0 CoMa II

2020-04-24

Orga

- Tutorium! (WebEX)
- Anmeldung in KVV ✓
- klausur ??? ✓
- Übungszettel:
  - Fr → Fr
  - 2 Wochen
  - Theorie & Programmieraufgaben
  - jeweils 60%
  - Gruppen mit 2 Teilnehmern
  - Programmieren in Python
  - 1x Vorrechnen
  - Abgabe per E-Mail

→ Mattermost

Fragen?

Inhalt

1. Polynominterpolation
2. Numerische Quadratur
3. lineare gewöhnliche Differentialgleichungen
4. Nichtlineare Gleichungssysteme

Anwendungen

Moleküldynamik

$\boxed{\text{gewöhnliche Diff.glen}}$

- Quadratur
- Polynominterpolation

Reaktionskinetik

Populationsdynamik

~~räumlich und~~

Raum- und zeit-abhängige Prozesse

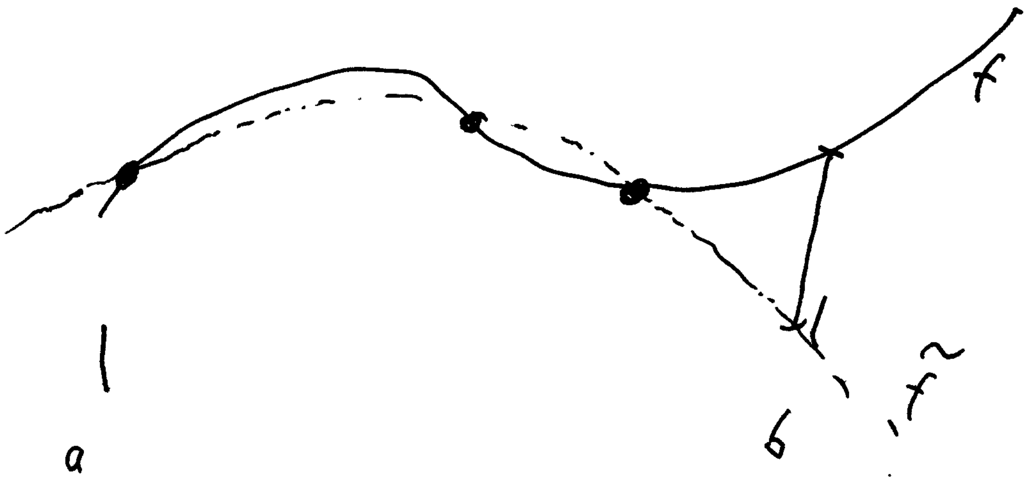
→ partielle DGL → Numerik 3
- gewöhnl. DGL
- Quadratur
- Polynominterpolation

1 I. Polynominterpolation

Problemstellung: zu gegebener Funktion $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ suchen wir eine Approximation $\tilde{f}$ die

- f möglichst ähnlich ist $\quad \tilde{f}\approx f$
- einfach zu berechnen/auszuwerten ist
- mit unvollständiger Information berechenbar

Idee: Verwende Polynome als Ansatz für $\tilde{f}$



(2) Interpolationsaufgabe

Gegeben: $f \in C[a,b] = \{v : [a,b] \to \mathbb{R} \mid v \text{ stetig}\}$

Gitter von $n+1$ paarweise verschiedenen Punkten in $[a,b]$

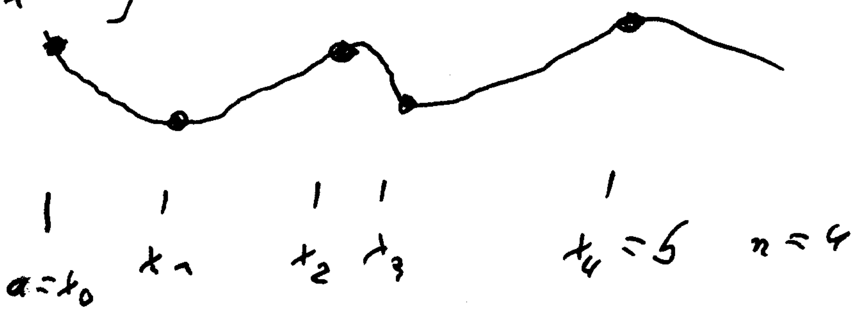
$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \qquad < x_n = b$$

Gesucht: Ein Polynom p_n mit Grad höchstens n, d.h.

