

Kapitel 3

Interpolationsverfahren

Problem:

Durch Messung sind einige Messwerte (abhängige Variable) in Abhängigkeit von unabhängigen Variablen im ein-, zwei-, drei- oder vierdimensionalen Raum, der im Allgemeinen durch die drei Raumkoordinaten (je nach Koordinatensystem z.B. x_n, y_n, z_n oder r_n, α_n, z_n oder $r_n, \alpha_n, \vartheta_n$ (siehe Kapitel 2 Vektorrechnung, Seite 47)) und die Zeit t_n gebildet wird, bekannt. Man hat in diesem Fall diskontinuierliche Wertetabellen. Für den eindimensionalen Fall gilt z. B.:

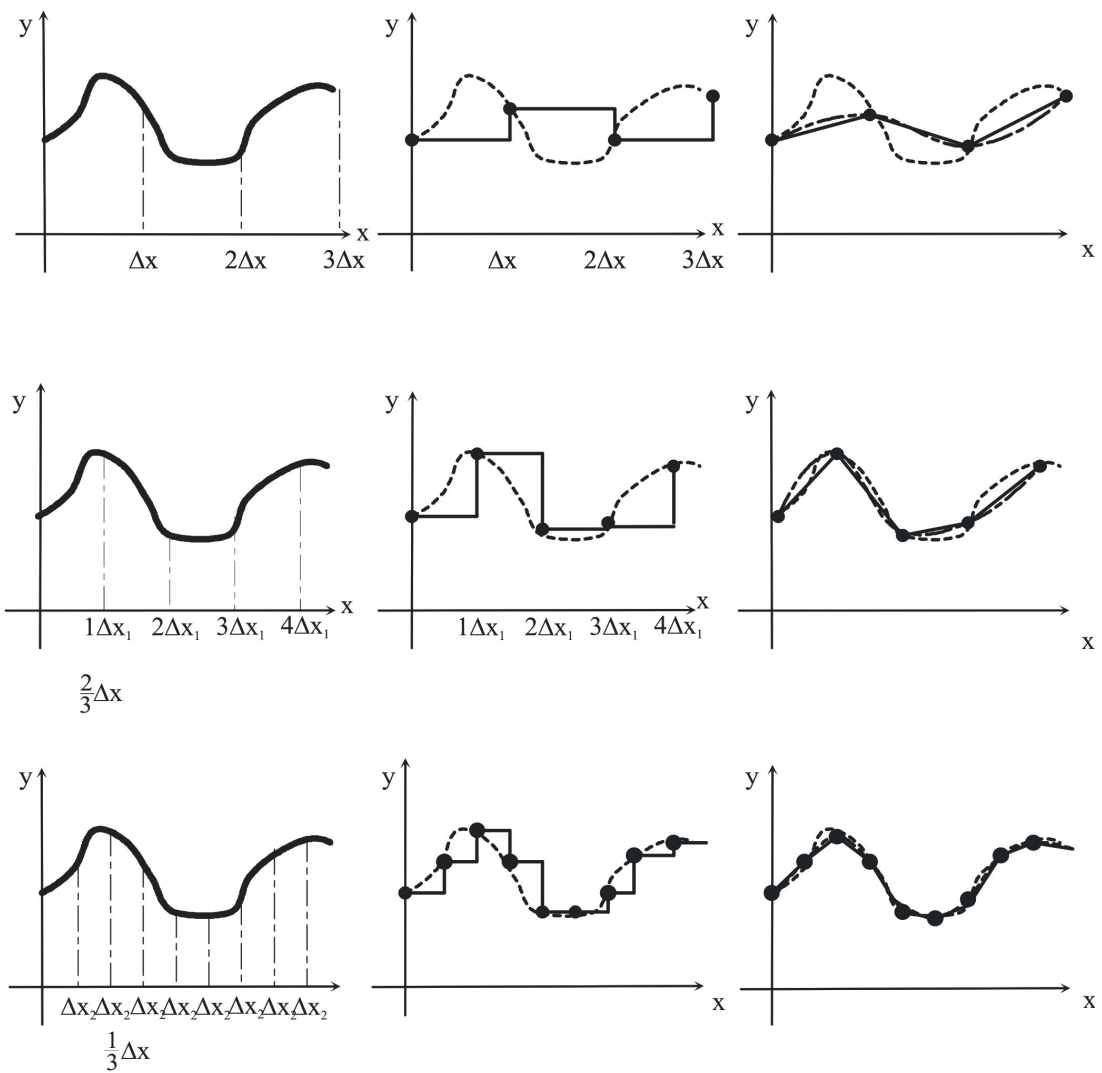
Unabhängige Variable	Abhängige Variable
x_0	$y_0 = f(x_0)$
x_1	$y_1 = f(x_1)$
\vdots	\vdots
x_n	$y_n = f(x_n)$

Die Stellen x_0, x_1, \dots, x_n werden als so genannte **Stützstellen** bezeichnet, die y_0, y_1, \dots, y_n als **Stützwerte**.

Werden Funktionswerte gesucht, deren unabhängige Variable innerhalb des Bereiches (x_0, x_n) liegen, spricht man von **Interpolation**. Sollen dagegen Funktionswerte für unabhängige Variable außerhalb des Bereiches (x_0, x_n) gesucht werden, wird dies **Extrapolation** genannt. Durch die Interpolation bzw. Extrapolation wird eine kontinuierliche Ersatzfunktion $w = p(x)$ gesucht, die die Originalfunktion $y_n = f(x_n)$ möglichst genau widerspiegelt (siehe Abbildung 3.1). Dabei ist immer davon auszugehen, dass die Ersatzfunktion nur an den Stützstellen mit der Originalfunktion übereinstimmt. Für den dazwischen liegenden Raum hängt die Genauigkeit, d.h. die Übereinstimmung der beiden Funktionen, von der Anzahl und der Verteilung der Stützstellen ab. Entsprechend dem **Abtasttheorem** nimmt der Quantisierungsfehler proportional zum Anstieg der Funktion zu.

Beachte:

Kein Interpolationsalgorithmus kann als Ersatz für eine Vergrößerung der Messwertdichte benutzt werden. Mittels der Interpolationsalgorithmen erhält man immer nur **Näherungswerte**.



Originalfunktion

Abgetastete Funktion

Interpolierte Funktion

- Abgetasteter Messwert
- Lineare Interpolation
- - - Originalfunktion
- - - Spline-Interpolation

Abbildung 3.1: Darstellung der diskontinuierlichen Messwernerfassung

Beispiel zur Anwendung von Interpolationen:

Die Schadstoffkonzentration $C(x)$, die von einer Altlast ausgeht, wird an den Stellen x_0, x_1, x_2 gemessen (siehe Abbildung 3.2). Die Schadstoffkonzentration, die als Gefahr an der Stelle x_{Fl} in den Fluss fließen kann, soll durch Interpolation abgeschätzt werden. Dabei soll eine Aussage erfolgen, ob dieser Wert den zulässigen Grenzwert überschreitet.

