Einführung in die Numerik WS2018/19

Dozent: Prof. Dr. Andreas Fischer

29. Oktober 2018

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

Kapitel I

Interpolation

1. Grundlagen

Aufgabe:
Gegeben sind $n+1$ Datenpaare $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, alles reelle Zahlen und paarweise verschieden. Gesucht ist eine Funktion $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, die die Interpolationsbedingungen

$$F(x_0) = f_0, \ \dots, \ F(x_n) = f_n \tag{1}$$

genügt.

Definition (Stützstellen, Stützwerte)
Die x_0 bis x_n werden Stützstellen genannt.

Die f_0 bis f_n werden Stützwerte genannt.

Die oben gestellte Aufgabe wird zum Beispiel durch

$$F(x) = \begin{cases} 0 & x \notin \{x_0, \dots, x_n\} \\ f_i & x = x_i \end{cases}$$

gelöst. Weitere Möglichkeiten sind: Polygonzug, Treppenfunktion, Polynom, ...

- In welcher Menge von Funktionen soll F liegen?
- Gibt es im gewählten Funktionenraum für beliebige Datenpaare eine Funktion F, die den Interpolationsbedingungen genügt (eine solche Funktion heißt Interpolierende)?
- Ist die Interpolierende in diesem Raum eindeutig bestimmt?
- Welche weiteren Eigenschaften besitzt die Interpolierende, zum Beispiel hinsichtlich ihrer Krümmung oder der Approximation einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $f_k = f(x_k)$ für $k = 0, \dots, n$
- Wie sollte man die Stützstellen wählen, falls nicht vorgegeben?
- Wie lässt sich die Interpolierende effizient bestimmen, gegebenenfalls auch unter der Berücksichtigung, dass neue Datenpaare hinzukommen oder dass sich nur die Stützwerte ändern?

■ **Beispiel 1.1**

k	0	1	2	3	4	5
x_k in s	0	1	2	3	4	5
f_k in °C	80	85,8	86,4	93,6	98,3	99,1

Interpolation im

- Raum der stetigen stückweise affinen Funktionen
- Raum der Polynome höchstens 5. Grades
- Raum der Polynome höchstens 4. Grades (Interpolation im Allgemeinen nicht lösbar, Regression nötig)

2. Interpolation durch Polynome

Π_n bezeichne den Vektorraum der Polynome von Höchstgrad n mit der üblichen Addition und Skalarmultiplikation. Für jedes $p \in \Pi_n$ gibt es $a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R}$, sodass

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \tag{2}$$

und umgekehrt.

2.1. Existenz und Eindeutigkeit

Satz 2.1
Zu $n+1$ Datenpaaren $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen existiert genau ein Polynom $p \in \Pi_n$, dass die Interpolationsbedingung Gleichung (1) erfüllt.

Beweis.

- Existenz: Sei $j \in \{0, \dots, n\}$ und $L_j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

$$L_j(x) := \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} = \frac{(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x_j - x_0) \cdot \dots \cdot (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdot \dots \cdot (x_j - x_n)}$$

das LAGRANGE-Basispolynom vom Grad n. Offenbar gilt $L_j \in \Pi_n$ und

$$L_j(x_k) = \begin{cases} 1 & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases} = \delta_{jk} \tag{3}$$

Definiert man $p : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ durch

$$p(x) := \sum_{j=0}^{n} f_j \cdot L_j(x) \tag{4}$$

so ist $p \in \Pi_n$ und außerdem erfüllt p wegen Gleichung (3) die Interpolationsbedingung Gleichung (1)

- Eindeutigkeit: Angenommen es gibt Interpolierende $p, \tilde{p} \in \Pi_n$ mit $p \neq \tilde{p}$. Dann folgt $p - \tilde{p} \in \Pi_n$ und $(p - \tilde{p})(x_k) = p(x_k) - \tilde{p}(x_k) = 0$ für $k = 0, \dots, n$. Also hat $(p - \tilde{p})$ mindestens $n + 1$ Nullstellen, hat aber Grad n. Das heißt, dass $(p - \tilde{p})$ das Nullpolynom sein muss. □

Definition (Interpolationspolynom)
Das Polynom, dass die Interpolationsbedingung erfüllt, heißt Interpolationspolynom zu $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$.

▶ Bemerkung 2.2

- Die Darstellung Gleichung (4) heißt LAGRANGE-Form des Interpolationspolynoms.
- Um mittels Gleichung (4) einen Funktionswert $p(x)$ zu berechnen, werden $\mathcal{O}(n^2)$ Operationen genötigt; bei gleichabständigen Stützstellen kann man diesen Aufwand auf $\mathcal{O}(n)$ verringern. Ändern sich die Stützwerte, kann man durch Wiederverwendung von den $L_j(x)$ das $p(x)$ in $\mathcal{O}(n)$ Operationen berechnen.
- Man kann zeigen, dass L_0 bis L_n eine Basis von Π_n bilden.