$$p_n \in \mathcal{P}_n = \{v : [a,b] \to \mathbb{R} \mid v(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k,\ a_k \in \mathbb{R}\}$$

und

$$p_n(x_k) = f(x_k) \qquad k = 0, \dots, n.$$



Beispiel
- $p(x) = 42 - 17x + 23x^3$
- Ang. x_0, x_1, $n=1$, $x_0 = 0$, $x_1 = 1$
  $f(x_0) = 1$, $f(x_1) = -1$

$p_n(x) = 1 - 2x$

③

$x_0 = 0 \quad , f(x_0) = 1$

$x_1 = 1 \quad , f(x_1) = -1$

~~$p(x) = a + b$~~

$\boxed{p(x) = r + sx}$

$$\left.\begin{array}{l} 1 = p(x_0) = p(x_0) = p(0) = r \\ -1 = p(x_1) = p(1) = r + s \end{array}\right\}$$

$$\left.\begin{array}{l} 1 = r \\ -1 = r + s \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} r = 1 \\ -2 = s \end{array}$$

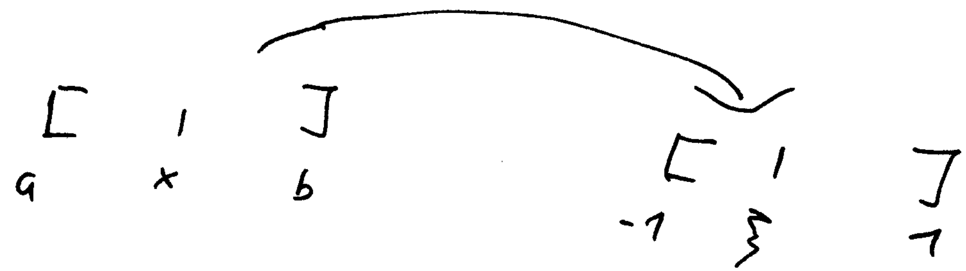
$$\Rightarrow p(x) = 1 - 2x$$

__Beobachtung:__ Es reicht das auf dem Intervall $[-1, 1]$ zu betrachten, denn wir können $[-1, 1]$ immer auf $[a, b]$ transformieren

$$x \in [a, b] \qquad \xi = \frac{2x - (a+b)}{b-a}$$

$$x = a \Rightarrow \xi = \frac{\cancel{2a-(a+b)}\; a-b}{b-a} = -1$$

$$x = b \Rightarrow \xi = \frac{2b-(a+b)}{b-a} = \frac{b-a}{b-a} = 1$$



④ $\mathcal{P}_n \subseteq C[a,b]$ ist ein Unterraum

$\mathcal{P}_n$ ist ein linearer Raum, bzw. ein Vektorraum, d.h. für

$p, q \in \mathcal{P}_n$, $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt

$$p+q \in \mathcal{P}_n \quad \text{und} \quad \lambda p \in \mathcal{P}_n .$$

Eine Basis von $\mathcal{P}_n$ sind die Monome
$x \mapsto x^0 = 1$
$x \mapsto x$
$x \mapsto x^2$
$\vdots$
$x \mapsto x^n$

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$$

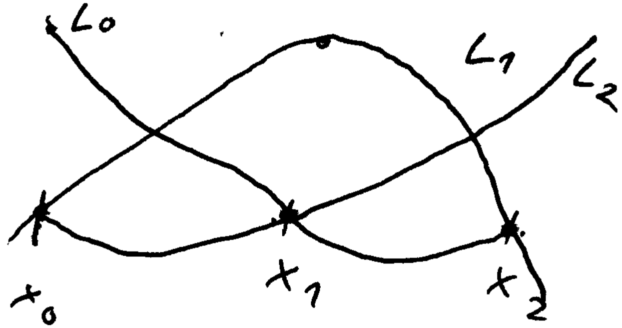
Die Knotenbasis zu den Gitterpunkten $x_0 < \ldots < x_n$ ist gegeben durch die Lagrange-Polynome L_k $k = 0, \ldots, n$

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

(5) Es gilt

$$L_k(x_k) = 1$$

$$\underline{j \neq k} \quad L_k(x_j) = 0$$



Dann

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \underbrace{f(x_k)}_{\in \mathbb{R}} L_k(x) \in \mathcal{P}_n \checkmark$$

$$p_n(x_i) = \sum_{k=0}^{n} \underline{f(x_k)} \underbrace{L_k(x_i)}_{\substack{=1 \text{ für } i=k \\ =0 \text{ für } i\neq k}} = \cancel{f(x_k) L_k(x_k)}\; f(x_i) \underbrace{L_i(x_i)}_{1} = f(x_i)$$

Also $p_n \in \mathcal{P}_n$ und $p(x_i) = f(x_i)$ für $i = 0, \dots, n$.