

Numerik 1

Prof. Schaedle

April 27, 2019

I Numerische Integration

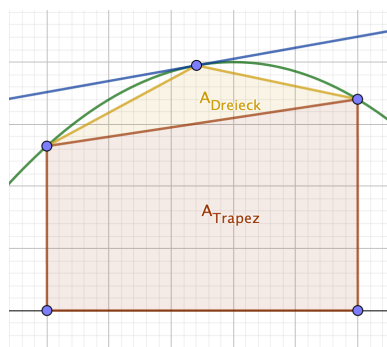
1 Einführung

Problem 1.1.

Gegeben $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $a, b \in \mathbb{R}$. Berechne $\int_a^b f(x) dx$

Beispiel 1.2.

1. Archimedes (282-212 v.Chr.): Fläche unter einer Parabel



$$A_{\text{Parabel}} = A_{\text{Trapez}} + \frac{4}{3} A_{\text{Dreieck}}$$

2. Leibniz + Newton (1670):

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a),$$

wobei $\frac{d}{dx} F(x) = f(x)$

3. Riemann (1850):

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{|\Delta| \rightarrow 0} \sum_{j=1}^n f(\xi_j)(x_j - x_{j-1}),$$

wobei $\Delta = (x_0, \dots, x_n)$ Gitter Zerlegung von $[a, b]$, $a = x_0 < \dots < x_n = b$, $\xi_j \in [x_{j-1}, x_j]$ und $|\Delta| := \max_{j=1, \dots, n} |x_j - x_{j-1}|$. Das Riemannintegral existiert, falls:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0 : |\Delta| < \delta \Rightarrow \left| \int_a^b f(x) dx - \sum_{j=1}^n f(\xi_j)(x_j - x_{j-1}) \right| < \varepsilon$$

Bemerkung 1.3 (Approximation von Integralen).

1. (linke) Rechtecksregel:

$$\int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+h} f(x)dx \approx hf(x_{j-1})$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^n \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^n f(x_{j-1})(x_j - x_{j-1})$$

2. Mittelpunktsregel:

$$\int_{x_j}^{x_j+h} f(x)dx \approx f\left(\frac{x_j + x_j + h}{2}\right)h$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=1}^n f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right)(x_j - x_{j-1})$$

Da mit Hilfe der Transformationsformel sich jedes Integral $\int_{x_{j-1}}^{x_j}$ auf ein Integral \int_a^b transformieren lässt, betrachten wir ohne Einschränkungen Integrale von 0 bis 1. Nutze dazu die Abb. $[a, b] \rightarrow [x_{j-1}, x_j], t \mapsto x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1})$.

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx = \int_0^1 \underbrace{f(x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1}))}_{:=g_{j-1}(t)}(x_j - x_{j-1})dt = \int_0^1 g_{j-1}(t)(x_j - x_{j-1})dt$$

Definition 1.4 (Quadraturformel).

Eine s -stufige Quadraturformel zur Approximation von $\int_0^1 g(t)dt$ mit Knoten c_i und Gewichten b_i für $i = 1, \dots, s$ ist gegeben durch

$$\sum_{i=1}^s b_i g(c_i) \left(\approx \int_0^1 g(t)dt \right)$$

Beispiel 1.5.

1. Rechtecksregel: $s = 1, b_1 = 1, c_1 = 0$

$$\int_0^1 g(t) \approx b_1 g(c_1) = g(0)$$

2. *Mittelpunktsregel:* $s = 1, b_1 = 1, c_1 = \frac{1}{2}$

$$\int_0^1 g(t) dt \approx g\left(\frac{1}{2}\right)$$

3. *Trapezregel:* $s = 2, b_1 = b_2 = \frac{1}{2}, c_1 = 0, c_2 = 1$

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{2}g(0) + \frac{1}{2}g(1)$$

4. *Simpsonregel:* $s = 3, b_1 = \frac{1}{6}, b_2 = \frac{2}{3}, b_3 = \frac{1}{6}, c_1 = 0, c_2 = \frac{1}{2}, c_3 = 1$

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{6} \left(g(0) + 4g\left(\frac{1}{2}\right) + g(1) \right)$$

Herleitung: Man legt eine Parabel p durch die Punkte $(0, g(0)), (\frac{1}{2}, g(\frac{1}{2})), (1, g(1))$ und integriert p von 0 bis 1.

$$p(t) = g(0)(1-t)2(\frac{1}{2}-t) + g(\frac{1}{2})(1-t)4t + g(1)(\frac{1}{2}-t)2t$$

$$\Rightarrow \int_0^1 p(t) dt = \frac{1}{6}g(0) + \frac{2}{3}g(\frac{1}{2}) + \frac{1}{6}g(1)$$

5. *"pulcherrima et utilissima regula" von Newton:*

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{8} \left(g(0) + 3g(\frac{1}{3}) + 3g(\frac{2}{3}) + g(1) \right)$$

Bemerkung 1.6 (Monte-Carlo Integration).

1. *Eindimensionale Monte-Carlo Integration:*

Sei $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$. Wählt man N unabhängige gleichverteilte Punkte x_i in $[a, b]$ so gilt die Approximation:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (b-a) f(x_j)$$

Nach dem Gesetz der großen Zahlen konvergiert dieser Ausdruck, falls

$$\int_a^b |f(x)| dx < \infty, \int_a^b f^2(x) dx < \infty$$

2. *Mehrdimensionale Monte-Carlo Integration:*

Sei $W = \otimes_{i=1}^d [a_i, b_i]$ ein d -dimensionaler Quader. Wählt man in W unabh. gleichvert. Zufallsvektoren x_i in W , so ist

$$\int_W f(x) dx \approx \frac{1}{N} \text{Vol}(W) \sum_{i=1}^N f(x_i),$$

wobei $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.

Achtung: Dieses gewöhnliche MC-Verfahren konvergiert sehr langsam. Verbesserungen sind z.B.: Importance sampling, Control variates, Antithetic variates und stratified sampling.

2 Ordnung von Quadraturformeln

Definition 2.1.

Eine Quadraturformel (QF) mit Gewichten und Knoten $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ hat **Ordnung** p , falls sie exakt ist für alle Polynome von Grad $\leq p-1$.

$$\mathcal{P} := \left\{ \sum_{i=0}^n a_i X^i, a_i \in \mathbb{R}(\mathbb{C}) \right\}, \quad \text{Menge aller Polynome}$$

Für $q \in \mathcal{P}$ ist $\deg(q)$ der Grad des Polynoms.

Satz 2.2.

Ein QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ für $[0, 1]$ hat Ordnung p genau dann, wenn

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q}$$

für $q = 1, \dots, p$.

Beweis.

” \Rightarrow ”

QF hat Ordnung $p \Rightarrow$ QF ist exakt für $g(t) = t^{q-1}$ für $q = 1, \dots, p$ auf $[0, 1]$

\Rightarrow

$$\sum b_i c_i^{q-1} = \int_0^1 t^{q-1} dt = \left[\frac{t^q}{q} \right]_{t=0}^1 = \frac{1}{q}$$

” \Leftarrow ”

Jedes Polynom von Grad $p - 1$ lässt sich als Linearkombination von $1, t, t^2, \dots, t^{p-1}$. Die Behauptung folgt aus der Linearität in g von

$$\int_0^1 g(t) dt$$

und

$$\sum_{i=1}^s b_i g(c_i)$$

□

Beispiel 2.3.

