzten Betragsfunktion. Da es bei Betragsfunktionen bekanntlich Probleme mit der Differenzierbarkeit an den Verheftungsstellen gibt, wird dieses Verfahren nicht angewendet.
Man vereinfacht stattdessen die Aufgabenstellung, indem man den Abstand der Quadrate minimiert. Dadurch kann man mit den Mitteln der Differentialrechnung das Extrema (Minimum) bestimmen ($\rightarrow$ Methode der kleinsten Quadrate).

x_i, y_i seien Ausprägungen des Merkmals X bzw. Y ($i = 1, \ldots, n$),
z.B. (X, Y) Geschwisterpaare Brüder/Schwestern, (x_i, y_i) Körpergrößen von n Geschwistern. Suche eine Trendgerade (Regressionsgerade) der Form $y = a + bx$

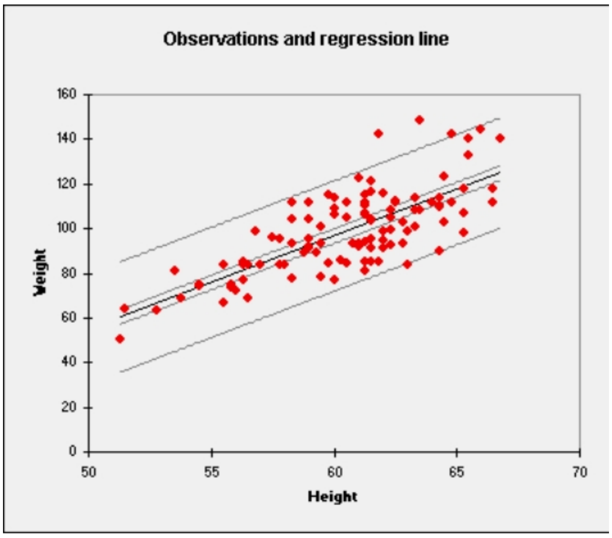

Abbildung 18: Beispiel lineare Regression

mit der Eigenschaft

$$F(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2 \rightarrow min.$$

(Der Abstand aller Punkte zur Geraden muß minimal werden.)

Weiter sei

$$F(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - abx_i)^2 \to \min.$$

$$\frac{\partial F}{\partial a}(a,b) = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - a - b - bx_i)^1 \cdot (-1) \stackrel{!}{=} 0$$
$$\frac{\partial F}{\partial b}(a,b) = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - a - b - bx_i)^1 \cdot x_i \stackrel{!}{=} 0$$

$$\left| \begin{array}{rrl} \boldsymbol{n \cdot a} & \boldsymbol{+b \sum_{i=1}^{n} x_i} & \boldsymbol{= \sum_{i=1}^{n} y_i} \\ \boldsymbol{a \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i} & \boldsymbol{+b \sum_{i=1}^{n} x_i^2} & \boldsymbol{= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i} \end{array} \right| \text{Normalgleichungen}$$

Regressionsgerade $P_k = (x_k, y_k)$, $k = 1, \ldots, n$
Suche Gerade $y = ax + b$ mit

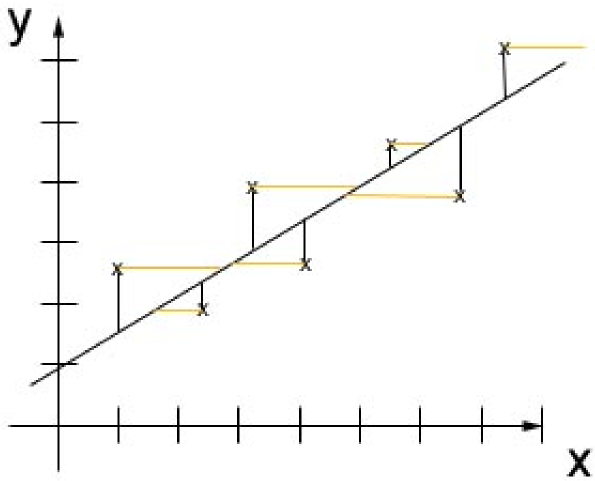

Abbildung 19: Beispiel Regressionsgerade

$$F(a,b) = \sum_{k=1}^{n} (ax_k + b - y_k)^2 \to \min$$

$$F_a(a,b) = 0 \qquad \sum_{k=1}^{n} 2(ax_k + b - y_k)x_k = 0$$

$$F_b(a,b) = 0 \qquad \sum_{k=1}^{n} 2(ax_k + b - y_k) = 0$$

$$\left.\begin{aligned} a\sum x_k^2 + b\sum x_k &= \sum x_k y_k \\ a\sum x_k + n\cdot b &= \sum y_k \end{aligned}\right\}\text{Normalengleichungen}$$