2.2. Newton-Form des Interpolationspolynoms

$$p(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + c_n(x - x_0)\ldots(x - x_{n-1}) \tag{5}$$

mit Koeffizienten $c_0, \ldots, c_n \in \mathbb{R}$. Die Berechnung des Koeffizienten c_j kann rekursiv durch Ausnutzen der Interpolationsbedingung Gleichung (1) erfolgen. Für c_0 erhält man

$$f_0 \stackrel{!}{=} p(x_0) = c_0$$

Seien c_0 bis c_{j-1} bereits ermittelt. Dann folgt:

$$f_j \stackrel{!}{=} p(x_j) = \underbrace{c_0 + \sum_{k=1}^{j-1} c_k(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{k-1})}_{\text{bekannt}} + c_j \underbrace{(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})}_{\text{bekannt}}$$

▶ **Bemerkung 2.3**

- Der Aufwand um die Koeffizienten $c_0, \ldots, c_n$ zu ermitteln ist $\mathcal{O}(n^2)$. Kommt ein Datenpaar hinzu, kann man Gleichung (5) um einen Summanden erweitern und mit $\mathcal{O}(n)$ Operationen c_{n+1} bestimmen.
- Sind die Koeffizienten $c_0, \ldots, c_n$ in Gleichung (5) bekannt, dann benötigt man zur Berechnung von $p(x)$ $\mathcal{O}(n)$ Operationen.
- Die Polynome $N_0, \ldots, N_n : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

  $$N_0 = 1 \quad \text{und} \quad N_j = (x - x_0)\ldots(x - x_{j-1})$$

  heißen Newton-Basispolynome und bilden eine Basis von Π_n.

Die Koeffizienten $c_0, \ldots, c_n$ ergeben sich wegen Gleichung (2) auch als Lösung des folgenden linearen Gleichungssystems:

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 1 & (x_1 - x_0) & & & \\ 1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \ldots & \prod_{i=0}^{n-1}(x_n - x_i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Die Systemmatrix dieses linearen Gleichungssystems ist eine reguläre untere Dreiecksmatrix.

Zu effizienten Berechnung eines Funktionswertes $p(x)$ nach Gleichung (5) mit gegebenen Koeffizienten

$c_0, \dots, c_n$ kann man das HORNER-Schema anwenden. Überlegung für $n = 3$.

$$\begin{aligned} p(x) &= c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + c_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &= c_0 + (x - x_0)\Big[c_1 + (x - x_1)\left[c_2 + (x - x_2)c_3\right]\Big] \end{aligned}$$

Für beliebiges n liefert das den folgenden Algorithmus:

■ **Algorithmus 2.4 (Horner-Schema für Newton-Form)**

Input: n, x, c_0,..., c_n, x_0,..., x_n

```
p = c_n
do j = n-1, 0, -1
  p = c_j + (x - x_j)p
end do
```

2.3. Interpolationsfehler

Definition (Maximum-Norm)

Die Norm

$$\|g\|_\infty := \max_{x \in [a,b]} |g(x)| \quad \text{für } g \in C[a, b]$$

definiert die Maximum-Norm in $C[a, b]$.

Satz 2.5

Sei $f \in C[a, b]$. Dann existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein Polynom p_ε mit $\|f - p_\varepsilon\| \leq \varepsilon$.

Also liegt die Menge aller Polynome (beliebig hohen Grades) direkt in $C[a, b]$.

Definition 2.6 (Stützstellensystem)

Stützstellensystem : $a \leq x_0^{(n)} < \dots < x_n^{(n)} \leq b$. Weiterhin bezeichne $p_n \in \Pi_n$ das zu den Datenpaaren $(x_k^{(n)}, f(x_k^{(n)}))$ gehörende eindeutig bestimmte Interpolationspolynom.

Satz 2.7 (Satz von Faber 1914)

Zu jedem Stützstellensystem gibt es $f \in C[a, b]$, sodass (p_n) nicht gleichmäßig gegen f konvergiert. $\|p_n - f\|_\infty \to 0$ bedeutet, dass (p_n) gleichmäßig gegen f konvergiert.

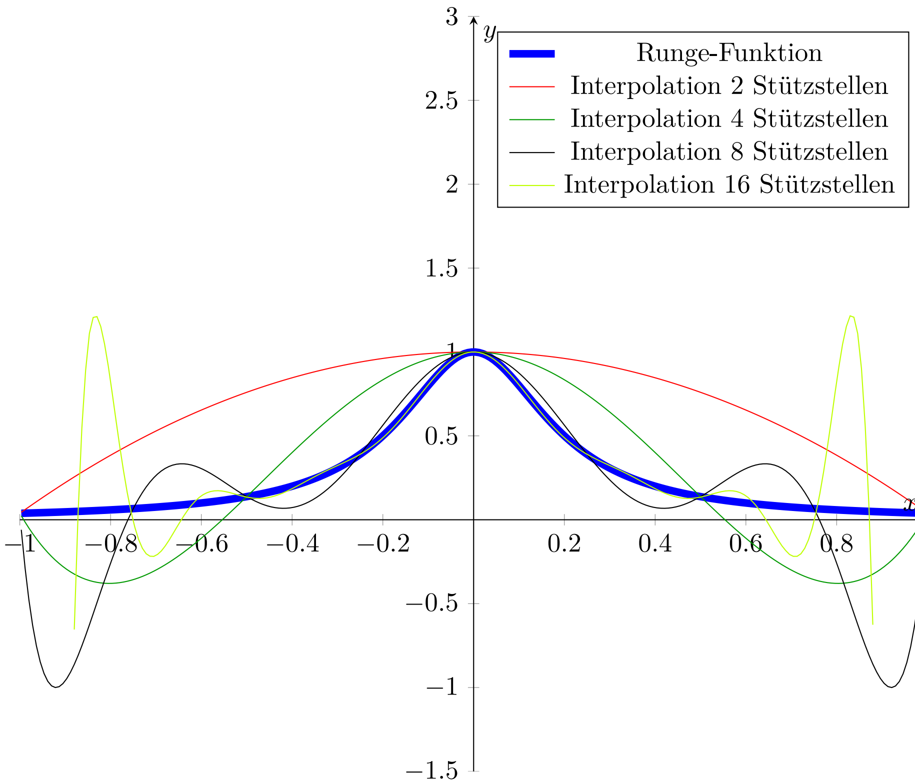
Nach einem Resultat von ERDÖS/VERTESI (1980) gilt sogar, dass $(p_n(x))$ fast überall divergiert.