1. Rechtecksregel: $p = 1$
2. Mittelpunktsregel: $p = 2$
3. Trapezregel: $p = 2$
4. Simpsonregel: $p \geq 3$ nach Konstruktion

$$q = 4 : \quad \frac{1}{6} * 0^3 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{1}{6} * 1^3 = \frac{1}{4}$$

$$q = 5 : \quad \frac{1}{6} * 0^4 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^4 + \frac{1}{6} * 1^4 = \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5}$$

Nach Satz (2.2) ist damit die Ordnung der Simpsonregel $p = 4$.

5. ”pulcherina et utilissima”: Übung

Bemerkung 2.4.

Zu vergebenen paarweise verschiedenen Knoten c_1, \dots, c_s lässt sich mit Satz (2.2) für $p = s$ ein lineares Gleichungssystem für die Gewichte b_1, \dots, b_s aufstellen.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ c_1 & c_2 & \dots & c_s \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & \dots & c_s^{s-1} \end{bmatrix}}_{=V} * \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ \dots \\ 1/s \end{bmatrix}$$

Falls die Vandermonde-Matrix V invertierbar ist, so lassen sich die Gewichte b_1, \dots, b_s bestimmen, sodass die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ mindestens Ordnung s hat.

Definition 2.5.

Eine QF heißt symmetrisch, falls für $i = 1, \dots, s$ gilt:

1. $c_i = 1 - c_{s+1-i}$
2. $b_i = b_{s+1-i}$

Beispiel 2.6 (Symmetrische QF).

Mittelpunktsregel, Trapezregel, Simpsonregel,...

Satz 2.7.

Die maximal erreichbare Ordnung einer symmetrischen QF ist gerade.

Beweis. Sei die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ exakt für Polynome vom Grad $\leq 2m - 2$ (für $m \in \mathbb{N}$), (dann ist die Ordnung $\geq 2m - 1$).

$$\forall g \in \mathcal{P} : \deg(g) \leq 2m - 2 \Rightarrow \sum_{i=1}^s b_i g(c_i) = \int_0^1 g(t) dt$$

Sei $f \in \mathcal{P}$ mit $\deg(f) = 2m - 1$.

Wir zeigen QF ist exakt für f .

$$f(t) = ct^{2m-1} + g(t)$$

für $g \in \mathcal{P}$ mit $\deg(g) \leq 2m - 2$ mit $c \neq 0$.

Trick: $f(t) = c(t - \frac{1}{2})^{2m-1} + \tilde{g}(t)$ mit $\tilde{g} \in \mathcal{P}$ und $\deg(\tilde{g}) \leq 2m - 2$

1. Für \tilde{g} ist die QF exakt

2.

$$\int_0^1 (t - \frac{1}{2})^{2m-1} dt = \left[\frac{1}{2m-2} (t - \frac{1}{2})^{2m-2} \right]_0^1 = 0$$

$$\sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1}$$

Symmetrie \Rightarrow

$$= \sum_{i=1}^s b_{s+1-i} (\frac{1}{2} - c_{s+1-i})^{2m-1}$$

Definiere $j := s + 1 - i$

$$= \sum_{i=1}^s b_i \frac{1}{2} - c_i)^{2m-1} = - \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1}$$

$$\Rightarrow 2 * \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} = 0$$

$$\sum_{i=1}^s b_i f(c_i) = c \sum_{i=1}^s b_i (c_i - \frac{1}{2})^{2m-1} + \sum_{i=1}^s b_i \tilde{g}(c_i)$$

$$= c \int_0^1 (t - \frac{1}{2})^{2m-1} dt + \int_0^1 \tilde{g}(t) dt = \int_0^1 f(t) dt$$

\Rightarrow QF hat mind. Ordnung $2m$.

□

Satz 2.8.

Sind Knoten $c_1 < c_2 < \dots < c_s$ ($c_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, s$) gegeben, so existieren eindeutig bestimmte Gewichte b_1, \dots, b_s derart, dass die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ die maximale Ordnung $p \geq s$ hat.

Es gilt

$$b_i = \int_0^1 l_i(t) dt$$

mit

$$l_i(t) = \frac{\prod_{j=1, j \neq i}^s (t - c_j)}{\prod_{j=1, j \neq i}^s (c_i - c_j)}$$

Beweis. von 2.8

1. Hat die QF die Ordnung $p \geq s$, so ist wegen $\deg(l_i) = s - 1$:

$$\int_0^1 l_i(t) dt = \sum_{j=1}^s b_j l_i(c_j) = b_i$$

2. Zu den Knoten c_1, \dots, c_s definiere b_i wie angegeben. Die QF ist dann exakt für alle Polynome von Grad $\leq s - 1$, da die l_1, \dots, l_s linear unabhängig sind und eine Basis des Vektorraums der Polynome von Grad $\leq s - 1$ bilden.

□

Bemerkung (zu Satz (2.8)).

l_i ist das i -te Lagrangepolynom zu den Knoten c_1, \dots, c_s . Es gilt:

1. $\deg(l_i) = s - 1$
2. $l_i(c_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$, für $j = 1, \dots, s$

3 Quadraturfehler

Allgemeine Voraussetzung: $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ sei hinreichend oft differenzierbar (f ist eine glatte Funktion)

Definition 3.1.

Der Fehler bei der Approximation des Integrals durch die QF ist

$$err = \int_a^b f(x) dx - \sum_{j=0}^{n-1} \left(h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + h_{j+1} c_i) \right)$$

mit $h_{j+1} = x_{j+1} - x_j$

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=0}^{n-1} \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x_j + \tau) d\tau - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + h_{j+1} c_i) \right) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \int_0^1 g_j(\xi) d\xi - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i g_j(c_i) \end{aligned}$$

mit $g_j(\xi) = f(x_j + \xi h_{j+1})$

Der Quadraturfehler auf Teilintervallen $[x_j, x_j + h_{j+1}]$ ist

$$\begin{aligned} E(f, x_j, h_{j+1}) &= \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) \\ &= h_{j+1} \left(\int_0^1 g_j(\xi) d\xi - \sum_{i=1}^s b_i g_j(c_i) \right) \end{aligned}$$

3.2 (Fehlerabschätzung - 1. Versuch).

Falls f auf $[x_0, x_0 + h]$ glatt genug ist und die QF Ordnung p hat, aber nicht Ordnung $p+1$, so erhält man durch Taylorentwicklung um x_0 von $f(x_0 + \xi h) = g_0(\xi)$ und $f(x_0 + c_i h)$:

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \sum_{k \geq 0} \frac{h^{k+1}}{k!} \left(\int_0^1 t^k dt - \sum_{i=1}^s b_i c_i^k \right) f^{(k)}(x_0) \\ &= \frac{h^{p+1}}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) f^{(p)}(x_0) + \underbrace{\mathcal{O}(h^{p+2})}_{\text{Taylorrestglied}} \end{aligned}$$

Die Konstante $C = \frac{1}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right)$ heißt Fehlerkonstante.