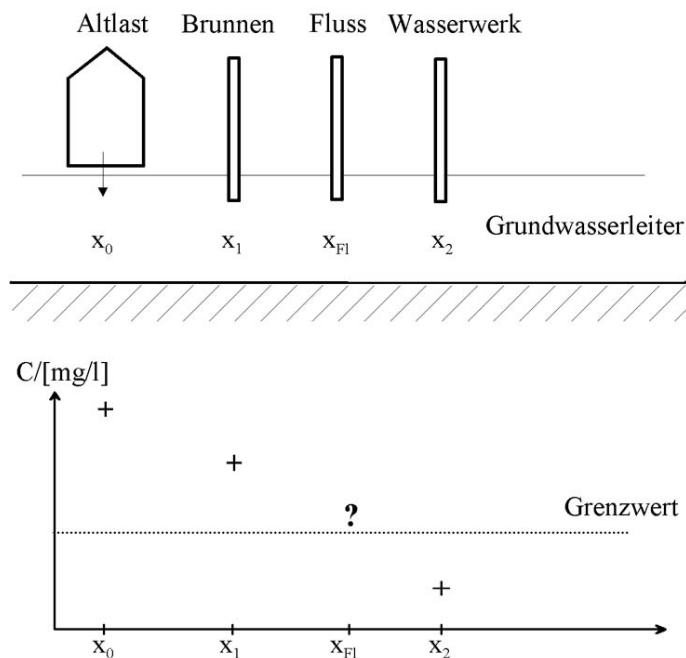


Abbildung 3.2: Darstellung eines Interpolationsproblems

x_0	$C_0 = f(x_0)$
x_1	$C_1 = f(x_1)$
x_{Fl}	?
x_2	$C_2 = f(x_2)$

Zur Lösung dieses Problems wird eine Interpolationsfunktion $w = p(x)$ als "Ersatz" für die Funktion $C_n = f(x_n)$ gesucht. Diese Funktion soll folgende Voraussetzung erfüllen:

$$w_i = p(x_i) = C_i \tag{3.1}$$

d.h.

$$\begin{aligned} w_0 &= p(x_0) = C_0 \\ w_1 &= p(x_1) = C_1 \\ &\vdots \\ w_n &= p(x_n) = C_n \end{aligned} \tag{3.2}$$

Dann wird angenommen, dass sich die Zwischenwerte der Funktion $w = p(x)$ den Zwischenwerten der Funktion $C_n = f(x_n)$ mit guter Näherung angleichen.

Zur Bestimmung der Funktion $w = p(x)$ können verschiedene Interpolationsverfahren verwendet werden. Man unterscheidet dabei die ein- und die mehrdimensionalen Verfahren. Die mehrdimensionalen Verfahren spielen im Zusammenhang mit den **Geografischen Informationssystemen** (GIS) eine wesentliche Rolle und werden auch oft im Zusammenhang mit den Verfahren der **Geostatistik** betrachtet.

Im Folgenden sollen einige der im Zusammenhang mit wasserwirtschaftlichen Fragestellungen benutzten Verfahren vorgestellt werden.

- Polynominterpolation
- Interpolierende Polynomteilstücke (Spline)
- Kriging-Verfahren

3.1 Polynominterpolation

Bei diesem Verfahren hat $p(x)$ die Form eines algebraischen Polynoms n -ten Grades:

$$w = p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (3.3)$$

Dies weist den Vorteil auf, dass Zwischenwerte möglichst leicht zu berechnen sind.

Geht man von einer Messwerttabelle mit $n + 1$ Wertepaaren aus, so lässt sich maximal genau ein Polynom n -ten Grades dazu ermitteln:

$$y := p_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k \cdot x^k \quad (3.4)$$

mit der Eigenschaft:

$$y(x_i) \approx p(x_i) = \sum_{k=0}^n a_k \cdot x_i^k = w_i \quad (3.5)$$

Dieses Polynom ist das Interpolationspolynom zu dem gegebenen System von Interpolationsstützstellen.

In der Regel werden Polynome niedrigen Grades ($n \leq 3$) gesucht, die die Wertepaare zumindest stückweise anpassen:

$p(x) = a_0 + a_1x$	lineare Interpolation
$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$	quadratische Interpolation
$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$	kubische Interpolation

Der Einsatz von Polynomen höheren Grades erschwert die Rechenarbeit und führt zu sehr große Schwankungen.

Aus den verschiedenen Darstellungsformen für Polynome ergeben sich auch die verschiedenen Interpolationsverfahren zur Bestimmung der Koeffizienten a_i des Polynoms n -ten Grades. Diese verschiedenen Verfahren führen alle zu dem selben Polynom.

So werden die Interpolationsformeln unterschieden nach:

- analytische Potenzfunktion
- LAGRANGE
- AIKEN
- NEWTON

3.1.1 Analytische Potenzfunktionen

Dieser Polynomansatz geht davon aus, dass das Polynom $w = p(x)$ für jede Stützstelle die Bedingung $y(x_i) = p(x_i)$ erfüllt. Man erhält in diesem Fall für die $n + 1$ Stützstellen $n + 1$ Gleichungen mit den $n + 1$ Unbekannten a_0 bis a_n .

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n &= y_1 \\ &\vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n &= y_n \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dieses Gleichungssystem kann in gewohnter Weise auch als Matrixgleichung geschrieben werden:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{Y}$$

Mit:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Dabei ist zu beachten, dass die Matrix \mathbf{X} die bekannten Koeffizienten und \mathbf{Y} die rechte Seite darstellen, wobei hier die Matrix \mathbf{A} den gesuchten Lösungsvektor darstellt. Das LGS kann mit allen bekannten Methoden (siehe Abschnitt 1.3 Lösung von Gleichungssystemen, Seite 22) gelöst werden. Die Determinante dieses linearen Gleichungssystems (LGS) ist:

$$D = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} (x_1 - x_0) \cdot (x_2 - x_0) \cdot (x_3 - x_0) \cdot \dots \cdot (x_n - x_0) \cdot \\ \cdot (x_2 - x_1) \cdot (x_3 - x_1) \cdot \dots \cdot (x_n - x_1) \cdot \\ \cdot (x_3 - x_2) \cdot \dots \cdot (x_n - x_2) \cdot \\ \vdots \\ \cdot (x_{n-1} - x_{n-2}) \cdot (x_n - x_{n-2}) \cdot \\ \cdot (x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

und wird als VANDERMONDSche Determinante bezeichnet.

Da alle Stützstellen verschieden von einander sind (sein müssen), ist $D \neq 0$ und das LGS eindeutig lösbar.

