Numerische Mathematik für Maschinenbauer

Interpolation II/Numerische Integration

A. Reusken

K.-H. Brakhage, Amira El Amouri, Thomas Jankuhn

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2019

Heute in der Vorlesung

Themen: Dahmen & Reusken Kap 8.1-8.3

- Lagrange-Interpolationsaufgabe
- Fehleranalyse
- Numerische Differentiation

Kapitel 10: Numerische Integration

Was Sie mitnehmen sollten:

- Fehlerreduktion bei Interpolation:
  Erhöhung Polynomgrad oder Stützstellenanzahl?
- Numerische Differentiation:
  Wie macht man das und wie wählt man die Schrittweite?
- Grundidee der numerischen Integration

Existenz und Eindeutigkeit

Satz 8.3.

Das Lagrange-Interpolationsproblem ist stets eindeutig lösbar, d.h. zu beliebigen Daten $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ existiert ein eindeutiges Polynom $P_n \in \Pi_n$ mit

$$P_n(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, \ldots, n.$$

Insbesondere lässt sich $P_n(x)$ explizit in der Form

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\,\ell_{jn}(x)$$

darstellen, wobei

$$\ell_{jn}(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}$$

die sogenannten Lagrange-Fundamentalpolynome sind.

Darstellung von $P_n(x)$: Newtonsche Interpolationsformel

Bemerkung 8.14.

$\delta_n = [x_0, \ldots, x_n]f$ ist offensichtlich der führende Koeffizient des Interpolationspolynoms $P(f|x_0, \ldots, x_n)(x)$, d.h. der Koeffizient der Potenz x^n.

Wendet man dieselbe Argumentation auf das Interpolationspolynom $P_{n-1}(x) = P(f|x_0, \ldots, x_{n-1})(x)$ an, so ergibt sich induktiv die

Newtonsche Interpolationsformel

$$\begin{aligned} P(f|x_0, \ldots, x_n)(x) = \; & [x_0]f + (x - x_0) \cdot [x_0, x_1]f \\ & + (x - x_0)(x - x_1) \cdot [x_0, x_1, x_2]f + \cdots \\ & + (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \cdot [x_0, \ldots, x_n]f. \end{aligned}$$

Lösungsdarstellung

Die selbe Lösung $P_n = P(f \mid x_0, \ldots, x_n)$ hat unterschiedliche Darstellungen abhängig von der Wahl der Basis in Π_n:

1. Lagrange-Basis

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\,\ell_{jn}(x), \qquad \ell_{jn}(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}.$$

2. monomiale Basis

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j\, x^j, \qquad V_n \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}.$$

3. Newtonsche Basis

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} [x_0, \ldots, x_j]f\, \omega_j(x),$$ Knotenpolynome ω_j und

$$[x_0, \ldots, x_n]f = \frac{[x_1, \ldots, x_n]f - [x_0, \ldots, x_{n-1}]f}{x_n - x_0}.$$

Satz 8.21.

Es gelten folgende Eigenschaften:

(i) $[x_0, \ldots, x_n]f$ ist eine symmetrische Funktion der Stützstellen, d.h.
hängt nicht von der Reihenfolge der Stützstellen ab
(konkret gilt zum Beispiel $[x_0, x_1, x_2]f = [x_1, x_0, x_2]f$).

(ii) Für $Q \in \Pi_{k-1}$ gilt $[x_0, \ldots, x_k]Q = 0$

(iii) Sei $a := \min_{0 \le i \le n} x_i,\ b := \max_{0 \le i \le n} x_i$,
$I := [a, b]$ und $f \in C^n(I)$. Dann existiert $\xi \in I$, so dass

$$[x_0, \ldots, x_n]f = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}.$$

Fehleranalyse — Restglieddarstellung

Satz 8.22.