Ist h klein genug, sodass das Taylorrestglied im Vergleich zu $h^{p+1} C f^{(p)}(x_0)$ vernachlässigbar ist, so gilt:

$$err = \sum_{j=0}^{n-1} E(f, x_j, h)$$

mit $x_j = x_0 + jh$

$$\begin{aligned} &\approx Ch^p \sum_{j=0}^{n-1} h f^{(p)}(x_j) \\ &\approx Ch^p \int_a^b f^{(p)}(x) dx \\ &= Ch^p (f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a)) \end{aligned}$$

3.3 (Rigorese Fehlerabschätzung).

Satz 1: Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ k -mal stetig differenzierbar ($f \in C^k([a, b])$) und habe die QF Ordnung p , so gilt für $h < b - a$ und $k \leq p$

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 K_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau,$$

wobei der Peanokern $K_k(\tau)$ durch

$$K_k(\tau) := \frac{(1 - \tau)^k}{k!} - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!},$$

$$\text{mit } (\sigma)_+^{k-1} = \begin{cases} \sigma^{k-1} & \sigma > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \text{ gegeben ist.}$$

Beweis. Taylorentwicklung mit Integralrestglied und Transformation

$$f(x_0 + th) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t - \tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau$$

eingesetzt in (*) und die Verwendung von

$$\int_0^{c_i} (c_i - \tau)^{k-1} g(\tau) d\tau = \int_0^1 (c_i - \tau)_+^{k-1} g(\tau) d\tau$$

liefern

$$\begin{aligned}
E(f, x_0, h) &= h \int_0^1 \left(\sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right) dt \\
&\quad - h \sum_{i=1}^s b_i \left(\sum_{j=0}^{k-1} \frac{(c_i h)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^{c_i} \frac{(c_i - \tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + c_i h) d\tau \right) \\
&\stackrel{k \leq p}{=} h h^k \left(\int_0^1 \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau dt \right) \\
&\quad - h h^k \left(\sum_{i=1}^s \int_0^1 \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right) \\
&= h h^k \left(\int_0^1 \int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau dt \right) \\
&\quad - h h^k \left(\sum_{i=1}^s b_i \int_0^1 \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \right) \\
&= h^{k+1} \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} dt - \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \right) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \\
&= h^{k+1} \int_0^1 K_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau,
\end{aligned}$$

da

$$\int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} dt = \int_0^1 \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} = \left[\frac{1}{k!} (t-\tau)^k \right]_{t=\tau}^1 = \frac{1}{k!} (1-\tau)^k$$

gilt. □

Satz 2: (Eigenschaften des Peanokerns)

Für eine QF der Ordnung p gilt für $k \leq p$ ($k, p \in \mathbb{N}$)

1. $K'_k(\tau) = -K_{k-1}(\tau)$ für $k \geq 2$ und $\tau \neq c_i$ falls $k = 2$
2. $K_k(1) = 0$ für $k \geq 1$, falls $c_i \leq 1$ für $i = 1, \dots, s$
3. $K_k(0) = 0$ für $k \geq 2$, falls $c_i \leq 1$ für $i = 1, \dots, s$

4. $\int_0^1 K_p(\tau) = \frac{1}{p!} \left(\frac{1}{p-1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) =: C$ (Fehlerkonstante C aus (3.2))
5. $K_1(\tau)$ ist stückweise linear mit Steigung -1 und Sprüngen der Höhe b_i an den Stellen c_i

Beweis. Eventuell Übungsaufgabe □

Beispiel: Mittelpunktsregel:

$$\begin{aligned} K_1(\tau) &= \frac{(1-\tau)^1}{1!} - 1 \frac{(\frac{1}{2}-\tau)_+^1}{0!} \\ &= 1-\tau - \left(\frac{1}{2}-\tau\right)_+^0 \\ &= \begin{cases} 1-\tau-1 & \tau < \frac{1}{2} \\ 1-\tau & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_2(\tau) &= \frac{(1-\tau)^2}{2!} - 1 \frac{(\frac{1}{2}-\tau)_+^1}{1!} \\ &= \frac{1}{2}(1-\tau)^2 - \left(\frac{1}{2}-\tau\right)_+^1 \\ &= \begin{cases} \frac{\tau^2}{2} & \tau < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(1-\tau)^2 & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

Satz 3: Sei $f \in C^k([a, b])$ und habe die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$, Ordnung $p \geq k$, so gilt für den Fehler err aus (3.1)

$$|err| \leq h^k(b-a) \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)|, \quad h = \max_{j=1, \dots, n} h_j.$$

Beweis. Mit Satz 1 gilt

$$\begin{aligned} |E(f, x_j, h_{j+1})| &\leq h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| |f^{(k)}(x_j + \tau h_{j+1})| d\tau \\ &\leq h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x \in [x_j, x_j + h_{j+1}]} |f^{(k)}(x)| \end{aligned}$$

Zudem gilt

$$\begin{aligned}
|err| &= \left| \sum_{j=0}^{n-1} E(f, x_j, h_{j+1}) \right| \\
&\leq \sum_{j=0}^{n-1} |E(f, x_j, h_{j+1})| \\
&\leq \underbrace{\sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1}}_{b-a} \underbrace{h_{j+1}^k}_{\leq h^k} \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \underbrace{\max_{x \in [x_j, x_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|}_{\leq \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)|}
\end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung. □

Beispiele

Für die Mittelpunktsregel (maximale Ordnung = 2) erhält man

$$|err| \leq h^2(b-a) \frac{1}{24} \max_{x \in [a, b]} |f^{(2)}(x)|$$

Für die Trapezregel (maximale Ordnung = 2)

$$|err| \leq h^2(b-a) \frac{1}{12} \max_{x \in [a, b]} |f^{(2)}(x)|$$

Für die Simpsonregel (maximale Ordnung = 4)

$$|err| \leq h^4(b-a) \frac{1}{2880} \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|$$

→ Der Fehler wird klein, falls h klein und die Ordnung p groß wird.

4 Quadratur mit hoher Ordnung

Es seien Knoten $c_1 < \dots < c_s$ gegeben. Aus §2 wissen wir:

Es gibt Gewichte b_1, \dots, b_s , sodass $p \geq s$.

Fragen:

- Kann man c_j so wählen, dass $p > s$?

- Wenn ja, wie?
- Wie groß kann p maximal werden?

Ziel: QF mit Ordnung $p = s + m$ für $m \in \mathbb{N}, m > 1$. Sei $g \in \mathcal{P}_{s+m-1}$ (Polynome von Grad $\leq s + m - 1$).

g soll durch die QF exakt integriert werden.

Idee: Dividiere g durch $M(t) = \prod_{i=1}^s (t - c_i)$ "Knotenpolynom"

$\deg(M) = s$

$g(t) = M(t)h(t) + r(t)$ mit Rest r , $\deg(r) \leq s - 1$ und $\deg(h) \leq m - 1$

Dann gilt einerseits

$$\int_0^1 g(t)dt = \int_0^1 M(t)h(t)dt + \int_0^1 r(t)dt$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^s b_i g(c_i) &= \sum_{i=1}^s b_i \underbrace{M(c_i)}_{=0} h(c_i) + \sum_{i=1}^s b_i r(c_i) \\ &= 0 + \int_0^1 r(t)dt, \end{aligned}$$

da $p \leq s$

Damit ist gezeigt:

Satz 4.1.