Es existiert genau ein Polynom n -ten Grades, das die Werte $y_i = f(x_i)$ annimmt und deren Koeffizienten sich ergeben zu (vgl. Abschnitt 1.2.3 Determinanten, Seite 19):

$$a_0 = \frac{D_{a_0}}{D}, \quad a_1 = \frac{D_{a_1}}{D}, \quad \dots \quad a_n = \frac{D_{a_n}}{D} \quad (3.8)$$

Mit diesen Koeffizienten erhält man das gesuchte Interpolationspolynom zu:

$$y(x) \approx p(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n$$

Der gesuchte Interpolationswert an der Stelle x_P ergibt sich damit zu:

$$y(x_P) \approx p(x_P) = a_0 + a_1 \cdot x_P + a_2 \cdot x_P^2 + \dots + a_n \cdot x_P^n$$

Obwohl bei diesem Verfahren der Ansatz sehr einfach ist, erfordert die endgültige Bestimmung des Interpolationspolynoms einen erheblichen Rechenaufwand, besonders wenn eine größere Anzahl von Stützwerten zu berücksichtigen ist.

Beispiel zur Anwendung der Interpolation nach dem Polynomansatz:

Gesucht sind ein quadratisches Polynom, das die Werte der folgenden Tabelle annehmen soll, und der Wert $y = f\left(\frac{1}{2}\right)$ an der Stelle $x = \frac{1}{2}$.

x	0	1	2
y	0	1	0

Da nur drei Stützstellen vorhanden sind, kann das Polynom nur vom zweiten Grad sein. Ein quadratisches Polynom hat die Form:

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

Es muss gelten:

$$y_i = p(x_i)$$

$$y_i = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2$$

$$\begin{aligned} p(0) = 0 &\implies a_0 + a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 0 = 0 &\implies a_0 = 0 \\ p(1) = 1 &\implies a_0 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1^2 = 1 &\implies a_1 + a_2 = 1 \\ p(2) = 0 &\implies a_0 + a_1 \cdot 2 + a_2 \cdot 2^2 = 0 &\implies 2a_1 + 4a_2 = 0 \end{aligned}$$

Aus den drei Gleichungen folgt:

$$a_0 = 0$$

$$a_1 = 2$$

$$a_2 = -1$$

Damit lautet das Interpolationspolynom:

$$p(x) = 2x - x^2$$

Mit dieser Funktion kann der gesuchte Funktionswert an der Stelle $x = \frac{1}{2}$ berechnet werden:

$$f\left(\frac{1}{2}\right) \approx p\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$p\left(\frac{1}{2}\right) = 2 \cdot \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$f\left(\frac{1}{2}\right) \approx \frac{3}{4}$$

3.1.2 Interpolationsformel von LAGRANGE

LAGRANGE hat die Interpolationsfunktion in folgender Form geschrieben:

$$y(x_P) \approx p(x_P) = L_0(x_P) \cdot y_0 + L_1(x_P) \cdot y_1 + \dots + L_n(x_P) \cdot y_n \quad (3.9)$$

Bei der Interpolation nach LAGRANGE werden keine geschlossenen analytische Funktionen berechnet, sondern nur jeweils einzelne Werte $p(x_P)$ zur Interpolationsstelle x_P . Dabei sind die Koeffizienten ($L_i(x)$ ($i = 0, 1, \dots, n$)) der Stützpunkte y_i Polynome n -ten Grades von x_P . Diese werden aus den Stützstellen x_i berechnet. Die LAGRANGESchen Polynome n -ten Grades haben folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} \\ L_1(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} \\ &\vdots \\ L_i(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{i-1})(x_P - x_{i+1}) \cdots (x_P - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} \\ &\vdots \\ L_n(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Damit erhält das Interpolationspolynom von LAGRANGE die Form:

$$\begin{aligned} y &= f(x_P) \approx p(x_P) = L_0(x_P) y_0 + L_1(x_P) y_1 + \dots + L_n(x_P) y_n \\ &= \frac{(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} y_0 \\ &\quad + \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} y_1 \\ &\quad + \dots + \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})} y_n \end{aligned} \quad (3.11)$$

Setzt man für x_P einen der Werte $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n$ ein, so wird immer ein Faktor des Zählers gleich Null. Damit werden alle LAGRANGESchen Polynome außer dem i -ten gleich Null. Für das i -te Polynom wird der Zähler gleich dem Nenner und erhält damit den Wert Eins. Damit ist bewiesen:

$$y_i = f(x_i) \approx p(x_i) = 1 \cdot y_i$$

Ein Nachteil des LAGRANGESchen Verfahrens besteht darin, dass bei einer Erhöhung der berücksichtigten Stützstellenzahl, welche mit der Erhöhung des Grades des Interpolationsalgorithmus identisch ist, die Berechnung der LAGRANGESchen Interpolationspolynome erneut durchgeführt werden muss. Dies ist z.B. auch im folgenden Beispiel deutlich zu sehen.

Beachte:

- Die Gewichte (Faktoren) $L_i(x_i)$ der LAGRANGESchen Interpolationsformel müssen immer neu berechnet werden, wenn sich die Zahl der Stützstellen ändert.
- Die Summe der Gewichte ist immer gleich Eins (zur Kontrolle der Ergebnisse wichtig).

$$\sum L_i(x_i) = 1$$

Beispiel zur Anwendung der LAGRANGESchen Interpolationsfunktion:

Für die Funktion $y_n = f(x_n)$ sind die Werte an den äquidistanten Stellen $x_n = x_0 + 2nh$, mit $n = -1; 0; 1; 2$ (siehe Tabelle) gegeben:

n	-1	0	1	2
x_n	$x_0 - 2h$	x_0	$x_0 + 2h$	$x_0 + 4h$
$f(x_n)$	y_{-1}	y_0	y_1	y_2

Gesucht ist ein Näherungswert $w = f(x) = f(x_0 + h)$ für $x = \frac{1}{2}$.

Nach den Regeln des Polynomansatzes kann in diesem Fall mit den vier Stützstellen maximal ein Interpolationspolynom dritten Grades entwickelt werden. Es ist aber auch möglich, eine stückweise Interpolation durchzuführen. Dies hat den Vorteil, dass man den Rechenaufwand reduzieren kann. Die Genauigkeit wird dadurch aber verschlechtert. Es gilt in diesem Fall, ein Optimum zwischen erforderlicher Genauigkeit und Rechenaufwand zu finden. Bei der stückweisen Interpolation werden die Stützstellen benutzt, die dem Interpolationspunkt am nächsten liegen.

1. Lineare Interpolation

Die Interpolationsfunktion an der Stelle $x = \frac{1}{2}$ wird mit Hilfe der LAGRANGESchen Interpolationsformel folgenderweise geschrieben (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_0(x_{\frac{1}{2}})y_0 + L_1(x_{\frac{1}{2}})y_1$$

Dabei werden die Stützstellen benutzt, zwischen denen der Wert $x = \frac{1}{2}$ liegt, die Werte $x = 0$ und $x = 1$. Die Faktoren L_0 und L_1 sind (siehe Gleichung 3.10):

$$L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{x_{\frac{1}{2}} - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_0 + h - x_0 - 2h}{x_0 - x_0 - 2h} = \frac{1}{2}$$

$$L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{x_{\frac{1}{2}} - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x_0 + h - x_0}{x_0 + 2h - x_0} = \frac{1}{2}$$

Dann ist der gesuchte Wert:

$$w_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(y_0 + y_1)$$

Das Ergebnis der linearen Interpolation ist damit gleich dem arithmetischen Mittel.