Seien $x_0, \ldots, x_n$ paarweise verschiedene Stützstellen, $x \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} a &:= \min\{x_0, \ldots, x_n\}, \\ b &:= \max\{x_0, \ldots, x_n\} \quad \text{und} \\ I &:= \big[\min\{a, x\}, \max\{b, x\}\big]. \end{aligned}$$

Für $f \in C^{n+1}(I)$ existiert $\xi \in I$, so dass

$$f(x) - P(f|x_0, \ldots, x_n)(x) = \left(\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\right) \cdot \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

gilt. Insbesondere gilt

$$\max_{y \in I} |f(y) - P(f|x_0, \ldots, x_n)(y)| \leq \max_{y \in I} \left|\prod_{j=0}^{n}(y - x_j)\right| \cdot \max_{y \in I} \frac{|f^{(n+1)}(y)|}{(n+1)!}.$$

Beispiel 8.24.

Die Funktion $f(x) = \log(1 + x)$ wird an $x_0 = 0$ und $x_1 = 1$ linear interpoliert.

Bestimmen Sie den Interpolationsfehler im Intervall $[0, 1]$.

- Mit den Ableitungen

$$f'(x) = \frac{1}{1 + x} \quad \text{und} \quad f''(x) = -\frac{1}{(1 + x)^2}$$

  erhält man für $\xi \in [0, 1]$

$$f(x) - P(f|0, 1)(x) = -(x - 0)\,(x - 1)\,\frac{1}{2\,(1 + \xi)^2}.$$

- Da $\max_{x\in[0,1]} |(x - 0)\,(x - 1)| = \frac{1}{4}$ und $\xi > 0$ gilt für den Interpolationsfehler

$$|f(x) - P(f|0, 1)(x)| \leq \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{8}.$$

Beispiel 8.24.

Die Funktion $f(x) = \log(1+x)$ wird an $x_0 = 0$, $x_1 = 0.5$ und $x_2 = 1$ quadratisch interpoliert.

Bestimmen Sie den Interpolationsfehler im Intervall $[0,1]$.

- Mit der Ableitung $f'''(x) = \frac{2}{(1+x)^3}$ erhält man für $\xi \in [0,1]$

$$f(x) - P(f|0, \tfrac{1}{2}, 1)(x) = (x-0)(x-\tfrac{1}{2})(x-1)\frac{2}{3!(1+\xi)^3}$$

- Da

$$\max_{x\in[0,1]} \left| x \left(x - \frac{1}{2}\right) (x-1) \right| = \frac{\sqrt{3}}{36},$$

und $\xi > 0$ gilt für den Interpolationsfehler

$$|f(x) - P(f|0, 0.5, 1)(x)| \leq \frac{1}{36\sqrt{3}}.$$

Erhöhung Polynomgrad bzw. Stützstellenanzahl

Definiere

$$\omega_{n+1}(x) := \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \text{ und } M_{n+1}(f) := \max_{x\in[a,b]} \frac{\left|f^{(n+1)}(x)\right|}{(n+1)!}$$

Dann erhält man für die Fehlerschranke

$$|f(x) - P(f|x_0,\dots,x_n)(x)| \leq \left|\omega_{n+1}(x)\right| M_{n+1}(f)$$

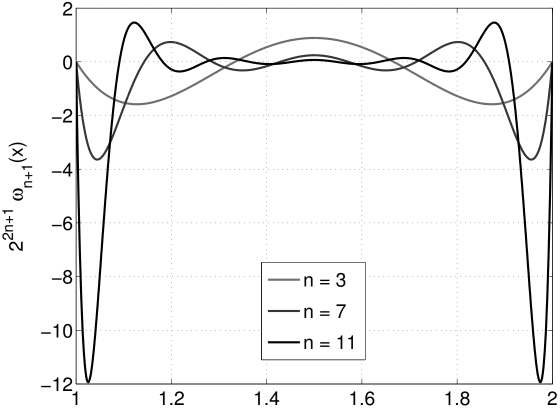
für $x \in [a,b]$ und $x_j \in [a,b]$, $j = 0,1,2,\dots,n.$

Beachte

- $M_{n+1}(f)$ hängt nur von f ab, aber nicht von Stützstellen
- $\omega_{n+1}(x)$ hängt nur von den Stützstellen ab, aber nicht von f.