■ **Beispiel 2.8 (Runge)**

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$

äquidistante Stützstellen $x_0, \dots, x_n$, $p \in \Pi_n$ als Interpolationspolynom

Stützstellen	interpoliertes Polynom
2	$1 - \frac{25x^2}{26}$
4	$3,31565x^4 - 4,27719x^2 + 1$
8	$53,6893x^8 - 102,815x^6 + 61,3672x^4 - 13,203x^2 + 1$
16	$15403,1x^{16} - 49713,5x^{14} + 63743,8x^{12} - 41870x^{10} + 15206x^8 - 3100,35x^6 + 351,984x^4 - 22,7759x^2 + 1$



Anmerkung
Wer mit Mathematica selber diese Polynome berechnen will, muss folgende Befehle benutzen:

- Funktion definieren: `f[x_]:=1/(1+25x^2)`
- Interpolationspolynome ausrechnen: `Expand[InterpolatingPolynomial[Table[{i,f[i]},{i,-1,-1,Schrittweite}],{x}]]`
- plotten: `Plot[f[x],InterpolatingPolynomial[Table[{i,f[i]},{i,-1,-1,Schrittweite}],{x}],{x,-1,1}]`

Satz 2.9
Sei $f \in C^{n+1}[a,b]$ und gelte $a \le x_0 < ... < x_n \le b$. Mit $p_n \in \Pi_n$ werde das zu den Datenpaaren $(x_0, f(x_0)), ..., (x_n, f(x_n))$ gehörende Interpolationspolynom bezeichnet. Dann existiert zu jedem $x \in [a,b]$ eine Zahl $\xi \in (a,b)$, so dass

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!} w(x) \quad \text{für alle } x \in [a,b]$$
$$\text{wobei } w(x) = (x - x_0) \cdot ... \cdot (x - x_n)$$

Beweis. Für $x = x_k$ mit $k = 0, ..., n$ ist nicht zu zeigen, da p_n die Interpolationsbedingung erfüllt. Sei nun $x \in [a,b]$ fest gewählt mit $x \notin \{x_0, ..., x_n\}$. Weiter seien

$$K = \frac{f(x) - p_n(x)}{w(x)} \quad \text{und} \quad F: \begin{cases} [a,b] \to \mathbb{R} \\ t \mapsto f(t) - p_n(t) - Kw(t) \end{cases}$$

Man stellt unter Beachtung der Interpolationsbedingung fest, dass $F(x_0) = F(x_1) = ... = F(x_n) = 0$ und $F(x) = 0$. Also besitzt F mindestens $n+2$ paarweise verschiedene Nullstellen in $[a,b]$. Da $F \in C^{n+1}[a,b]$ erhält man durch $n+1$-fache Anwendung des Satzes von Rolle, dass $F^{(n+1)}$ mindestens eine Nullstelle $\xi(x)$ in (a,b) besitzt. Also folgt

$$0 = F^{(n+1)}(\xi(x)) = f^{(n+1)}(\xi(x)) - \underbrace{p_n^{(n+1)}(\xi(x))}_{=0} - K \underbrace{w^{(n+1)}(\xi(x))}_{\text{Konstante}}$$

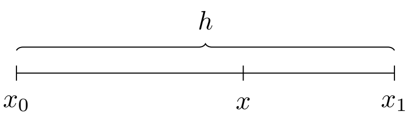
Da $w^{(n+1)} = (n+1)!$, erhält man

$$K = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}$$

Da $x \in [a,b]$ beliebig gewählt war, ist die Behauptung bewiesen. □

■ **Beispiel 2.10**
Sei $f \in C^2[a,b]$ mit $\|f\|_\infty \le M$. Weiter sei $a = x_0 < x_1 = x_0 + h = b$. Mit Satz 2.9 folgt:

$$\begin{aligned} |f(x) - p_2(x)| &= \left| \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - x_0)(x - x_1) \right| \\ &\le \frac{1}{2} M \cdot \lambda(x) h \cdot (1 - \lambda(x)) h \\ &\le \frac{1}{2} M \cdot h^2 \underbrace{\lambda(x)(1 - \lambda(x))}_{\le 1/4} \\ &\le \frac{1}{8} M \cdot h^2 \end{aligned}$$



$\Rightarrow x = x_0 + \lambda \cdot (x_1 - x_0) = \lambda x_1 + (1 - \lambda) x_0$