Sei $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ der Ordnung $p \geq s$. Äquivalent sind:

1. QF hat Ordnung $s + m$
2. $\forall h \in \mathcal{P}_{m-1} : \int_0^1 M(t)h(t)dt = 0$

Korollar 4.2.

Die Ordnung einer s -stufigen QF ist höchstens $2s$.

Beweis (indirekt). Annahme: $p > 2s$

$$(4.1) \Rightarrow \forall h \in \mathcal{P}_s : \int_0^1 M(t)h(t)dt = 0$$

Setze $h = M$, dann ist

$$\int_0^1 M(t)^2 dt = 0$$

↳ zu $\int_0^1 M(t)^2 dt > 0$, da $M(t) \equiv 0$

□

4.3 (Beispiele/Korollare).

1. Jede 3-stufige QF mit Ordnung ≥ 4 muss

$$\begin{aligned} & \int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) dt = 0 \\ \Leftrightarrow & \int_0^1 t^3 + t^2(-c_1 - c_2 - c_3) + t(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 dt \\ & = \frac{1}{4} + \frac{1}{3}(-c_1 - c_2 - c_3) + \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 = 0 \end{aligned}$$

erfüllen, dh.

$$c_3 = \frac{\frac{1}{4} - (c_1 + c_2)\frac{1}{3} + c_1c_2\frac{1}{2}}{\frac{1}{3} - (c_2 + c_1)\frac{1}{2} + c_1c_2}$$

2. Zur Berechnung der Knoten einer 3-stufigen QF der Ordnung 6 verwenden wir (4.2) mit $h(t) = 1, t, t^2$

$$\int_0^1 M(t)h(t) dt = 0$$

$$\begin{aligned} h(t) = 1 & \Rightarrow c_1c_2c_3 - \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{3}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{4} \\ h(t) = t & \Rightarrow \frac{1}{2}c_1c_2c_3 - \frac{1}{3}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{4}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{5} \\ h(t) = t^2 & \Rightarrow \frac{1}{3}c_1c_2c_3 - \frac{1}{4}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) + \frac{1}{5}(c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

Das ist ein nichtlineares Gleichungssystem in c_1, c_2, c_3 .

Trick:

$$\sigma_1 = c_1 + c_2 + c_3$$

$$\sigma_2 = c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3$$

$$\sigma_3 = c_1c_2c_3$$

Das sind die Koeffizienten von $M(t)$ in der Monombasis.

$$M(t) = (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) = t^3 - \sigma_1t^2 + \sigma_2t - \sigma_3$$

und das Gleichungssystem ist linear in $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$
mit Lösung $\sigma_1 = \frac{3}{2}, \sigma_2 = \frac{3}{5}, \sigma_3 = \frac{1}{20}$
und damit ist

$$\begin{aligned} M(t) &= t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{3}{5}t - \frac{1}{20} \\ &= (t - \frac{1}{2})(t - \frac{5 - \sqrt{15}}{10})(t - \frac{5 + \sqrt{15}}{10}) \end{aligned}$$

Glücklicherweise sind die Wurzeln von $M(t)$ in $[0, 1]$. Damit lassen sich die Gewichte mit (2.4) berechnen und wir erhalten

$$\int_0^1 g(t)dt = \frac{5}{18}g\left(\frac{5 - \sqrt{15}}{10}\right) + \frac{8}{18}g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{18}g\left(\frac{5 + \sqrt{15}}{10}\right)$$

Ziel: Konstruktion von QF der Ordnung $2s$ mit Hilfe von orthogonalen Polynomen.

5 Orthogonalpolynome

Bedingung 2. in Satz (4.1)

$$\forall h \in \mathcal{P}_{m-1} : \int_0^1 M(t)h(t) = 0$$

kann als Orthogonalitätsbedingung bzgl. eines Skalarprodukts $\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(t)g(t)dt$ auf dem Vektorraum $L^2([0, 1])$ oder $C([0, 1])$ aufgefasst werden.

Erinnerung:

$$\mathcal{P}_s := \left\{ \sum_{j=0}^s \alpha_j X^j, \alpha_j \in \mathbb{R} \right\}$$

ist ein \mathbb{R} -VR mit $\dim(\mathcal{P}_s) = s + 1$ und Basis $\{1, X, X^2, \dots, X^s\}$

$\langle \cdot, \cdot \rangle : C([0, 1]) \times C([0, 1]) \rightarrow \mathbb{R}, (f, g) \mapsto \int_0^1 f(t)g(t)dt$ ist

1. symmetrisch $\langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle$
2. linear $\langle \alpha f + g, h \rangle = \alpha \langle f, h \rangle + \langle g, h \rangle$

3. positiv definit $\langle f, f \rangle \geq 0$ und $\langle f, f \rangle = 0 \Rightarrow f = 0$

Wie in der linearen Algebra definieren wir f steht senkrecht auf g : $f \perp g \Leftrightarrow \langle f, g \rangle = 0$

Satz 5.1.

QF hat die Ordnung $s + m \Leftrightarrow M$ ist orthogonal auf allen Polynome in \mathcal{P}_{m-1}

Definition 5.2.

Für eine Gewichtsfunktion $\omega : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ mit

1. ω stetig
2. $\forall x \in (a, b) : \omega(x) > 0$
3. $\forall k \in \mathbb{N} : \int_a^b \omega(x) |x|^k dx < \infty$

definieren wir auf den Vektorraum

$$V = \left\{ f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} : f \text{ stetig und } \int_a^b f(x)^2 \omega(x) dx < \infty \right\}$$

das gewichtete Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_\omega := \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx$$

für $f, g \in V$.

Zudem definiere:

$$f \perp_\omega g \Leftrightarrow \langle f, g \rangle_\omega = 0$$

Satz 5.3.

Es existiert eine eindeutige Folge von Polynomen p_0, p_1, \dots mit

1. $\deg(p_k) = k$
2. $\forall q \in \mathcal{P}_{k-1} : p_k \perp q$ für $k \geq 1$
3. $p_k(x) = x^k + r$ mit $\deg(r) \leq k - 1$ "Normierung"

Diese Polynome lassen sich rekursiv berechnen durch

$$\begin{aligned} p_0(x) &:= 1 \\ p_1(x) &:= x \\ p_{k+1}(x) &:= (x - \beta_{k+1})p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x), \quad \text{für } k \geq 2 \end{aligned}$$

Wobei β und γ definiert sind durch:

$$\begin{aligned} \beta_{k+1} &:= \frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle} \\ \gamma_{k+1}^2 &:= \frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} \end{aligned}$$

Beweis. (vgl. Gram-Schmidt Orthogonalisierung LinA)

Sei p_0, \dots, p_k bereits bekannt. Zur Konstruktion von p_{k+1} setzen wir

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) + \sum_{j=0}^k \alpha_j p_j(x)$$

(damit ist 3. erfüllt)

Zur Bestimmung der α_j :

$$1. \quad 0 = \langle p_{k+1}, p_k \rangle = \langle xp_k, p_k \rangle + \alpha_k \langle p_k, p_k \rangle + \underbrace{\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \langle p_j, p_k \rangle}_{=0}$$

$$\Rightarrow \alpha_k = -\frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\langle p_k, p_k \rangle} =: -\beta_{k+1}$$

2.