Erhöhung Polynomgrad bzw. Stützstellenanzahl

- Verhalten der Funktion ω_{n+1} bei äquidistanten Stützstellen.
- Beispiel: $x_j = 1 + \frac{j}{n}, j = 0, \ldots, n$ für $n = 3, 7, 11.$



Erhöhung Polynomgrad bzw. Stützstellenanzahl

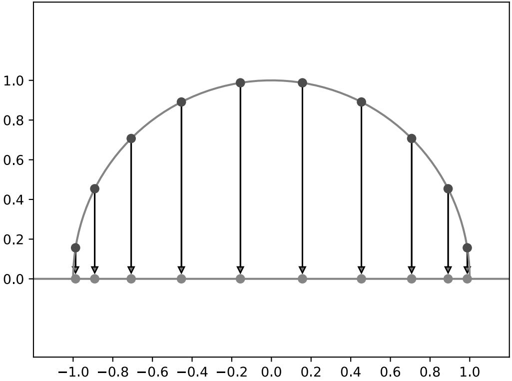
Bemerkung 8.25.

- Das Verhalten der Funktion ω_{n+1} kann für eine andere Wahl der Stützstellen wesentlich besser sein.
- Es ist bekannt, dass die Nullstellen der sogenannten Tschebyscheff-Polynome (engl. Chebyshev polynomials) wesentlich günstiger Stützstellen liefern.
- Für diese Nullstellen gibt es explizite Formeln, z.B. für das Intervall $[1, 2]$ hat man die Formeln

$$x_j = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2j+1}{2n+2}\pi\right), \quad j = 0, 1, \dots, n.$$

Erhöhung Polynomgrad bzw. Stützstellenanzahl

- Verteilung der Tschebyscheff-Stützstellen auf $[-1, 1]$.



Grenzen der Polynominterpolation

Beispiel: Runges Phänomen

- Die Funktion

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

ist auf ganz $\mathbb{R}$ beliebig oft differenzierbar.

- Die Folge der Interpolationspolynome

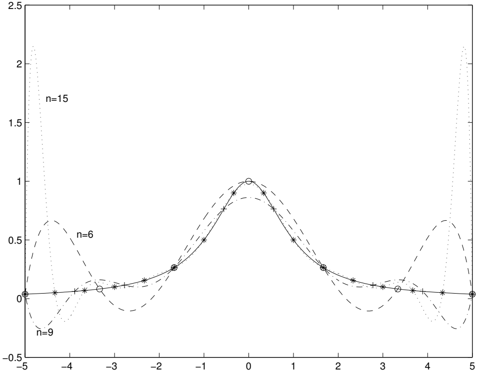
$$P_n(x) = P(f|x_0, \ldots, x_n)(x)$$

mit

$$x_j = -5 + 10\,\frac{j}{n}, \quad j = 0, \ldots, n,$$

divergiert auf $[-5, 5]$.

Grenzen der Polynominterpolation



Fazit

Als Mittel, über immer mehr Stützstellen immer bessere Appproximationen zu gewinnen, taugt die Polynominterpolation im allgemeinen nicht.

Fester Polynomgrad

- Sei $a := \min\{x_0, \dots, x_n\}$ und $b := \max\{x_0, \dots, x_n\}$ mit n fest.
- Die Länge des Intervalls $h := b - a$ sei veränderbar.
- Falls $x \in I := [a, b]$ liegt, erhält man sofort die grobe Abschätzung
$$|\omega_{n+1}(x)| \leq h^{n+1},$$
und somit
$$\|f - P(f|x_0, \dots, x_n)\|_{L_\infty(I)} \leq \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} \|f^{n+1}\|_{L_\infty(I)}.$$
- Der Fehler wird kleiner, wenn die Stützstellen gemäß h zusammenrücken.

Dieser Effekt wird in den meisten Anwendungen benutzt.

Matlab-Demo

Beispiel 8.26.

Die Funktion $f(x) = \log(1+x)$ wird an $x_0 = 0$ und $x_1 = h$ linear interpoliert.

Bestimmen Sie den zugehörigen Interpolationsfehler in $[0, h]$ in Abhängigkeit von h.