3. Interpolation durch Polynomsplines

3.1. Polynomsplines

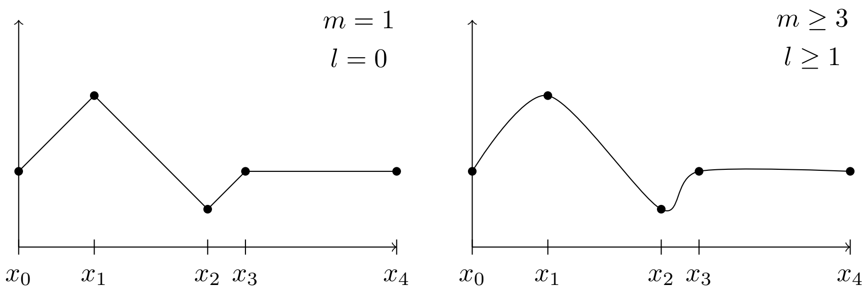
Zur Abkürzung bezeichne Δ eine Zerlegung des Intervall $[a, b]$ durch die Stützstellen $a =: x_0 < ... < x_n := b$.

Definition 3.1 (Polynomspline)
Ein Polynomspline vom Grad $m \in \mathbb{N}$ und Glattheit $l \in \mathbb{N}$ zur Zerlegung Δ ist eine Funktion $s \in C^l[a, b]$ mit

$$s_k := s|_{[x_k, x_{k+1}]} \in \Pi_n \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$

Dabei bezeichnet $s|_{[x_k, x_{k+1}]}$ die Einschränkung von s auf das Intervall $[x_k, x_{k+1}]$. Die Menge aller Splines wird mit $\mathcal{S}^l_m(\Delta)$ bezeichnet.

Folglich ist ein Polynomspline $s \in \mathcal{S}^l_m(\Delta)$ auf jedem der Teilintervall $[x_k, x_{k+1}]$ ein Polynom vom Höchstgrad m. Außerdem ist $s \in \mathcal{S}^l_m(\Delta)$ in allen Punkten $x \in [a, b]$ (also auch in den Stützstellen) l-mal stetig differenzierbar. $\mathcal{S}^l_m(\Delta)$ ist mit der üblichen Addition und Multiplikation ein Vektorraum. Speziell ist $\mathcal{S}^0_1(\Delta)$ die Menge aller stetigen stückweise affin linearen Funktionen.



3.2. Interpolation durch kubische Polynomsplines

Gegeben sei eine Zerlegung Δ und die Stützwerte $f_0, ..., f_n$. Gesucht ist eine Funktion $s \in \mathcal{S}^l_3(\Delta)$ mit $l = 1, 2$ derart, dass

$$s(x_k) = f_k \quad \text{für } k = 0, ..., n \tag{6}$$

Jede derartige Funktion heißt kubischer Interpolationsspline .

Konstruktion eines solchen Splines:

$$h_k := x_{k-1} - x_k \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$
$$m_k := s'(x_k) \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$

Wegen $l \in \{1, 2\}$ ist s zunächst stetig differenzierbar. Wegen $s_k = s|_{[x_k, x_{k+1}]}$ für $k = 0, ..., n-1$ und $m = 3$ kann man folgenden Ansatz für s_k benutzen:

$$s_k(x) = a_k(x - x_k)^3 + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k) + d_k \tag{7}$$

Aus den Interpolationsbedingungen Gleichung (6) und der stetigen Differenzierbarkeit aller Funktionen in $s \in \mathcal{S}_m^l(\Delta)$ für $l \geq 1$ ergeben sich folgende Forderungen an s_k, $k = 0, ..., n-1$:

$$\begin{aligned} s_k(x_k) = f_k \quad &\text{und} \quad s_k(x_{k+1}) = f_{k+1} \\ s_k'(x_k) = m_k \quad &\text{und} \quad s_k'(x_{k+1}) = m_{k+1} \end{aligned} \tag{8}$$

Diese liefern:

$$\begin{aligned} d_k &= s_k(x_k) = f_k \\ c_k &= s_k'(x_k) = m_k \end{aligned} \tag{9}$$

und damit:

$$\begin{aligned} s_k(x_{k+1}) &= a_k h_k^3 + b_k h_k^2 + m_k h_k + f_k = f_{k+1} \\ s_k'(x_{k+1}) &= 3a_k h_k^2 + 2b_k h_k + m_k = m_{k+1} \end{aligned}$$

Damit ergeben sich a_k und b_k als eindeutige Lösung für das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} h_k^3 & h_k^2 \\ 3h_k^2 & 2h_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{k+1} - f_k - m_k f_k \\ m_{k+1} - m_k \end{pmatrix} \tag{10}$$

Die Determinante ist $-h_k^4 \neq 0$.

Satz 3.2
Sei eine Zerlegung Δ des Intervalls $[a, b]$ gegeben. Dann gibt es für beliebig gewählte reelle Zahlen $f_0, ..., f_n$ und $m_0, ..., m_n$ einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^1(\Delta)$, der den Interpolationsbedingungen

$$s'(x_0) = m_0, ..., s'(x_n) = m_n$$

genügt. Außerdem gilt: $s|_{[x_k, x_{k+1}]} = s_k$ für k=0,...,n-1 mit s_k entsprechend Gleichung (7), wobei sich a_k, b_k, c_k, d_k aus Gleichung (9) und Gleichung (10) ergeben.