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p_{k+1}, p_{k-1} \rangle = \langle xp_k, p_{k-1} \rangle + 0 + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle + 0 \\ &= \langle p_k, xp_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle \end{aligned}$$

Aufgrund von 3. \Rightarrow

$$xp_{k-1} = p_k + r$$

mit $\deg(r) \leq k-1$

$$\Rightarrow \langle p_k, xp_{k-1} \rangle = \langle p_k, p_k \rangle + \underbrace{\langle p_k, r \rangle}_{=0}$$

$$\Rightarrow \alpha_{k-1} = -\frac{\langle p_k, p_k \rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle} =: -\gamma_{k+1}^2$$

3. Für $j \leq k-2$:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle p_{k+1}, p_j \rangle = \langle xp_k, p_j \rangle + \alpha_j \langle p_j, p_j \rangle \\ &= \underbrace{\langle p_k, xp_j \rangle}_{=0} + \alpha_j \underbrace{\langle p_j, p_j \rangle}_{\neq 0} \end{aligned}$$

$\langle p_k, xp_j \rangle = 0$ gilt, da $\deg(xp_j) \leq k+1$

Insgesamt haben wir

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \beta_{k+1}p_k(x) - \gamma_{k+1}^2 p_{k-1}(x)$$

□

Bemerkung.

Für eine QF maximaler Ordnung müssen nach Satz (4.1) die Knoten c_i , $i = 1, \dots, s$ so gewählt werden, dass

$$M(t) = \prod_{i=1}^s (t - c_i)$$

das Orthogonalpolynom vom Grad s bezüglich des Skalarprodukts mit $\omega(x) \equiv 1$ auf $[0, 1]$ ist.

Frage: Sind die Wurzeln der Orthogonalpolynome aus (5.3) reell? (Spoiler: Ja)

Satz 5.4.

Sei p_k das Orthogonalpolynom wie in (5.3) definiert (bzgl. $\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)dx$). Alle Wurzeln von p_k sind einfach und liegen im offenen Intervall (a, b) .

Beweis. Sei x_1, \dots, x_r jene Wurzeln in p_k , die reell sind, in (a, b) liegen und bei denen p_k das Vorzeichen wechselt (Wurzeln mit ungerader Vielfachheit).

Klar ist: $r \leq k$.

Sei

$$g(x) = \prod_{j=1}^r (x - x_j)$$

Dann ist

$$\langle p_k, g \rangle = \int_a^b \underbrace{p_k(x) g(x)}_{\text{Wechselt das Vorzeichen in (a,b) nicht}} \omega(x) dx \neq 0$$

Andererseits ist p_k orthogonal zu allen Polynomen vom Grad $\leq k-1$

$\Rightarrow r = \deg(g) \geq k$

$\Rightarrow r = k$

□

Beispiel 5.5 (Orthogonale Polynome).

Bezeichnung	(a, b)	$w(x)$	Name
P_k	$(-1, 1)$	1	Legendrepolynome
T_k	$(-1, 1)$	$(1 - x^2)^{-1/2}$	Tschebyscheff-Polynome
$P_k^{(\alpha, \beta)}$	$(-1, 1)$	$(1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$	Jacobi-Polynome $\alpha, \beta > -1$
$L_k^{(\alpha)}$	$(0, \infty)$	$x^\alpha e^{-x}$	Laguerre-Polynome
M_k	$(-\infty, \infty)$	e^{-x^2}	Hermitepolynome

Bemerkung: Teilweise sind andere Normierungen üblich $P_k(1) = 1$, $T_k(x) = 2^{k-1}x^k + \dots$

6 Ein adaptives Programm

Gegeben sei eine QF mit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ mit Ordnung $p = 2s$ (die höchste Ordnung, die es gibt) z.B. $s = 15$

Ziel: Ein Computerprogramm `adagaussqf(f, a, b, Tol)`, welches für eine Funktion f auf dem Intervall $[a, b]$ eine Approximation an $\int_a^b f(x)dx$ berechnet, sodass der Fehler $\leq \text{Tol}$ ist (für viele Funktionen).

Konstruiere eine Zerlegung $\Delta = \{a = x_0 < \dots < x_n = b\}$ des Intervalls, sodass für die Approximation

$$I_\Delta := \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_i + c_i h_{j+1})$$

gilt

$$|I_\Delta - \int_a^b f(x)dx| \leq \text{Tol} \int_a^b |f(x)|dx$$

Schwierigkeiten:

- Schätzung des Fehlers
- Wahl der Zerlegung des Intervalls

6.1 (Zerlegung des Intervalls).

Für ein Teilintervall $[x_j, x_{j+1}]$ von $[a, b]$ lassen sich

$$\text{res}[x_j, x_{j+1}] := h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_{j+1})$$

und

$$\text{resabs}[x_j, x_{j+1}] := h_{j+1} \sum_{i=1}^s |b_i f(x_j + c_i h_{j+1})|$$

berechnen.

Angenommen wir können eine Schätzung des Fehlers $\text{err}[x, x_{j+1}]$ berechnen mit

$$\text{err}[x, x_{j+1}] \approx \text{res}[x, x_{j+1}] - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx,$$

dann bietet sich folgendes Verfahren zur Konstruktion einer Zerlegung an:

1. Berechne $\text{res}[a, b]$, $\text{resabs}[a, b]$ und $\text{err}[a, b]$.

Falls

$$|\text{err}[a, b]| \leq \text{Tol} \text{resabs}[a, b]$$

Gebe $\text{res}[a, b]$ zurück.

Ansonsten:

2. Zerlege $[a, b]$ in

$$I_0 = \left[a, \frac{b-a}{2} \right]$$

und

$$I_1 = \left[\frac{b-a}{2}, b \right]$$

und berechne

$\text{res } I_0$, $\text{resabs } I_0$, $\text{err } I_0$ und

$\text{res } I_1$, $\text{resabs } I_1$, $\text{err } I_1$

$n = 2$.

3. Falls

$$\sum_{j=0}^{n-1} |err I_j| \leq Tol \sum_{j=0}^{n-1} resabs I_j$$

Gebe

$$\sum_{j=0}^{n-1} res I_j$$

zurück. Ansonsten:

Unterteile das Intervall $I_k = [a_k, b_k]$, in dem der Fehler maximal ist in zwei Teilintervalle

$$I_l = \left[a_k, \frac{b_k - a_k}{2} \right]$$

und

$$I_m = \left[\frac{b_k - a_k}{2}, b_k \right]$$

und berechne:

$res I_l, resabs I_l, err I_l$ und

$res I_m, resabs I_m, err I_m$

$n = n + 1$

Gehe zu 3)

6.2 (Schätzung des Fehlers).

Ziel: Berechne Approximation an

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + h_{j+1} c_i)$$

ohne zusätzliche Funktionsauswertungen.

Idee: Konstruiere eingebettete QF, d.h. QF zu den selben Knoten c_i mit Gewichten \hat{b}_i und Ordnung $\hat{p} < p$.

Bemerkung: Falls $p = 2s$ ist, so gilt $\hat{p} \leq s - 1$ (wäre $\hat{p} \geq s$, so wäre nach (2.8) $\hat{b}_i = b_i$).