- Wir erhalten (siehe Beispiel 8.24.)

$$f(x) - P(f|0,h)(x) = -(x-0)\,(x-h)\,\frac{1}{2\,(1+\xi)^2}.$$

- Da $\max_{x\in[0,h]} |(x-0)\,(x-h)| = \frac{h^2}{4}$ und $\xi > 0$ folgt für den Interpolationsfehler

$$|f(x) - P(f|0,h)(x)| \leq \frac{h^2}{8}, \quad \text{für } x \in [0,h].$$

- Der Verfahrensfehler strebt also mit der Ordnung 2 gegen 0.

Numerische Differentiation

Zur Erinnerung: In der Newton-Interpolationsformel ist

$$\delta_n := [x_0, \ldots, x_n]f$$

der Koeffizient der Potenz x^n. Daraus folgt

$$P(f|x_0, \ldots, x_n)^{(n)}(x) = n!\,[x_0, \ldots, x_n]f \approx f^{(n)}(x).$$

1. Ableitung: Speziell erhält man bei äquidistanten Stützstellen $x_j = x_0 + j\,h$,

$$f'(x) \approx [x_0, x_1]f = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \quad \big(x \in [x_0, x_1]\big),$$

und aus der Taylor-Entwicklung ergibt sich für $x_0 = x - \frac{1}{2}\,h$ und $x_1 = x + \frac{1}{2}\,h$ (zentrale Differenzen)

$$f'(x) = \frac{f(x + \frac{1}{2}\,h) - f(x - \frac{1}{2}\,h)}{h} - \frac{h^2}{24}\,f'''(\xi).$$

Numerische Differentiation

2. Ableitung: Speziell erhält man bei äquidistanten Stützstellen $x_j = x_0 + j\,h$,

$$
\begin{aligned}
f''(x) &\approx 2!\,[x_0, x_1, x_2]f \\
&= \frac{f(x_2) - 2\,f(x_1) + f(x_0)}{h^2} \quad \big(x \in [x_0, x_2]\big),
\end{aligned}
$$

und aus der Taylor-Entwicklung ergibt sich für $x_0 = x - h$, $x_1 = x$ und $x_2 = x + h$ schließlich

$$
f''(x) = \frac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\,f^{(4)}(\xi).
$$

Auslöschung bei numerischer Differentiation

- Differenzenquotient

$$\Delta_h := \frac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

- Fehler in den Daten

$$\widetilde{\Delta}_h := \frac{\tilde{f}(x+h) - 2\,\tilde{f}(x) + \tilde{f}(x-h)}{h^2}.$$

- Fehler in $\boldsymbol{\Delta_h}$ aufgrund von Datenfehler ($|f(y) - \tilde{f}(y)| \le \epsilon$)

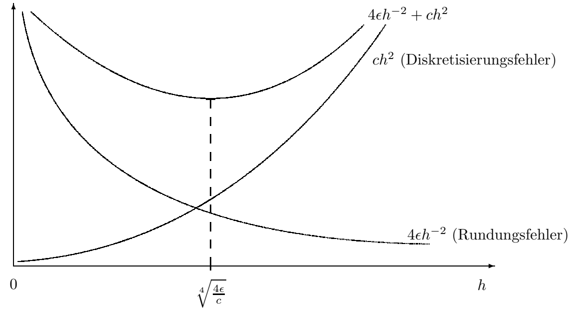
$$\left|\Delta_h - \widetilde{\Delta}_h\right| = \frac{1}{h^2}\,\left|\Big(f(x+h) - \tilde{f}(x+h)\Big) - 2\,\Big(f(x) - \tilde{f}(x)\Big) + \Big(f(x-h) - \tilde{f}(x-h)\Big)\right| \le \frac{4\,\epsilon}{h^2}.$$

Gesamtfehler

$$\left|\widetilde{\Delta}_h - f''(x)\right| \le \left|\widetilde{\Delta}_h - \Delta_h\right| + |\Delta_h - f''(x)| \le \frac{4\,\epsilon}{h^2} + c\,h^2$$

Auslöschung bei numerischer Differentiation

- Die Schranke wird für $h = \sqrt[4]{4\,\epsilon/c}$ minimal.
- Bsp: $\boldsymbol{\epsilon = 10^{-9} \;\Rightarrow\; h \approx 10^{-2}}$, kleineres $\boldsymbol{h}$ vergrößert Fehler



Merke

Man sollte stets dafür sorgen, dass Rundungsfehler einen kleineren Einfluß haben als Diskretisierungsfehler.