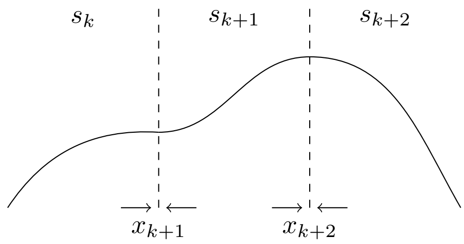
Für die Wahl der m_k gibt es verschiedene Möglichkeiten, zum Beispiel:

- Falls Ableitungswerte der zu interpolierenden Funktion f bekannt sind, kann man $m_k = f'(x_k)$ setzen.
- Man wählt $m_0, ..., m_n$ so, dass s zweimal stetig differenzierbar ist, das heißt $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$ statt $s \in \mathcal{S}_3^1(\Delta)$ gilt.

3.3. Interpolation mit kubischen C^2-Splines

Damit ein kubischer Interpolationsspline s zu $\mathcal{S}_3^2(\Delta)$ gehört, muss neben den Forderungen in Gleichung (8) die Stetigkeit von s'' an den Stützstellen $x_1, ..., x_{n-1}$ gewährleistet sein. Also hat man zusätzliche Bedingungen

$$s_k''(x_{k+1}) = s_{k+1}''(x_{k+1}) \quad \text{für } k = 0, ..., n-2$$



Mit Gleichung (7) ergibt sich $s''(x) = 6a_k(x - x_0) + 2b_k$ für $x \in [x_k, x_{k+1}]$ und damit $s_k''(x_{k+1}) = 6a_k h_k + 2b_k$ und $s_{k+1}''(x_{k+1}) = 2b_{k+1}$, also

$$3a_k h_k + b_k = b_{k+1} \quad \text{für } k = 0, ..., n-2 \tag{11}$$

Aus Gleichung (10) folgt

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{-2}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) + \frac{1}{h_k^2}(m_k + m_{k+1}) \\ b_k &= \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) - \frac{1}{h_k}(2m_k + m_{k+1}) \end{aligned}$$

für $k = 0, ..., n-1$. Wegen Gleichung (11) erhält man für $k = 0, ..., n-2$

$$\begin{aligned} &\frac{-6}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3}{h_k}(m_k + m_{k+1}) + \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) - \frac{1}{h_k}(2m_k + m_{k+1}) \\ &= \frac{-6}{h_{k+1}^2}(f_{k+2} - f_{k+1}) - \frac{1}{h_{k+1}}(2m_{k+1} + m_{k+2}) \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_k}(m_k + 2m_{k+1}) + \frac{1}{h_{k+1}}(2m_{k+1} + m_{k+2}) &= \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3}{h_{k+1}^2}(f_{k+2} - f_{k+1}) \\ \text{bzw.} \quad h_{k+1}m_k + 2(h_{k+1} + h_k)m_{k+1} + h_k m_{k+2} &= \frac{3h_{k+1}}{h_k}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3h_k}{h_{k+1}}(f_{k+2} - f_{k+1}) \end{aligned}$$

Also müssen die $n+1$ Zahlen $m_0, ..., m_n$ den $n-1$ Gleichungen des linearen Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \lambda_0 & 2 & \mu_0 & & & \\ & \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \\ \vdots \\ r_{n-2} \end{pmatrix}$$

genügen, wobei λ_k, μ_k, r_k durch

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{h_{k+1}}{h_k + h_{k+1}} \\ \mu_k &= \frac{h_k}{h_k + h_{k+1}} \\ r_k &= \frac{3h_{k+1}}{h_k(h_k + h_{k+1})}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3h_k}{h_{k+1}(h_k + h_{k+1})}(f_{k+2} - f_{k+1}) \end{aligned}$$

für $k = 0, ..., n-2$ gegeben sind. Die Systemmatrix und die erweiterte Systemmatrix haben den Rang $n-1$. Somit ist das Gleichungssystem lösbar, besitzt aber keine eindeutige Lösung. Um solche zu erhalten, kann man zusätzliche Bedingungen stellen, etwa

(a) **natürliche Randbedingungen:**

$$s''(x_0) = s''(x_n) = 0 \tag{12}$$

Diese sind gleichbedeutend mit

$$s_0''(x_0) = 6a_0(x - x_0) + 2b_0 = 0 \quad \text{und} \quad s_{n-1}''(x_n) = 6a_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + 2b_{n-1} = 0$$

Also folgt

$$b_0 = 0 \quad \text{und} \quad 3a_{n-1}h_{n-1} + b_{n-1} = 0$$

Nutzt man noch die Darstellung für b_0 sowie für a_{n-1} und b_{n-1}, so folgt

$$2m_0 + m_1 = \frac{3}{h_0}(f_1 - f_0) \quad \text{und} \quad m_{n-1} + 2m_n = \frac{3}{h_{n-1}}(f_n - f_{n-1})$$

Fügt man beide Gleichungen geeignet zum obigen System hinzu, erhält man ein lineares Gleichungssystem mit einer regulären trigonales Systemmatrix. Dieses kann in $\mathcal{O}(n)$ Operationen gelöst werden.