2. Quadratische Interpolation

In diesem Fall ist (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_0 + L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_1 + L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_2$$

Die entsprechenden Faktoren sind (siehe Gleichung 3.10):

$$L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_0 - x_1\right)\left(x_0 - x_2\right)} = \frac{3}{8}$$

$$L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_1 - x_0\right)\left(x_1 - x_2\right)} = \frac{3}{4}$$

$$L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)}{\left(x_2 - x_0\right)\left(x_2 - x_1\right)} = -\frac{1}{8}$$

und der gesuchte Wert ist:

$$w_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{8}y_0 + \frac{3}{4}y_1 - \frac{1}{8}y_2.$$

3. Kubische Interpolation

Auf dieselbe Weise folgt (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_{-1}\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_{-1} + L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_0 + L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_1 + L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right)y_2$$

Man erhält folgende LAGRANGEFaktoren (siehe Gleichung 3.10):

$$\begin{aligned} L_{-1}\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_{-1} - x_0\right)\left(x_{-1} - x_1\right)\left(x_{-1} - x_2\right)} = -\frac{1}{16} \\ L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_0 - x_{-1}\right)\left(x_0 - x_1\right)\left(x_0 - x_2\right)} = \frac{9}{16} \\ L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_1 - x_{-1}\right)\left(x_1 - x_0\right)\left(x_1 - x_2\right)} = \frac{9}{16} \\ L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)}{\left(x_2 - x_{-1}\right)\left(x_2 - x_0\right)\left(x_2 - x_1\right)} = -\frac{1}{16} \end{aligned}$$

Damit lautet der interpolierte Wert:

$$w_{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{16}y_{-1} + \frac{9}{16}y_0 + \frac{9}{16}y_1 - \frac{1}{16}y_2$$

3.1.3 NEWTONSche Interpolationsformel

3.1.3.1 Beliebige Stützstellen

Der Nachteil des LAGRANGESchen Verfahrens, dass die LAGRANGESchen Polynome neu berechnet werden müssen, wird bei dem NEWTONSchen Verfahren vermieden. Bei dem NEWTONSchen Verfahren wird bei Berücksichtigung weiterer Stützstellen nur ein Zusatzglied addiert.

Das Verfahren geht von folgenden Ansatz aus:

$$\begin{aligned}
 p(x) = & \quad b_0 + b_1(x - x_0) \\
 & + \quad b_2(x - x_0)(x - x_1) \\
 & + \quad b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\
 & \quad \vdots \\
 & + \quad b_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Wenn ein bestimmter Interpolationswert $p(x_P)$ gesucht wird, wird im Polynomausdruck x durch x_P ersetzt.

Die Koeffizienten werden wieder so bestimmt, dass das Polynom die Stützstellen (x_n, y_n) exakt widerspiegelt. Setzt man in den NEWTONSchen Ansatz für x_P die Werte x_0, x_1, \dots, x_n ein, so erhält man ein gestaffeltes Gleichungssystem mit n Gleichungen für n Unbekannte, da jeweils die entsprechenden Faktoren $((x_P - x_i) = 0)$ Null werden und damit die Polynomglieder wegfallen. Dabei muss der Polynomwert $p(x_i)$ den Stützwert y_i annehmen.

$$\begin{aligned}
 y_0 &= b_0 + b_1 \underbrace{(x_0 - x_0)}_{=0} + \cdots & (3.13) \\
 y_1 &= b_0 + b_1(x_1 - x_0) + b_2(x_1 - x_0) \underbrace{(x_1 - x_1)}_{=0} + \cdots \\
 y_2 &= b_0 + b_1(x_2 - x_0) + b_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \\
 & \quad \vdots \\
 y_n &= b_0 + b_1(x_n - x_0) + b_2(x_n - x_0)(x_n - x_1) + \cdots \\
 & \quad + b_n(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})
 \end{aligned}$$

Das Gleichungssystem lässt sich schrittweise nach $b_0, b_1, b_2 \cdots b_n$ auflösen. Durch Einsetzen der ersten Gleichung in die zweite erhält man b_1 . Dieses wiederum in die dritte eingesetzt liefert b_2 . In die $(n + 1)$ -te Gleichung werden die zuvor bestimmten $b_0, b_1, b_2 \cdots b_{n-1}$ eingesetzt und liefern dann b_n .

$$\begin{aligned}
 b_0 &= y_0 & (3.14) \\
 b_1 &= \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)} = [x_1 x_0] \\
 b_2 &= \frac{(y_2 - y_0) - \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)}(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{(y_2 - y_1) + (y_1 - y_0) - [x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{(y_2 - y_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{(y_1 - y_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{[x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{[x_1 x_0](x_1 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{[x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{[x_1 x_0](x_1 - x_0) - [x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{-[x_1 x_0](x_2 - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 b_2 &= \frac{[x_2 x_1] - [x_1 x_0]}{(x_2 - x_0)} = [x_2 x_1 x_0]
 \end{aligned}$$

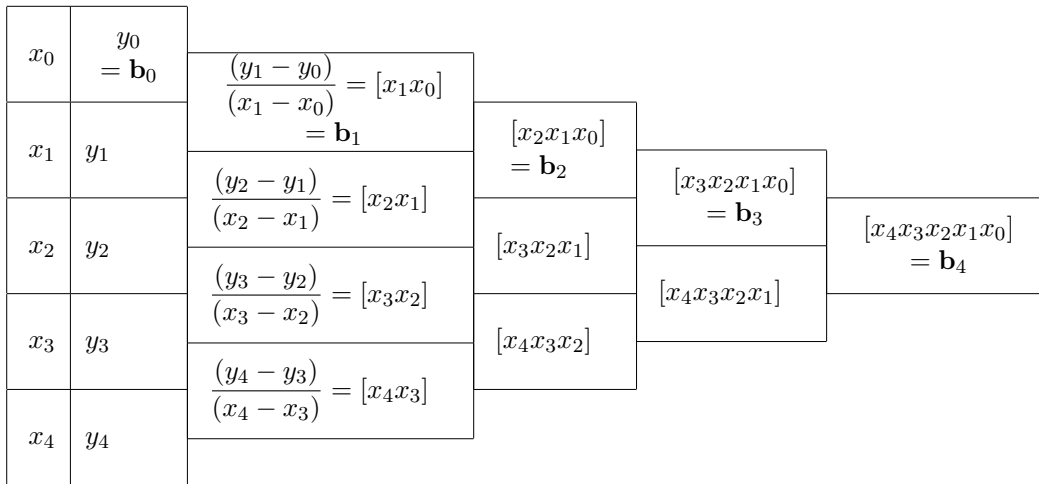
Allgemein kann man folgende gekürzte Schreibweise, die als **dividierte Differenzen** erster und höherer Ordnung bezeichnet werden, einführen:

$$\begin{aligned}
 [x_k x_i] &:= \frac{(y_k - y_i)}{(x_k - x_i)} & (3.15) \\
 [x_l x_k x_i] &:= \frac{[x_l x_k] - [x_k x_i]}{(x_l - x_i)} \\
 [x_m x_l x_k x_i] &:= \frac{[x_m x_l x_k] - [x_l x_k x_i]}{(x_m - x_i)} \\
 &\vdots \\
 [x_n x_{n-1} \cdots x_1 x_0] &:= \frac{[x_n x_{n-1} \cdots x_1] - [x_{n-1} \cdots x_1 x_0]}{(x_n - x_0)}
 \end{aligned}$$