Eine Approximation des Fehlers für die eingebettete QF ist durch

$$\begin{aligned} \text{diff}[x_j, x_{j+1}] &= h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - h_{j+1} \sum_{i=1}^s \hat{b}_i f(x_j + c_i h_{j+1}) \\ &= h_{j+1} \sum_{i=1}^s (b_i - \hat{b}_i) f(x_j + c_i h_{j+1}) \end{aligned}$$

gegeben. Es gilt

$$\begin{aligned} \text{diff}[x_j, x_{j+1}] &= h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx \\ &\quad - \left(h_{j+1} \sum_{i=1}^s \hat{b}_i f(x_j + c_i h_{j+1}) - \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx \right) \\ &= \text{Fehler der QF } (b_i, c_i)_{i=1}^s - \text{Fehler der QF } (\hat{b}_i, c_i)_{i=1}^s \\ &= C_1 h_{j+1}^{p+1} + C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1} \end{aligned}$$

Falls h_{j+1} klein ist, ist $C_1 h_{j+1}^{p+1} \ll C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1}$.

Drei Möglichkeiten den Fehler zu schätzen:

- I) $\text{err}[x_j, x_{j+1}] \approx \text{diff}[x_j, x_{j+1}]$. Sehr pessimistisch
- II) $\text{err}[x_j, x_{j+1}] \approx (\text{diff}[x_j, x_{j+1}])^2$, falls $p = 2s$ und $\hat{p} = s - 1$. Wenig verlässlich
- III) Verwende dritte eingebettete QF

(\hat{b}_i, c_i) der Ordnung 6

zu (b_i, c_i) der Ordnung $30 = 2s$, $s = 15$

und (\hat{b}_i, c_i) der Ordnung 14

$$\hat{\text{diff}} = h_{j+1} \sum_{i=1}^s (b_i - \hat{b}_i) f(x_j + c_i h_{j+1}) \approx C_3 h^7$$

$$\begin{aligned} \text{err}[x_j, x_{j+1}] &= \text{diff}[x_j, x_{j+1}] \left(\frac{\text{diff}}{\hat{\text{diff}}} \right)^2 \\ &= C_2 \frac{C_2^2}{C_3^2} h_{j+1}^{15} \left(\frac{h_{j+1}^{15}}{h_{j+1}^7} \right) = C h_{j+1}^{31} \end{aligned}$$

7 Gauß- und Lobatto Quadraturformeln

Ziel: Konstruktion einer s -stufigen QF der Ordnung $p = 2s$.

Für $M(t) = CP_s(2t - 1)$, wobei P_s das Legendrepolynom vom Grad s ist (siehe (5.5)), $C \in \mathbb{R}$, erhalten wir mit (5.4) und (4.1):

Satz 7.1.

Für jedes $s \in \mathbb{N}$ gibt es eine eindeutige QF der Ordnung $p = 2s$, die sogenannte Gauß-QF. Ihre Knoten sind die Wurzeln von $P_s(2t - 1)$, ihre Gewichte sind durch (2.8) gegeben.

Beispiel.

$$\begin{aligned} s = 1 & \quad \text{Mittelpunktsregel} \\ s = 2 & \quad c_{1,2} = \frac{1}{2} \mp \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad b_1 = \frac{1}{2} = b_2 \\ s = 3 & \quad (4.3) \quad 2) \end{aligned}$$

7.2 (Bezeichnung der Knoten der Gauß-QF).

Details: Siehe Homepage (Übungsaufgabe).

Idee: Die Wurzeln der Polynome, die durch Rekursion (5.3) erzeugt werden, sind die Eigenwerte einer symmetrischen Tridiagonalmatrix (Matrix: Siehe Homepage).

Zusammengefasst:

Satz: Es seien P_0, \dots, P_n Polynome definiert wie in Satz (5.3).

$\lambda \in \mathbb{R}$ ist eine Nullstelle von $P_n \Leftrightarrow \lambda$ ist ein Eigenwert der Tridiagonalmatrix T_n . $\Phi_n(\lambda)$ ist dann der Eigenvektor zum Eigenwert λ .

T_n und $\Phi_n(\lambda)$ sind gegeben durch:

$$T_n = \begin{bmatrix} \beta_1 & 1 & & & \\ \gamma_2^2 & \beta_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{n-1}^2 & \beta_{n-1} & 1 \\ & & & \gamma_n^2 & \beta_n \end{bmatrix}$$

$$\Phi_n(\lambda) = [P_0 \quad \dots \quad P_{n-1}]^T$$

In Numerik II lernen Sie Verfahren kennen, um die Eigenwerte zu berechnen.

7.3 (Lobatto Quadraturformeln).

Ein Vorteil der Simpsonquadraturformel war, dass $c_1 = 0$ und $c_s = 1$ gilt.

Damit muss man den Integranden in x_j nur einmal auswerten. Zur Konstruktion einer s -stufigen QF der Ordnung $p = 2s - 2$ mit $c_1 = 0$ und $c_s = 1$ setzt man

$$M(t) = P_s(2t - 1) - P_{s-2}(2t - 1)$$

Da die Legendre-Polynome folgende Rekursion erfüllen

$$P_0(x) = 1 \quad P_1(x) = x$$

$$(n + 1)P_{n+1}(x) = (2n + 1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

ist

$$P_s(1) = 1 \quad \text{und} \quad P_s(-1) = (-1)^s$$

und damit

$$M(0) = 0 = M(1)$$

Die restlichen Nullstellen (oder Wurzeln) von $M(t)$ sind reell, einfach und liegen in $(0,1)$, wie man analog zu (5.4) zeigt.

Damit gilt:

Satz Für $s \in \mathbb{N}$, $s \geq 2$ gibt es eine eindeutige s -stufige QF der Ordnung $2s - 2$ mit $c_1 = 0$ und $c_s = 1$

II Interpolation und Approximation

Problemstellung A Zu gegebenen $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ berechne Polynom p vom Grad $\leq n$ mit

$$p(x_j) = y_j, \quad j = 0, \dots, n$$

Problemstellung B $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Finde einfach auszuwertende Funktion $p : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, etwa ein Polynom, stückweises Polynom, rationale Funktion, sodass $f - p$ klein ist.

- i) $f(x) = p(x)$ für endlich viele vorgegebene Punkte x
- ii) $\int_a^b (f(x) - p(x))^2 dx$ soll minimal sein.
- iii) $\max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)|$ soll minimal sein.

8 Newtonsche Interpolationsformel

Beispiel 8.1.

$n=1$:

$(x_0, y_0), (x_1, y_1), p \in \mathcal{P}_1$ das beide Punkte verbindet.

$$p(x) = y_0 + (x - x_0) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

$n=2$:

$(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$

$$p(x) = y_0 + (x - x_0) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x - x_0)(x - x_1)$$

Bestimme a so, dass $p(x_2) = y_2$

$$y_2 \stackrel{!}{=} y_0 + (x_2 - x_0) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$

$$a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2 - y_0 - (x_2 - x_1) \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - y_1 + y_0$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{x_2 - x_0} \left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right)$$

Definition 8.2 (dividierte Differenzen).