(b) **Vollständige Randbedingungen:** Sind $f'(a)$ und $f'(b)$ bekannt, dann können die zusätzlichen Bedingungen

$$s'(x_0) = f'(a) \quad \text{und} \quad s'(x_n) = f'(b) \tag{13}$$

mittels $m_0 = f'(a)$ und $m_n = f'(b)$ geeignet in das Gleichungssystem eingefügt werden, so dass man analog zu Fall (a) eine trigonale reguläre Systemmatrix erhält.

(c) **Periodische Spline-Interpolation:** Falls

$$f'(a) = f'(b) \tag{14}$$

und $f''(a) = f''(b)$ gilt, dann sind

$$s'(x_0) = s'(x_n) \quad \text{und} \quad s''(x_0) = s''(x_n) \tag{15}$$

sinnvolle Randbedingungen, woraus sich zwei zusätzliche lineare Gleichungen zur Ergänzung des Gleichungssystems ableiten lassen.

(d) (nicht in der Vorlesung) **Not-in-knot Bedingung:** Es soll zusätzlich

$$s_0'''(x_1) = s_1'''(x_1) \quad \text{und} \quad s_{n-2}'''(x_{n-1}) = s_{n-1}'''(x_{n-1})$$

gelten, das heißt s ist auf $[x_0, x_2]$ und auf $[x_{n-2}, x_n]$ ein Polynom dritten Grades. Man erhält daraus die Forderungen $a_0 = a_1$ und $a_{n-2} = a_{n-1}$, woraus sich zusätzliche Gleichungen in den

Variablen m_0, m_1, m_2 und m_{n-2}, m_{n-1}, m_n ergeben.

3.4. Eine Minimaleigenschaft kubischer C^2-Interpolationssplines

Durch

$$\langle f, g\rangle := \int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x \quad \text{bzw.} \quad \|g\|_2 := \sqrt{\int_a^b g(x)^2\mathrm{d}x} \quad \text{für } f, g \in L^2[a, b]$$

ist ein Skalarprodukt bzw. eine Norm in $L^2[a, b]$ definiert.

Satz 3.3
Seien $f \in C^2[a, b]$, Δ eine Zerlegung von $[a, b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (14)) erfüllt, gilt:

$$\|s''\|_2^2 = \|f''\|_2^2 - \|f'' - s''\|_2^2 \leq \|f''\|_2^2$$

Beweis. Durch Nachrechnen sieht man

$$\int_a^b (f''(x))^2\mathrm{d}x - \int_a^b (f''(x) - s''(x))^2\mathrm{d}x = \int_a^b (s''(x))^2\mathrm{d}x + 2\int_a^b \left[f''(x) - s''(x)\right] s''(x)\mathrm{d}x$$

Es wird nun $J := \int_a^b [f''(x) - s''(x)]\, s''(x)\mathrm{d}x = 0$ gezeigt. Mit Hilfe partieller Integration folgt

$$J = \left[f'(x) - s'(x)\right] s''(x)|_a^b - \int_a^b \left[f'(x) - s'(x)\right] s'''(x)\mathrm{d}x$$

wobei s''' auf jedem Teilintervall $[x_k, x_{k+1}]$ konstant ist. Dies ergibt wegen Gleichung (6)

$$\begin{aligned}\int_a^b \left[f'(x) - s'(x)\right] s'''(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1} s'''\left(x_k + \frac{h_k}{2}\right) \int_{x_k}^{x_{x+1}} f'(x) - s'(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} s'''\left(x_k + \frac{h_k}{2}\right) \left(\left[f(x_{k+1}) - s(x_{k+1})\right] - \left[f(x_k) - s(x_k)\right]\right) \\ &= 0\end{aligned}$$

und damit

$$J = \left[f'(x) - s'(x)\right] s''(x)|_a^b = \left[f'(b) - s'(b)\right] s''(b) - \left[f'(a) - s'(a)\right] s''(a)$$

Nutzt man nun noch Gleichung (12), Gleichung (13) bzw. Gleichung (14) mit Gleichung (15), so folgt $J = 0$. □

Anmerkung
- Gleichung (12): natürliche Randbedingungen: $s''(a) = s''(b) = 0$
- Gleichung (13): vollständige Randbedingungen: $s(a') = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$
- Gleichung (14) und Gleichung (15): periodische Randbedingungen: $s'(a) = s'(b)$, $s''(a) = s'(b)$, $f'(a) = f'(b)$

3.5. Interpolationsfehler bei kubischer C^2-Interpolation

Anmerkung
Die Cauchy-Schwarz-Ungleichung hat folgende Form:

$$|\langle f, g\rangle| \leq \|f\|_2 \cdot \|g\|_2$$

Satz 3.4
Seien $f \in C^2[a,b]$, Δ eine Zerlegung von $[a,b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (14)) erfüllt, gilt:

$$\|f - s\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^{3/2} \|f''\|_2$$

wobei $h := \max\{h_0, ..., h_{n-1}\}$.