Damit ergeben sich die gesuchten Koeffizienten zu:

$$\begin{aligned}
 b_0 &= y_0 & (3.16) \\
 b_1 &= \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)} = [x_1 x_0] \\
 b_2 &= \frac{[x_2 x_1] - [x_1 x_0]}{(x_2 - x_0)} = [x_2 x_1 x_0] \\
 b_3 &= \frac{[x_3 x_2 x_1] - [x_2 x_1 x_0]}{(x_3 - x_0)} = [x_3 x_2 x_1 x_0] \\
 &\vdots \\
 b_n &= \frac{[x_n x_{n-1} \cdots x_1] - [x_{n-1} \cdots x_1 x_0]}{(x_n - x_0)} = [x_n x_{n-1} \cdots x_1 x_0]
 \end{aligned}$$

Die Koeffizienten lassen sich besonders bequem nach dem folgenden **Rechenschema** bestimmen (in diesem Beispiel für 5 Stützstellen):



(3.17)

Entsprechend Gleichung 3.12 ergibt sich der zu interpolierende Wert y an der Stelle x zu:

$$\begin{aligned}
 y(x) \approx p(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) \\
 &+ b_2(x - x_0)(x - x_1) \\
 &+ b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\
 &+ b_4(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Diese Gleichung kann natürlich auch benutzt werden, um den Funktionsverlauf der Interpolationsfunktion $w = p(x)$ zu berechnen und eventuell grafisch darzustellen.

3.1.3.2 Äquidistante Stützstellenverteilung

Sei die **äquidistanten Stützstellenverteilung** $x_0, x_1 = x_0 + h, \dots, x_n = x_0 + nh$ (h ist die Schrittweite) gegeben, dann lautet nach NEWTON die Interpolationsfunktion:

$$p(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} (x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2! \cdot h^2} (x - x_0)(x - x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! \cdot h^n} (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \tag{3.19}$$

Die Elemente $\Delta y_0, \Delta^2 y_0, \dots, \Delta^n y_0$, werden als **finite Differenzen** bezeichnet. Dabei stellen die Exponenten nicht die Potenzierung, sondern die schrittweise Differenzenbildung dar. Vergleicht man diese Gleichung 3.19 mit der Gleichung 3.12 auf Seite 72 so erhält man:

$$\begin{aligned}
 b_0 &\simeq y_0 \\
 b_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \simeq \frac{\Delta y_0}{h} \\
 b_2 &= \frac{[x_2x_1] - [x_1x_0]}{(x_2 - x_0)} \simeq \frac{\Delta^2 y_0}{2! \cdot h^2}
 \end{aligned}
 \tag{3.20}$$

Diese Differenzen werden nach folgendem Schema berechnet:

x_0	y_0			
x_1	y_1	$\Delta y_0 = y_1 - y_0$	$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$	
x_2	y_2	$\Delta y_1 = y_2 - y_1$	$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	$\Delta^n y_0 = \Delta^{n-1} y_1 - \Delta^{n-1} y_0$
x_{n-1}	y_{n-1}	$\Delta y_{n-2} = y_{n-1} - y_{n-2}$	$\Delta^2 y_{n-2} = \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2}$	
x_n	y_n	$\Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}$		

Das Schema ist z.B. für $n = 4$:

x_0	y_0	$\Delta y_0 = y_1 - y_0$	$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$	$\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0$	$\Delta^4 y_0 = \Delta^3 y_1 - \Delta^3 y_0$
x_1	y_1	$\Delta y_1 = y_2 - y_1$	$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$	$\Delta^3 y_1 = \Delta^2 y_2 - \Delta^2 y_1$	
x_2	y_2	$\Delta y_2 = y_3 - y_2$	$\Delta^2 y_2 = \Delta y_3 - \Delta y_2$		
x_3	y_3	$\Delta y_3 = y_4 - y_3$			
x_4	y_4				

Durch rückwärtiges Einsetzen sieht man, dass jede finite Differenz eine Kombination der y -Werte der ersten Spalte ist. Es gilt z. B. :

$$\Delta^3 y_0 = y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0, \tag{3.21}$$

3.1.3.3 Beispiele zur Anwendung des Newtonschen Verfahren

- Für die Funktion $y_n = f(x_n)$ sind die Werte an den äquidistanten Stellen $x_n = x_0 + 2nh$, $n = -1; 0; 1; 2$ (siehe Tabelle) gegeben:

n	-1	0	1	2
x_n	$x_0 - 2h$	x_0	$x_0 + 2h$	$x_0 + 4h$
$f(x_n)$	y_{-1}	y_0	y_1	y_2

Gesucht ist ein Näherungswert $x = \frac{1}{2}$ für $y_{\frac{1}{2}} = f(x_0 + h)$.

Lösen Sie dieses Beispiel mit dem NEWTONSchen Verfahren und vergleichen Sie die Ergebnisse mit denen der LANGRANGESchen Interpolationsformel

- Lineare Interpolation:

$$p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{\Delta x} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)$$

In dem Beispiel beträgt $\Delta x = 2h$

$$\begin{aligned} p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{2h} (x_0 + h - x_0) \\ &= \frac{1}{2} (y_0 + y_1) \end{aligned}$$

b) Quadratische Interpolation:

$$p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{\Delta x} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right) + \frac{\Delta^2 y_0}{2! \Delta x^2} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right) \left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)$$

In dem Beispiel beträgt $\Delta x = 2h$

$$\begin{aligned} p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{1}{2}(y_0 + y_1) + \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{(2h)^2 2} (x_0 + h - x_0)(x_0 + h - x_0 - 2h) \\ &= \frac{3}{8}y_0 + \frac{3}{4}y_1 - \frac{1}{8}y_2 \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - y_1 - (y_1 - y_0) = y_2 - 2y_1 + y_0$$

Bemerkung:

Der Vorteil des NEWTONSchen Verfahrens liegt darin, dass sich die Polynome $L_i(x)$ nicht ändern, wenn die Anzahl der Stützstellen verändert wird, d.h. man braucht jedes Mal nur das zusätzliche Glied der Interpolationsfunktion zu berechnen.

2. Gegeben sind folgende Messwerte:

x	0	1	2	3	4	5
y	1	2	4	8	15	26

Bestimmen Sie den Wert $y = f(2,5)$. Wählen Sie dazu ein Polynom geeigneten Grades. Wie groß ist die Abweichung, wenn sich der Grad des Polynoms ändert?