Für $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen x_j definieren wir

$$y[x_j] := y_j \quad (= \delta^0 y[x_j])$$

$$\delta y[x_j, x_{j+1}] := \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} = \frac{\delta^0 y[x_{j+1}] - \delta^0 y[x_j]}{x_{j+1} - x_j}$$

$$\delta^2 y[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] := \frac{\delta y[x_{j+1}, x_{j+2}] - \delta y[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j}$$

$$\delta^k y[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k}] := \frac{1}{x_{j+k} - x_j} (\delta^{k-1} y[x_{j+1}, \dots, x_{j+k}] - \delta^{k-1} y[x_j, \dots, x_{j+k-1}])$$

Schema:

$$\begin{array}{rcl}
 x_0 & y_0 & \\
 & \delta^1 y[x_0, x_1] & \\
 x_1 & y_1 & \delta^2 y[x_0, x_1, x_2] \\
 & \delta^1 y[x_1, x_2] & \delta^3 y[x_0, x_1, x_2, x_3] \\
 x_2 & y_2 & \delta^2 y[x_1, x_2, x_3] \\
 & \delta^1 y[x_2, x_3] & \\
 x_3 & y_3 &
 \end{array}$$

Bemerkung 8.3.

Falls die x_i äquidistant, dh. $x_i = x_0 + ih$ so ist:

$$\begin{aligned}
 \delta y[x_i, x_{i+1}] &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h} =: \frac{1}{h} \Delta y_i \\
 \delta^2 y[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] &= \frac{\frac{1}{h} \Delta y_{i+1} - \frac{1}{h} \Delta y_i}{2h} = \frac{1}{2h^2} \Delta^2 y_i \\
 \delta^k y[x_i, \dots, x_{i+k}] &= \frac{1}{k! h^k} \Delta^k y_i,
 \end{aligned}$$

wobei $\Delta^k := \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i$.

Satz 8.4 (Newtonsche Interpolationsformel).

Zu paarweise verschiedenen reellen x_i , $i = 0, \dots, n$, existiert ein eindeutiges Polynom $p \in \mathcal{P}_n$ durch die Punkte (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n$ (d.h. $p(x_i) = y_i$ für $i = 0, \dots, n$). Es lässt sich berechnen durch:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= y[x_0] + (x - x_0) \delta y[x_0, x_1] + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \delta^n y[x_0, \dots, x_n] \\
 &= \sum_{i=0}^n \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \delta^i y[x_0, \dots, x_i]
 \end{aligned}$$

Beweis. (Induktion)

IA $n = 1$ (und $n = 2$) vgl. Beispiel (1.1)

IS $n - 1 \rightarrow n$

$$p_0(x) = y[x_0] + (x - x_0) \delta y[x_1, x_0] + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-2}) \delta^{n-1} y[x_0, \dots, x_{n-1}]$$

ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

$$\deg(p_0) \leq n - 1$$

zu $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_{n-1}, y_{n-1})$.

Für den Ansatz

$$p(x) = p_0(x) + a(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})$$

ergibt die Forderung $p(x_n) = y_n$

$$a = \frac{y_n - p_0(x_n)}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})}$$

Da a eindeutig ist, ist p eindeutig.

Es bleibt zu zeigen: $a = \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$

Sei dazu ein Polynom $p_1(x)$, welches durch $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ läuft, mit $\deg(p_1) \leq n - 1$. Nach Induktionsannahme gilt

$$\begin{aligned} p_1(x) &= y[x_1] + (x - x_1)\delta^1 y[x_1, x_2] + \dots + (x - x_1) \dots (x - x_{n-1})\delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] \\ &= x^{n-1}\delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] + r \end{aligned}$$

mit $\deg(r) \leq n - 2$.

Setze Polynom

$$p(x) := \frac{x_n - x}{x_n - x_0} p_0(x) + \frac{x - x_0}{x_n - x_0} p_1(x)$$

mit $\deg(p) \leq n$ durch $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$.

Das gilt, da:

$$p(x_0) = p_0(x_0) = y_0$$

$$p(x_n) = p_1(x_n) = y_n$$

Für $i = 1, \dots, n - 1$:

$$p(x_i) = \frac{x_n - x_i}{x_n - x_0} \underbrace{p_0(x_i)}_{y_i} + \frac{x_i - x_0}{x_n - x_0} \underbrace{p_1(x_i)}_{y_i} = y_i$$

Andererseits:

$$p(x) = ax^n + r \quad \text{mit } \deg(r) \leq n - 1$$

Koeffizientenvergleich:

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_0, \dots, x_{n-1}] + \frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] \\ &= \delta^n y[x_0, \dots, x_n] \end{aligned}$$

□

8.5 (Horner Schema).

Zur Auswertung des Interpolationspolynom p an der Stelle x verwendet man

$$p(x) = y[x_0] + (x - x_0) (\delta y[x_0, x_1] + (x - x_1) (\delta^2 y[x_0, x_1, x_2] + (x - x_2) (\dots (\delta^n y[x_0, \dots, x_n]))))$$

Algorithmus:

$$s = \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$$

for $k = n - 1, \dots, 0$ **do**

$$s = \delta^k y[x_0, \dots, x_k] + (x - x_k)s$$

end for

Beispiel 8.6.

i	x_i	y_i	$\delta^1 y[x_0, x_1]$	$\delta^2 y[x_0, x_1, x_2]$	$\delta^3 y[x_0, \dots, x_3]$	$\delta^4 y[x_0, \dots, x_4]$
0	-1	0	$\frac{1-0}{0-(-1)} = 1$			
1	0	1		$\frac{0-1}{2-(-1)} = -\frac{1}{3}$		
			0		$\frac{\frac{2}{3}-(-\frac{1}{3})}{3-(-1)} = \frac{1}{4}$	
2	2	1		$\frac{2-0}{3-0} = \frac{2}{3}$		$\frac{-\frac{2}{5}-\frac{1}{4}}{5-(-1)} = -\frac{13}{120}$
			$\frac{3-1}{3-2} = 2$		$\frac{-\frac{4}{3}-\frac{2}{3}}{5-0} = -\frac{2}{5}$	
3	3	3		$\frac{-2-2}{5-2} = -\frac{4}{3}$		
			$\frac{-1-3}{5-3} = -2$			
4	5	-1				

Das Interpolationspolynom ist also

$$p(x) = 0 + (x+1) * 1 - \frac{1}{3}(x+1)(x) + \frac{1}{4}(x+1)x(x-2) + (x+1)x(x-2)(x-3) \left(-\frac{13}{120}\right)$$

bzw. nach Horner Schema

$$p(x) = 0 + (x+1) \left(1 + x \left(-\frac{1}{3} + (x-2) \left(\frac{1}{4} + (x-3) \left(-\frac{13}{120} \right) \right) \right) \right)$$

Werte $p(x)$ an der Stelle 1 aus:

$$\begin{aligned} -\frac{13}{120} * (-2) &= \frac{26}{120} \\ \left(\frac{1}{4} + \frac{26}{120}\right) (-1) &= -\frac{56}{120} = -\frac{7}{15} \\ \left(-\frac{7}{15} - \frac{1}{3}\right) 1 &= -\frac{12}{15} = -\frac{4}{5} \\ \left(-\frac{4}{5} + 1\right) 2 &= \frac{2}{5} = p(1) \end{aligned}$$

9 Fehler bei der Polynominterpolation

Problem: $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ werde interpoliert in Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ durch $p \in \mathcal{P}_n$ mit $p(x_i) = f(x_i)$ für $i = 0, \dots, n$.