Beispiel 8.27.

Aufgabe

Annäherung der zweiten Abteilung von $f(x) = \sin(x) + 3\,x^2$ an der Stelle $x = 0.6$ mit dem Differenzquotienten

$$\Delta_h = \frac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

- Wir rechnen auf einer Maschine mit **eps** $\approx 10^{-16}$
- Man erwartet einen minimalen Gesamtfehler für $h \approx 10^{-4}$
- Die Tabelle bestätigt dies:

h	$\tilde{\Delta}_h$	$\lvert\tilde{\Delta}_h - f''(x)\rvert$
10^{-2}	$\underline{5.4353}622319$	4.71e-06
10^{-3}	$\underline{5.4353575}738$	4.72e-08
10^{-4}	$\underline{5.43535751}96$	6.98e-09
10^{-5}	$\underline{5.435356}6092$	9.17e-07
10^{-6}	$\underline{5.4352}078394$	1.50e-04
10^{-7}	$\underline{5.44}00928207$	4.74e-03

Zusammenfassung

- Fehlerschranke

$$|f(x) - P(f \mid x_0, \ldots, x_n)(x)| \leq |\omega_{n+1}(x)|\, M_{n+1}(f)$$

mit $\omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$, $M_{n+1}(f) = \max_{x\in[a;b]} \frac{|f^{[n+1)}(x)|}{(n+1)!}$

- Sehr hoher Polynomgrad: oft nicht günstig (Runge-Beispiel).
- Besser: fester Grad
  $+$ Verkleinerung des Interpolationsintervalls
  $+$ Wiederholung
- Numerische Differentiation:

$$f^{(n)}(x) \approx n!\,[x_0, \ldots, x_n]f \quad \rightsquigarrow \quad \text{Formeln}$$

- Wahl von h: Kompromiss zwischen Diskretisierungsfehler und Rundungsfehler (Auslöschung)

Verständnisfragen

Es sei $n \in \mathbb{N}$ und $P(f|x_0, \ldots, x_n)$ das Lagrange-Interpolationspolynom vom Grad n, das die Funktion

$$f : [a, b] \to \mathbb{R}$$

in den Stützstellen $a \leq x_0 < \cdots < x_n \leq b$ interpoliert.

w Das Polynom $P(f|x_0, \ldots, x_n)$ ist eindeutig.

f Erhöht man sukzessive den Polynomgrad n, so erhält man eine immer genauere Näherung der zu interpolierenden Funktion f in $[a, b]$.

f Die Wahl von äquidistanten Stützstellen ist optimal für die Polynominterpolation

f Der Fehler $\max_{x\in[a,b]} |P(f \mid x_0, \ldots, x_n) - f(x)|$ hängt nicht von der Wahl der Stützstellen ab.

f $\max\limits_{x\in[a,b]} |P(f \mid x_0, ., x_n)(x) - f(x)| \leq \max\limits_{x\in[a,b]} |P(f \mid x_0, ., x_{n-1})(x) - f(x)|$

Numerische Integration

Kapitel 10:

Numerische Integration

Aufgabe:

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

Kondition

Sei $\quad I = \int_a^b f(x)\, dx, \qquad \tilde{I} = \int_a^b \tilde{f}(x)\, dx$

Es gilt

$$\begin{aligned} \left| I - \tilde{I} \right| &= \left| \int_a^b f(x) - \tilde{f}(x) dx \right| \le \int_a^b \left| f(x) - \tilde{f}(x) \right| dx \\ &\le (b-a) \left\| f - \tilde{f} \right\|_\infty . \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ absolute Kondition ist gut.

$$\frac{\left| I - \tilde{I} \right|}{|I|} \le (b-a) \frac{\left\| f - \tilde{f} \right\|_\infty}{\left| \int_a^b f(x) dx \right|} = \underbrace{\frac{\int_a^b \|f\|_\infty dx}{\left| \int_a^b f(x) dx \right|}}_{= \kappa_{\mathrm{rel}}} \frac{\left\| f - \tilde{f} \right\|_\infty}{\|f\|_\infty}.$$

$\Rightarrow$ relative Kondition kann beliebig schlecht sein.