Beweis. Die Funktion $r := f - s$ hat wegen Gleichung (6) die $n+1$ Nullstellen $x_0, ..., x_n$. Der maximale Abstand benachbarter Nullstellen ist h. Nach dem Satz von Rolle besitzt r' mindestens n Nullstellen. Der Abstand zweier Nullstellen von r' ist durch $2h$ nach oben beschränkt. Sei $z \in [a,b]$ so gewählt, dass $|r'(z)| = \|r'\|_\infty$. Dann gilt $|z - z^0| \leq h$ für die z am nächsten liegende Nullstelle z^0 von r'. O.B.d.A. sei $z^0 \leq z$. Mit der Cauchy-Scharz-Ungleichung folgt:

$$\begin{aligned}
\|r'\|_\infty^2 &= |r'(z) - \underbrace{r'(z^0)}_{z^0 \text{ NST}}|^2 \\
&\overset{*}{=} \left| \int_{z^0}^{z} r''(x) \cdot 1 \mathrm{d}x \right|^2 \\
&\underset{\text{UG}}{\overset{\text{CS}}{\leq}} \int_{z^0}^{z} r''(x)^2 \mathrm{d}x \cdot \underbrace{\int_{z^0}^{z} 1^2 \mathrm{d}x}_{=z-z^0 \leq h} \\
&\leq h \|r''\|_2^2
\end{aligned} \tag{16}$$

$*$: Anwendung des Hauptsatzes der Integralrechnung

Sei nun $y \in [a,b]$ so gewählt, dass $|r(y)| = \|r\|_\infty$. Dann gilt $|y - y_0| \leq h/2$ für die y am nächsten liegende Nullstelle y^0 von r. O.B.d.A. sei $y^0 \leq y$. Mit Gleichung (16) ergibt sich

$$\|r\|_\infty = |r(y) - r(y^0)| = \left| \int_{y^0}^{y} r'(x) \mathrm{d}x \right| \leq \max |r'(x)| \cdot \int_{y^0}^{y} \mathrm{d}x \leq \frac{1}{2} \|r'\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^{3/2} \|r''\|_2$$

Mit Satz 3.3 hat man $\|r''\|_2 \leq \|f\|_2$ und damit die Behauptung. □

▶ Bemerkung 3.5
Besitzt f eine höhere Glattheit, so kann die obige Fehlerschranke bezüglich der h-Potenz verbessert werden. Es lassen sich ferner Abschätzungen für $\|f' - s'\|_\infty$ und $\|f'' - s''\|_\infty$ herleiten.

Kapitel II

numerische Integration (Quadratur)

1. Integration von Interpolationspolynomen

Für eine Funktion $f \in C[a,b]$ ist eine Näherung für den Wert des bestimmten Integrals

$$J(f) := \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

gesucht. Seien $a \leq x_0 < ... < x_n \leq b$ Stützstellen und $f_k = f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Weiter bezeichne $p_n \in \Pi_n$ das zugehörige Interpolationspolynom. Dann kann man

$$Q_n(f) := J(p_n) = \int_a^b p_n(x)\mathrm{d}x$$

als Näherung für $J(f)$ verwenden. Mit der Lagrange-Form des Interpolationspolynoms sieht man, dass

$$Q_n(f) = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f_k \cdot L_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} f_k \cdot \int_a^b L_k(x)\mathrm{d}x$$

das heißt die Quadraturformel $Q_n(f)$ ist die gewichtete Summe von Funktionswerten der Funktion f mit den Gewichten $\int_a^b L_k(x)\mathrm{d}x$.

2. Newton-Cotes-Formeln

Falls die Stützstellen gleichabständig sind mit $x_0 = a$ und $x_n = b$, das heißt

$$x_{k+1} = x_k + h \quad \text{für } k = 0, ..., n-1 \tag{1}$$

mit der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ gilt, so nennt man $Q_n(f)$ geschlossene Newton-Cotes-Formel . Ist $a < x_0$ und $x_n < b$ und gilt Gleichung (1) mit $h = \frac{b-a}{n+2}$, so bezeichnet man $Q_n(f)$ als offene Newton-Cotes-Formel . Im Folgenden wollen wir uns auf den Fall geschlossener Newton-Cotes-Formeln beschränken.

3. spezielle Newton-Cotes-Formeln

Für $n = 1$ erhält man die Trapezformel mit $x_0 = a$, $x_1 = b$ und $h = b - a$ wie folgt:

$$Q_1(f) = f_0 \int_a^b L_0(x)\mathrm{d}x + f_1 \int_a^b L_1(x)\mathrm{d}x$$

Mit

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{b - x}{h} \quad \text{und} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - a}{h}$$

$$\int_a^b L_0(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{h}\int_a^b (b - x)\mathrm{d}x = \frac{1}{h}\left(bx - \frac{1}{2}x^2\right)\bigg|_a^b = \frac{1}{h}\left(\frac{b^2}{2} - ab + \frac{a^2}{2}\right) = \frac{h}{2}$$

$$\int_a^b L_1(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}$$

folgt

$$Q_1(f) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1)$$

Für Polynomgrad $n = 2$ erhält man auf ähnliche Weise die Simpson-Formel (auch Kepler'sche Fassregel genannt):

$$Q_2(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

Für Polynomgrade bis $n = 6$ findet man weitere Formeln in der Literatur. Formeln nur $n > 6$ werden aus numerischen Gründen nicht verwendet. Es können dann negative Gewichte auftreten.