Lösen nach Cramer-Regel:

$$\det = n\sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2$$

$$a = \frac{1}{\det}\left(n\cdot\sum x_k y_k - \left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right)\right)$$

$$b = \frac{1}{\det}\left(n\cdot\sum x_k^2 - \left(\sum y_k\right)\left(\sum y_k\right)\right)$$

Abkürzungen:

$$x = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k,\ y = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} y_k \text{ Mittelwerte}$$

$$S_x^2 := \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(x_k - x)^2 \text{ Standardabweichung der } x_k$$

$$S_{xy} := \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(x_k - x)(y_k - y) \text{ Kovarianz der Meßpunkte}$$

Dann ist

$$S_x^2\cdot(n-1) = \sum(x_k^2 - 2x_k x + x^2) = \sum x_k^2 - 2x\sum x_k + n\cdot x^2$$

$$= \sum x_k^2 - 2nx^2 + nx^2$$

$$= \sum x_k^2 - nx^2$$

$$= \sum x_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)^2$$

$$S_x^2 = \frac{1}{n-1}\left(\sum x_k^2 - \frac{1}{n}(\sum x_k)^2\right)$$

In ähnlicher Weise

$$S_{xy} = \frac{1}{n-1}\left(\sum x_k y_K - \frac{1}{n}\left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right)\right)$$

$$\begin{aligned}
a &= \frac{1}{n}\sum x_k y_k - \left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right) n \sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2 \\
&= \frac{n(n-1)S_{xy}}{n(n-1)S_x^2} \\
&= \frac{S_{xy}}{S_x^2} \\
b &= \frac{1}{n}\left(\sum y_k - a \cdot \sum x_k\right) = y - a \cdot x
\end{aligned}$$

Regressionsgerade: $y = ax + b = ax + y - ax$
y-y=a(x-x)
Beispiel: Hooksches Gesetz
y=ax+b

	x_k	y_k	x_k^2	$x_k \cdot y_k$	$x - x_k$
	5	34	25	170	
	10	52	100	520	
	15	66	225	990	
	20	79	400	1580	
	25	97	625	2425	
	30	110	900	3300	
$\sum$	105	438	2275	8985	

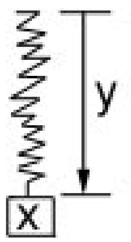

Abbildung 20: Hooksches Gesetz

$$\begin{aligned}
x &= \frac{105}{6} = 17,5,\ y = \frac{438}{6} = 73 \\
S_x^2 &= \frac{1}{5}(2275 - \frac{1}{6} \cdot 105^2) = 87,5 \\
S_{xy} &= \frac{1}{5}(8985 - 6 \cdot 17,5 \cdot 73) = 264 \\
a &= \frac{S_{xy}}{S_x^2} = 3,0171
\end{aligned}$$

Regressionsgerade: $y - 73 = 3,0171(x - 17,5)$

$$H(a,b) = \begin{vmatrix} F_{aa} & F_{ab} \\ F_{ab} & F_{bb} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2\sum x_k^2 & 2\sum x_k \\ 2\sum x_k & 2n \end{vmatrix} = 4\left(n\sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2\right) > 0$$

$|a \cdot b|^2 \leq |a|^2|b|^2$

$$a = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},\ b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Beweis: 7.1

$$\left(\sum x_k\right)^2 \leq \sum x_k^2 \cdot n$$

7.1 Aufgaben

Aufgabe 26

(3 Punkte)
Berechnen Sie die Ausgleichsgerade (Regressionsgerade) durch die Punkte $(1, 1)$, $(2, 1)$, $(3, 3.5)$, $(4, 5)$ *und* $(6, 4)$.

Aufgabe 27

Berechnen Sie ***ohne Taschenrechner*** *die Regressionsgerade* $y = a + bx$ *nach Methode der kleinsten Quadrate für die folgenden Beobachtungswerte* (x_i, y_i), $i = 1, ..., 6$:

$$(0; 0), (0; 1), (1; 1), (1; 2), (2; 2), (2; 3).$$

Zeichnen Sie zunächst die Messdatenpunkte in ein Koordinatensystem ein und stellen Sie eine Hypothese darüber auf, welche Gerade die beste sein kann.

Aufgabe 28

Der Zusammenhang zwischen dem Alter von 6 Gebrauchtwagen eines bestimmten Typs und den zugehörigen Preisen soll mittels geeigneter Regressionsfunktion dargestellt werden.

Alter in Jahren	*1*	*2*	*4*	*5*	*8*	*16*
Preis in 1000 Euro	*12*	*9*	*8*	*4*	*2*	*1*

a) *Skizzieren Sie die Punktwolke*

b) *Bestimmen die Regressionsgerade*