Zur Berechnung des gesuchten Wertes mittels Polynomen verschiedenen Grades ist das NEWTONSche Verfahren geeignet. Da die gegebenen Stützstellen äquidistant sind ($h = 1$), ist seine Anwendung möglich.

Zunächst werden die finiten Differenzen berechnet:

$x_0 = 0$	$y_0 = 1$	$\Delta y_0 = 1$	$\Delta^2 y_0 = 1$	$\Delta^3 y_0 = 1$	$\Delta^4 y_0 = 0$	$\Delta^5 y_0 = 0$
$x_1 = 1$	$y_1 = 2$	$\Delta y_1 = 2$	$\Delta^2 y_1 = 2$	$\Delta^3 y_1 = 1$	$\Delta^4 y_1 = 0$	
$x_2 = 2$	$y_2 = 4$	$\Delta y_2 = 4$	$\Delta^2 y_2 = 3$	$\Delta^3 y_2 = 1$		
$x_3 = 3$	$y_3 = 8$	$\Delta y_3 = 7$	$\Delta^2 y_3 = 4$			
$x_4 = 4$	$y_4 = 15$	$\Delta y_4 = 11$				
$x_5 = 5$	$y_5 = 26$					

Daraus ist ersichtlich, dass das Interpolationspolynom maximal dritten Grades ist.

a) Lineare Interpolation

Der gesuchte Wert bei $x = 2,5$ liegt zwischen $x_2 = 2$ und $x_3 = 3$. Deshalb wird die lineare Interpolation nur zwischen diesen beiden Werte durchgeführt.

$$\begin{aligned} p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) \\ &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) \\ \underline{p(2,5)} &= \underline{6} \end{aligned}$$

b) Quadratische Interpolation

Da der gesuchte Wert bei $x = 2,5$ liegt, wird die quadratische Parabel zwischen den

Werten x_1, x_2 , und x_3 aufgespannt.

$$\begin{aligned} p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) + \frac{\Delta^2 y_2}{2!h^2} (x - x_2)(x - x_3) \\ &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) + \frac{3}{2 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3) \\ &= 4 + 2 - \frac{0,75}{2} \\ \underline{p(2,5) = 5,625} \end{aligned}$$

c) Kubische Interpolation

Die kubische Interpolationsformel benötigt vier Stützstellen.

$$\begin{aligned} p(x) &= y_1 + \frac{\Delta y_1}{h} (x - x_1) + \frac{\Delta^2 y_1}{2!h^2} (x - x_1)(x - x_2) \\ &\quad + \frac{\Delta^3 y_1}{3!h^3} (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \\ &= 2 + \frac{2}{1} (2,5 - 1) + \frac{2}{2 \cdot 1} (2,5 - 1)(2,5 - 2) \\ &\quad + \frac{1}{6 \cdot 1} (2,5 - 1)(2,5 - 2)(2,5 - 3) \\ &= 2 + 3 + 0,75 - 0,0625 \\ \underline{p(2,5) = 5,6875} \end{aligned}$$

Für das zweite Tripel ergibt sich:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) + \frac{\Delta^2 y_2}{2!h^2} (x - x_2)(x - x_3) \\ &\quad + \frac{\Delta^3 y_2}{3!h^3} (x - x_2)(x - x_3)(x - x_4) \\ &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) + \frac{3}{2 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3) \\ &\quad + \frac{1}{6 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3)(2,5 - 4) \\ &= 4 + 2 - \frac{0,75}{2} + 0,0625 \\ \underline{p(2,5) = 5,6875} \end{aligned}$$

Die Abweichung zwischen dem linearen und dem quadratischen Ergebnis ist

$$\left| \frac{5,625 - 6}{5,625} \right| = 6,7\%,$$

während die Abweichung zwischen dem quadratischen und dem kubischen Ergebnis nur

$$\left| \frac{5,6875 - 5,625}{5,6875} \right| = 1,1\%$$

beträgt. Um die Ergebnisse zu beurteilen, können die gegebenen Punkte graphisch dargestellt werden (siehe Abbildung 3.3).

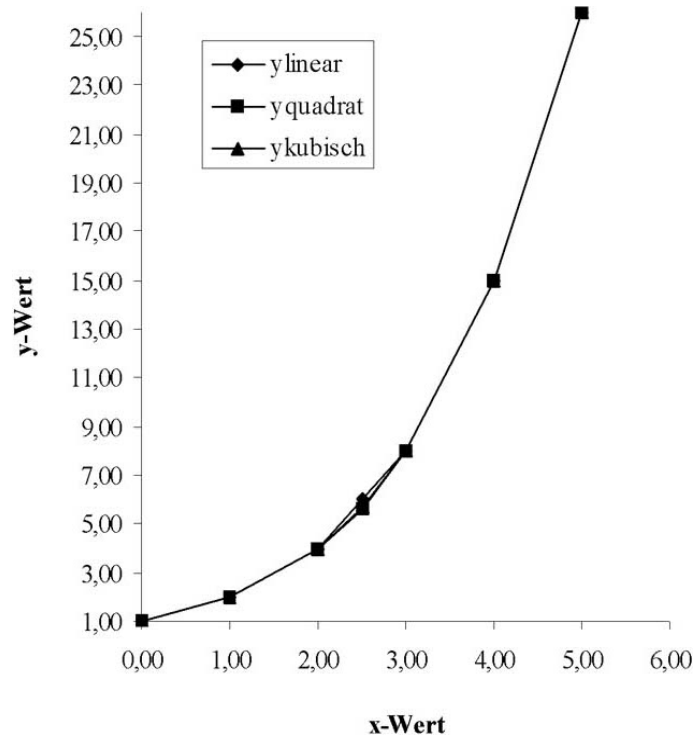


Abbildung 3.3: Darstellung der Messwerte und des interpolierten Wertes

Die graphische Darstellung zeigt, dass der gesuchte Wert tatsächlich zwischen 5 und 6 liegen soll. Es wird auch deutlich, dass die lineare Interpolation in diesem Fall kein gutes Ergebnis liefern kann. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, gegebene Punkte graphisch darzustellen und den gesuchten Wert einzuschätzen.

Im Fall eines realen Versuches ist es wichtig, genug Punkte zu haben, um die Form der Funktion mit guter Näherung zu bekommen. Dies kann festgestellt werden, wenn zusätzliche Punkte dazugenommen werden und sich die Form der Funktion nicht wesentlich ändert.