Wie groß ist der Fehler $f(x) - p(x)$?

Satz 9.1.

Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ $(n+1)$ -mal stetig differenzierbar, $p \in \mathcal{P}_n$ mit $p(x_i) = f(x_i)$ ($i = 0, \dots, n$) das Interpolationspolynom zu paarweise verschiedenen Stützstellen $x_i \in [a, b]$ ($i = 0, \dots, n$). Dann gilt:

$$\forall x \in [a, b] \exists \xi = \xi(x) \in (a, b) : f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

Beweis. Siehe (9.4)

□

Beispiel 9.2 (Berechnung von Logarithmentafeln: Briggs, 17. Jhd).

$$f(x) = \log_{10}(x), \quad x \in [55, 58]$$

Wähle Stützstellen:

$$x_0 = 55, \quad x_1 = 56, \quad x_2 = 57, \quad x_3 = 58$$

Es seien

$$\log_{10}(55), \log_{10}(56), \log_{10}(57) \text{ und } \log_{10}(58)$$

bereits bekannt. Berechne eine Näherung von f an bei $\log_{10}(56.5)$

→ Interpolationspolynom p :

$$\log_{10}(65.5) = 1.752048448$$

$$p(56.5) = 1.75204845$$

$$f'(x) = \frac{1}{\ln(10)x}$$

$$f''(x) = -\frac{1}{\ln(10)x^2}$$

$$f^{(3)}(x) = \frac{2}{\ln(10)x^3}$$

$$f^{(4)}(x) = -\frac{6}{\ln(10)x^4}$$

Für $x \in [55, 58]$:

$$|f^{(4)}(x)| \leq \frac{6}{55^4 \ln(10)} \Rightarrow$$

$$|\log_{10}(56.5) - p(56.5)| \leq 1.5 * 0.5 * 0.5 * 1.5 * \frac{6}{55^4 \ln(10) \frac{1}{4!}}$$

$$\approx 6.7 * 10^{-9}$$

Für den Beweis von (9.1) wird folgendes Lemma benötigt:

Lemma 9.3.

Sei $f \in C^n([a, b])$ und sei für paarweise verschiedene $x_i \in [a, b]$ ($i = 0, \dots, n$) $y_i := f(x_i)$. Dann existiert $\xi \in (\min_i(x_i), \max_i(x_i))$, sodass

$$\delta^n y[x_0, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \quad (x_0 < x_1 < \dots < x_n)$$

Beweis. Sei p ein Interpolationspolynom zu $(x_i, y_i)_{i=0}^n$. Setzt man $d := p - f$, so gilt $d(x_i) = 0$ für $i = 0, \dots, n$.

n -maliges anwenden des Mittelwertsatzes liefert paarweise verschiedene ξ_i , ($i = 0, \dots, n-1$) mit $d'(\xi_i) = 0$ für $\xi_i \in (\min_j(x_j), \max_j(x_j))$.

Dasselbe Argument angewandt auf d' liefert $\eta_0, \dots, \eta_{n-2}$ mit $d''(\eta_i) = 0$ für $i = 0, \dots, n-2$.

Wiederhole dies bis:

Es existiert ρ_0 mit $d^{(n)}(\rho_0) = 0$

$\Rightarrow f^{(n)}(\rho_0) = p^{(n)}(\rho_0) = n! \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$,

da $\delta^n y[x_0, \dots, x_n]$ der Koeffizient von x^n in p ist. □

Bemerkung.

Für $n = 1$ ist Lemma (9.3) der Mittelwertsatz (oder Satz von Rolle) aus Analysis I:

$$\exists \xi : \frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2} = f'(\xi)$$

9.4 (Beweis von (9.1)).

Sei $\bar{x} \in [a, b]$ beliebig.

1. **Fall** $\bar{x} = x_i$ für ein $i \in \{0, \dots, n\}$, so ist wegen $p(x_i) - f(x_i) = 0$ nichts zu zeigen.
2. **Fall** $\bar{x} \neq x_i$ für alle $i \in \{0, \dots, n\}$. Sei \bar{p} das Interpolationspolynom mit $\deg(\bar{p}) \leq n + 1$ zu $(x_i, f(x_i))_{i=0}^n$ und $(\bar{x}, f(\bar{x}))$. Die Newton'sche Interpolationsformel liefert dann

$$\begin{aligned} \bar{p}(x) &= p(x) + \prod_{i=0}^n (x - x_i) \delta^{n+1} y[x_0, \dots, x_n, \bar{x}] \\ &\stackrel{(9.3)}{=} p(x) + \prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \end{aligned}$$

Für $x = \bar{x}$ gilt $\bar{p}(\bar{x}) = f(\bar{x})$. Damit ist Satz (9.1) für $x \in [a, b]$ gezeigt. \square

Fragen:

- Für welche Wahl der Stützstellen x_i ($i = 0, \dots, n$, n fest) ist

$$\max_{x \in [a, b]} \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right|$$

minimal? (Siehe Abschnitt 10)

- Wie wirken sich Fehler in den Funktionsauswertungen (etwa Messfehler oder Rechenfehler) auf das Interpolationspolynom aus?

Satz 9.5 (Lagrange Interpolationsformel).

Das Interpolationspolynom p zu $(x_i, y_i)_{i=0}^n$ ist gegeben durch

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

mit

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}$$

$$\text{Beweis. } \deg(l_i) = n, l_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } j = i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Rightarrow p(x_j) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x_j) = y_j \quad \square$$

Bemerkung.

Lagranges und Newtons Interpolationsformeln liefern beide das gleiche Polynom nur in unterschiedlichen Darstellungen.

Definition 9.6.

$$\Lambda_n := \max_{x \in [a, b]} \sum_{i=0}^n |l_i(x)|$$

heißt die **Lebesgue Konstante** zu den Stützstellen x_i , $i = 0, \dots, n$ auf dem Intervall $[a, b]$.

Damit gilt:

Satz 9.7.

Sei p das Interpolationspolynom (vom Grad $\leq n$) zu $(x_i, y_i)_{i=0}^n$ und \tilde{p} das Interpolationspolynom zu $(x_i, \tilde{y}_i)_{i=0}^n$, so gilt:

$$\max_{x \in [a, b]} |p(x) - \tilde{p}(x)| \leq \Lambda_n \max_{i=0, \dots, n} |y_i - \tilde{y}_i|$$

Beweis. klar \square

Beispiel 9.8.

- Für äquidistante Stützstellen $x_i = a + i \frac{b-a}{n}$ ($i = 0, \dots, n$) ist

$$\Lambda_{10} \approx 40$$

$$\Lambda_{20} \approx 3 * 10^4$$

$$\Lambda_{40} \approx 10^{10}$$

$$\Lambda_n \approx \frac{2^n}{\ln(n) * e * n} \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

\Rightarrow Vorsicht bei Polynominterpolation mit vielen äquidistanten Stützstellen!
In §10 werden wir Stützstellen kennenlernen mit $\Lambda_n \leq 4$ für $n \leq 100$.