Satz 3.1

(a) Sei $f \in C^2[a, b]$. Dann gilt:

$$|Q_1(f) - J(f)| \leq \frac{1}{12}h^3\|f''\|_\infty$$

(b) Sei $f \in C^4[a, b]$. Dann gilt:

$$|Q_2(f) - J(f)| \leq \frac{1}{12}h^5\|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis. (a) Für die Trapezformel erhält man mit Satz 2.9

$$|Q_1(f) - J(f)| = \left|\int_a^b f(x) - p_1(x)\mathrm{d}x\right| \leq \frac{\|f''\|_\infty}{2!}\int_a^b |(x - a)(x - b)|\mathrm{d}x$$

Mit $y := x - \frac{a+b}{2}$ ergibt sich:

$$x - a = y + \frac{b-a}{2} = y + \frac{h}{2} \quad \text{und} \quad x - b = y + \frac{a-b}{2} = y - \frac{h}{2}$$

$$\int_a^b |(x-a)(x-b)| \mathrm{d}x = -\int_{-h/2}^{h/2} \left(y + \frac{h}{2}\right)\left(y - \frac{h}{2}\right) \mathrm{d}y = -\left(\frac{1}{3}y^3 - \frac{1}{4}h^2 y\right)\Bigg|_{-h/2}^{h/2} = \frac{1}{6}h^3$$

(b) Zur Analyse des Quadraturfehlers der SIMPSON-Formel untersuchen wir zunächst

$$W := \int_a^b (x-a)(x-x_1)(x-b)\mathrm{d}x$$
$$\bar{W} := \int_a^b |(x-a)(x-x_1)(x-b)|\mathrm{d}x$$

Mit der Substitution $y := x - x_1$ folgen $x - a = y + h$, $x - x_1 = y$ und $x - b = y - h$, also

$$W = \int_a^b (y+h)y(y-h)\mathrm{d}y = 0 \tag{2}$$

da die zu integrierende Funktion $y \mapsto (y+h)y(y-h)$ ungerade ist. Weiter erhält man

$$\overline{W} = \int_{-h}^{h} |(y+h)y(y-h)|\mathrm{d}y = -2\int_0^h (y^2 - h^2)y\mathrm{d}y = \frac{1}{2}h^4 \tag{3}$$

Wegen Satz 2.9 haben wir

$$f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi(x))}{3!}w(x) = \frac{1}{6}f'''(x_1)w(x) + \frac{1}{6}(f'''(\xi(x)) - f'''(x))w(x)$$

für alle $x \in [a,b]$. Insbesondere ist daher $x \mapsto f'''(\xi(x))$ eine Funktion aus $C^4[a,b]$. Durch Integration folgt mit Gleichung (2):

$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b f(x) - p_2(x)\mathrm{d}x\right| &= \frac{1}{6}\left|f'''(x_1)\int_a^b w(x)\mathrm{d}x + \int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1))w(x)\mathrm{d}x\right| \\
&= \frac{1}{6}\left|\int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1))w(x)\mathrm{d}x\right| \\
&\leq \max_{x\in[a,b]} \left\{\left|f'''(x) - f'''(x_1)\right| \cdot \int_a^b |w(x)|\mathrm{d}x\right\}
\end{aligned} \tag{4}$$

Da $f \in C^[a,b]$ erhält man mit dem Mittelwertsatz

$$|f'''(x) - f'''(x_1)| = |f^{(4)}(\zeta(x))| \cdot |x - x_1| \leq h\|f^{(4)}\|_\infty$$

mit $\zeta \in (a,b)$. Deshalb und wegen Gleichung (3) folgt aus Gleichung (4) weiter

$$|Q_2(f) - J(f)| = \left|\int_a^b f(x) - p_2(x)\mathrm{d}x\right| \leq \frac{1}{12}h^5\|f^{(4)}\|_\infty \tag{5}$$

□

▶ **Bemerkung 3.2**

Durch verfeinerte Abschätzungen kann man in Satz 3.1 b) $|Q_2(f) - J(f)| \leq \frac{1}{90}h^5\|f^{(4)}\|_\infty$ erreichen. Auch für Quadraturformeln $Q_n(f)$ mit $n > 2$ lassen sich entsprechende Ergebnisse für den Quadraturfehler herleiten, insbesondere hat der Quadraturfehler für $n = 3$ mit $f \in C^4[a,b]$ die Ordnung

h^5 und für $n = 4$ mit $f \in C^6[a, b]$ die Ordnung h^7.

4. Zusammengesetzte Newton-Cotes-Formeln

5. Gauss'sche Quadraturformeln

Kapitel III

direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme

1. Gauss'scher Algorithmus für quadratische Systeme

2. Lineare Quadratmittelprobleme

3. Kondition linearer Gleichungssysteme

Kapitel IV

Kondition von Aufgaben und Stabilität von Algorithmen

1. Maschinenzahlen und Rundungsfehler

2. Fehleranalyse

Kapitel V

Newton-*Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme*

1. Das Newton-Verfahren

2. Gedämpftes Newton-Verfahren

Kapitel VI

lineare Optimierung

1. Ecken und ihre Charakterisierung

2. Simplex-Verfahren

3. Die Tableauform des Simplex-Verfahrens

4. Revidiertes Simplex-Verfahren

5. Bestimmung einer ersten zulässigen Basislösung

Anhang

Anhang A: Listen

A.1. Liste der Theoreme

A.2. Liste der benannten Sätze, Lemmata und Folgerungen

Index