3.2 Interpolierende Polynomteilstücke (Spline)

Zur Darstellung einer gegebenen Funktion in einem Intervall kann man an Stelle eines einzigen Polynoms mit hohem Grad Abschnitte mehrerer Polynome niedrigeren Grades miteinander verknüpfen. Das klassische Beispiel sind Geradenstücke in Teilintervallen (siehe Abbildung 3.4). Dabei wird angenommen, dass die Funktion zwischen zwei Stützstellen fast linear ist. Dieses gilt vor allem, wenn die Stützstellen eng genug bei einander liegen. Derartige Approximationen sind zwar stetig, die er-

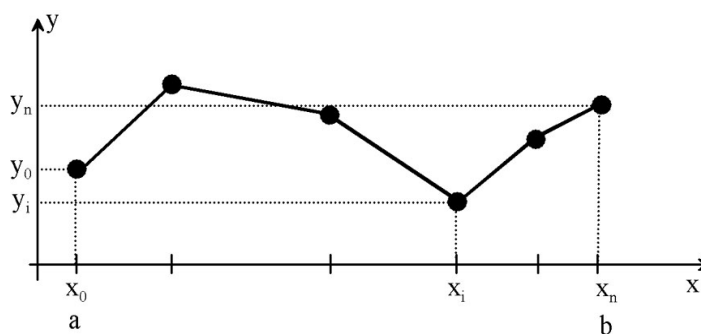


Abbildung 3.4: Darstellung von linearen Spline-Kurven

ste Ableitung ist aber unstetig, d.h. es treten Ecken beim Übergang vom einem Intervall zum anderen auf. Im Folgenden wird ein Weg beschrieben, die Methode der Spline-Interpolation, bei dem kubische Parabelbögen so zusammengesetzt werden, dass die Ecken gerundet sind, die erste und zweite Ableitung der Approximation stetig ist. Polynome höheren Grades werden in der Regel nicht verwendet, da sie stark oszillieren.

Ein gegebenes Intervall $I = (a, b)$ wird durch die x -Werte $x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_n = b$ in n **Teilintervalle** aufgeteilt. Die kubischen Parabelbögen werden so in jedes dieser Teilintervalle eingepasst, indem vorgegebene y -Werte y_i an den Stellen x_i angenommen werden. An den Übergangsstellen zwischen den Teilintervallen müssen die links- und rechtsseitige erste und zweite Ableitung übereinstimmen (siehe Abbildung 3.5). Die Stützstellen (x_i, y_i) werden die Knoten des Splines (das Wort "Spline" bezeichnete ursprünglich ein flexibles Kurvenlineal) genannt.

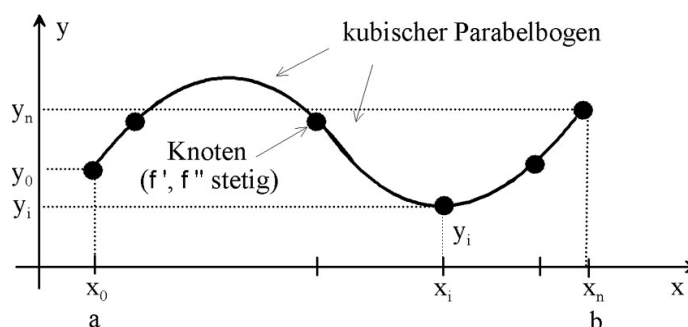


Abbildung 3.5: Darstellung von Spline-Kurven für ein kubisches System

Ein kubisches Polynom dritten Grades hat vier Koeffizienten. Allgemein lautet der Ansatz:

$$p_i(x) = c_{0i} + c_{1i}x + c_{2i}x^2 + c_{3i}x^3 \quad (3.22)$$

Die Spline-Funktion ist demnach folgendermaßen definiert:

1. $S(x)$ ist im Bereich $[a, b]$ zweimal stetig differenzierbar.
2. $S(x)$ ist in jedem Intervall $[x_i \cdots x_{i+1}]$ durch ein kubisches Polynom $p_i(x)$ gegeben

$$S(x) \equiv \sum p_i(x)$$

$$p_i(x) := a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \quad (3.23)$$

3. $S(x)$ erfüllt die Interpolationsbedingungen $S(x_i) = y_i$ für alle i von $[1 \cdots n]$ im Gebiet $[a, b]$.
4. Je nach Gestaltung der Anschlussbedingungen unterscheidet man verschiedene Arten von Spline-Funktionen. So erhält man folgende spezielle **kubische Spline-Funktionen**.

Anschlussbedingung	Bezeichnung	Bemerkung
$S(x_0) = S''(x_0) = 0$ $S(x_n) = S''(x_n) = 0$	natürlich	$S(x_0)$ und $S(x_n)$ ist die Tangente an den Graphen von $S(x)$
$S'''(x_0) = \alpha S'''(x_n) = \beta$	verallgemeinert	
$S'(x_0) = \alpha S'(x_n) = \beta$	vorgegeben	erste Ableitung am Rand
$S'''(x_0) = \alpha S'''(x_n) = \beta$	vorgegeben	dritte Ableitung am Rand
$S(x_0) = S(x_n)$ $S'(x_0) = S'(x_n)$ $S''(x_0) = S''(x_n)$	periodisch	
$p_0(x) = p_l(x)$ $p_{n-2}(x) = p_{n-1}(x)$	not-a-knot	$S'''(x_l)$ und $S'''(x_n)$ sind stetig

Bei n Segmenten ergeben sich $4n$ Koeffizienten. Entscheidend ist, dass $4n$ Bedingungen für die $4n$ Koeffizienten erwartet werden. Es gibt 4 Bedingungen an jedem Knoten (x_i, y_i) für $i = 1, 2, \dots, n - 1$ (y -Wert und Übereinstimmung der Ableitungen). Dieses liefert $4n - 4$ Bedingungen. An den Endpunkten muss der y -Wert angenommen werden, und damit sind $4n - 2$ Bedingungen gefunden, d.h. die Spline-Kurve ist nicht vollständig definiert; zwei Freiheitsgrade bleiben.

$$\left. \begin{array}{l} p_i(x_i) = y_i \\ p_i(x_i) = p_{i-1}(x_i) \\ p'_i(x_i) = p'_{i-1}(x_i) \\ p''_i(x_i) = p''_{i-1}(x_i) \end{array} \right\} \begin{array}{l} i = 0; 1; \cdots n \quad \text{Interpolationsbedingungen} \\ i = 1; \cdots n - 1 \quad \text{Anschlussbedingungen} \\ \text{der Polynome } p_i \text{ an } p_{i-1} \end{array} \quad (3.24)$$

Man kann die zweite Ableitung an den Endpunkten Null setzen und erhält so eine **natürliche Splinekurve**.

$$\begin{array}{ll} p_n(x_n) = a_n & S(x_0) \text{ und } S(x_n) \text{ ist die Tangente} \\ p''_n(x_n) = 2c_n & \text{an den Graphen von } S(x) \end{array} \quad (3.25)$$

Alternativ kann die erste Ableitung an den Endpunkten vorgegeben werden, um eine Funktion zu approximieren.