Grundlegende Idee

Die gängige Strategie zur näherungsweisen Berechnung des Integrals

$$\int_a^b f(x)dx = ?$$

lässt sich folgendermaßen umreißen:

1. Man unterteile $[a, b]$ in Teilintervalle $[t_{k-1}, t_k]$ z.B. mit $t_j = a + j\,h,\ j = 0, \ldots, n,\ h = (b-a)/n.$
2. Approximiere f auf jedem Intervall $[t_{k-1}, t_k]$ durch eine einfach/exakt zu integrierende Funktion g_k, und verwende

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} \int_{t_{k-1}}^{t_k} g_k(x)dx$$

als Näherung für das exakte Integral.

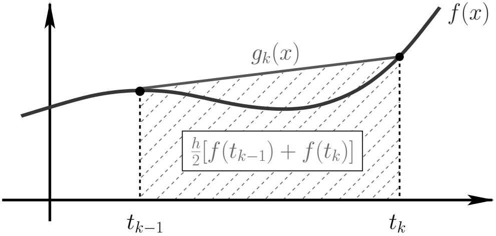
Trapezregel

- Lineare Interpolation an den Intervallenden von $[t_{k-1}, t_k]$, d.h.

$$g_k(x) = \frac{x - t_{k-1}}{h} f(t_k) + \frac{t_k - x}{h} f(t_{k-1}),$$

- Das Integral ist damit gegeben durch

$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} g_k(x)\, dx = \frac{h}{2} \left[f(t_{k-1}) + f(t_k) \right].$$



Summierte Trapezregel

Wiederholtes Anwenden der Trapezregel auf jedem Teilinterval $[t_{k-1}, t_k]$ als Näherung für $\int_a^b f(x)\,dx$ liefert die

Summierte Trapezregel

$$T(h) = h\,\left[\frac{1}{2}\,f(a) + f(t_1) + \cdots + f(t_{n-1}) + \frac{1}{2}\,f(b)\right]$$

Für den Verfahrensfehler der Teilintegrale gilt folgende Darstellung:

Lemma 10.1.

Sei $f \in C^2\big([t_{k-1}, t_k]\big)$. Es gilt:

$$\frac{h}{2}\,[f(t_{k-1}) + f(t_k)] = \int_{t_{k-1}}^{t_k} f(x)\,dx + \frac{f''(\xi_k)}{12}\,h^3,$$

für $\xi_k \in [t_{k-1}, t_k]$.

Summierte Trapezregel

Für den Verfahrensfehler des gesamten Integrals $T(h)$ ergibt sich damit die Abschätzung

$$\begin{aligned}\left|T(h) - \int_a^b f(x)\,dx\right| &= \left|\sum_{k=1}^{n} \frac{f''(\xi_k)}{12}\,h^3\right| \\ &\leq \frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n}\left|f''(\xi_k)\right| \leq \frac{h^3}{12}\,n\,\max_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right|.\end{aligned}$$

Mit $n\,h = b - a$ ergibt sich insgesamt die

Fehlerschranke

$$\left|T(h) - \int_a^b f(x)\,dx\right| \leq \frac{h^2}{12}\,(b-a)\,\max_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right|$$

Summierte Trapezregel

Ebenfalls erhält man wegen

$$E(h) := T(h) - \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} h^3\,\frac{f''(\xi_k)}{12} = \frac{h^2}{12}\,\sum_{k=1}^{n} h\,f''(\xi_k)$$

und

$$\lim_{h\to 0}\frac{E(h)}{h^2} = \frac{1}{12}\int_a^b f''(x)\,dx = \frac{1}{12}\big(f'(b) - f'(a)\big)$$

die

Fehlerschätzung

$$E(h) \approx \widehat{E}(h) := \frac{h^2}{12}\big(f'(b) - f'(a)\big)$$