So ergibt sich ein Gleichungssystem mit $4n$ Gleichungen für $4n + 2$ Unbekannte. Die fehlenden beiden Gleichungen werden durch Vorgabe der Randbedingen abgedeckt.

$$\begin{array}{ll} p''_0(x_0) = 0 & \\ p''_n(x_n) = 0 & \text{Randbedingungen} \end{array} \quad (3.26)$$

Dieses Gleichungssystem kann nach den bekannten Methoden gelöst werden. In der Regel ist die Lösung dieses Gleichungssystems aufwendig, so dass nicht nur Gesamtschritt- sondern auch iterative Verfahren (siehe Abschnitt 1.3 Lösungsmethoden von Gleichungssystemen, Seite 22) angewandt werden müssen. Wie unten gezeigt wird, kann aber bei Benutzung eines bestimmten Schemas ein tridiagonales Gleichungssystem erzeugt werden, welches mit wenig Aufwand gelöst werden kann.

Rechenschema

Sind $n + 1$ Stützstellen x_i mit $i = 0; 1; \dots; n$ mit den Schrittweiten $h_i = x_{i+1} - x_i$ und den $n + 1$ Stützwerten y_i mit $i = 0; 1; \dots; n$ gegeben (z.B. als Messwertreihe), so kann zur Interpolation mittels **kubischer Spline-Funktionen**

$$S(x) \equiv \sum_{i=0}^{n-1} p_i(x)$$

$$p_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \tag{3.27}$$

mit n Teilfunktionen für die Geltungsbereichen $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ folgendes Berechnungsschema (siehe Gleichungen 3.24 bis 3.26) verwendet werden.

Schritt	Berechnung	Gültigkeitsbereich	Bemerkung
1	$a_i = y_i$	$i = 0, 1, \dots, n$	Aus Gleichung 3.24 Interpolationsbedingung $p_i(x_i) = y_i$, für alle Stützstellen
2	$c_0 = c_n = 0$		Für natürliche Splines gilt $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ $p''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_i)$ $p''(x_0) = 2c_0 = 0$ $p''(x_n) = 2c_n = 0$
3	$\frac{h_{i-1}c_{i-1} + (h_{i-1} + h_i)2c_i + h_i c_{i+1}}{3} = \frac{3}{h_i}(a_{i+1} - a_i) - \frac{3}{h_{i-1}}(a_i - a_{i-1})$	$i = 1, \dots, n$	Aus Gleichung 3.24 Anschlussbedingungen $p_{i+1}(x_{i+1}) = p_i(x_{i+1})$
4	$b_i = \frac{1}{h_i}(a_{i+1} - a_i) - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} - 2c_i)$	$i = 0, 1, \dots, n$	$p'_{i+1}(x_{i+1}) = p'_i(x_{i+1})$
5	$d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)$	$i = 0, 1, \dots, n$	$p''_{i+1}(x_{i+1}) = p''_i(x_{i+1})$

Die Gleichung im 3. Schritt der Tabelle stellt ein lineares Gleichungssystem von $n - 1$ Gleichungen für die Unbekannten $c_1; c_2; \dots; c_{n-1}$ dar.

In der Matrixschreibweise besitzt es die Form:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{R} \tag{3.28}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & & & & & & \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & & & & & & \\ & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & h_{n-3} & 2(h_{n-3} + h_{n-2}) & h_{n-2} & & & & \\ & & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} & & & \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \frac{3}{h_3}(a_4 - a_3) - \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) \\ \vdots \\ \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) - \frac{3}{h_{n-3}}(a_{n-2} - a_{n-3}) \\ \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Die Matrix \mathbf{A} ist tridiagonal, symmetrisch, diagonaldominant, positiv definit und besitzt nur positive Elemente. Damit ist diese Matrix stets invertierbar und stets eindeutig lösbar. Als Lösungsmethode kann vorteilhafter Weise der GAUSSsche Algorithmus für tridiagonale Matrizen (siehe Abschnitt 1.3.1 Lösungen von Gleichungssystemen, GAUSSscher Algorithmus, Seite 24) benutzt werden.

Beispiel zur Anwendung der Splinefunktion:

Folgende Messwerte sind als Stützstellen und -werte gegeben.

i	0	1	2	3	4
x_i	-1	-0,5	0	0,5	1
y_i	0,5	0,8	1	0,8	0,5

Für diese 5 Wertepaare soll eine natürliche kubische Spline-Funktion gefunden werden. Nach der Definition der Spline-Funktionen werden durch die 5 Wertepaare 4 Teilfunktionen $i = 1; 2; 3; 4$

$$p_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

mit einem jeweiligen Geltungsbereich von $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ gesucht.

Entsprechend des Rechenschemas werden folgende fünf Schritte ausgeführt.

Schritt	Berechnung	Ergebnis
1	$a_i = y_i$	$a_0 = 0,5$ $a_1 = 0,8$ $a_2 = 1,0$ $a_3 = 0,8$ $a_4 = 0,5$
2	$c_0 = c_4 = 0$	$c_0 = 0$ $c_4 = 0$
3	$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 \\ 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}$ $= \begin{bmatrix} \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \frac{3}{h_3}(a_4 - a_3) - \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} 2(0,5 + 0,5) & 0,5 & 0 \\ 0,5 & 2(0,5 + 0,5) & 0,5 \\ 0 & 0,5 & 2(0,5 + 0,5) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}$ $= \begin{bmatrix} \frac{3}{0,5}(1,0 - 0,8) - \frac{3}{0,5}(0,8 - 0,5) \\ \frac{3}{0,5}(0,8 - 1,0) - \frac{3}{0,5}(1,0 - 0,8) \\ \frac{3}{0,5}(0,5 - 0,8) - \frac{3}{0,5}(0,8 - 1,0) \end{bmatrix}$	$c_1 = -0,043$ $c_2 = -1,029$ $c_3 = -0,043$
4	$b_i = \frac{1}{h_i}(a_{i+1} - a_i) - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} - 2c_i)$	$b_0 = 0,601\bar{6}$ $b_1 = 0,7571\bar{6}$ $b_2 = -0,7358\bar{3}$ $b_3 = -0,614\bar{3}$
5	$d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)$	$d_0 = -0,028\bar{6}$ $d_1 = -0,657\bar{3}$ $d_2 = 0,657\bar{3}$ $d_3 = 0,028\bar{6}$

Damit ergeben sich nach Gleichung 3.23 folgende Teil-Spline-Funktionen:

$$p_i(x) := a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

Teil-Spline-Funktion			
$p_0(x) =$	$0,5+$	$0,601\bar{6}(x + 1)-$	$0,028\bar{6}(x + 1)^3$
$p_1(x) =$	$0,8+$	$0,7571\bar{6}(x + 0,5)-$	$0,043(x + 0,5)^2 - 0,657\bar{3}(x + 0,5)^3$
$p_2(x) =$	$1,0-$	$0,7358\bar{3}x-$	$1,029x^2 + 0,657\bar{3}x^3$
$p_3(x) =$	$0,8-$	$0,614\bar{3}(x - 0,5)-$	$0,043(x - 0,5)^2 + 0,028\bar{6}(x - 0,5)^3$

Die Teil-Spline-Funktionen gelten jeweils auf dem Intervall $x_i \leq x \leq x_{i+1}$. Die grafische Darstellung des Splines zeigt Abbildung 3.6:

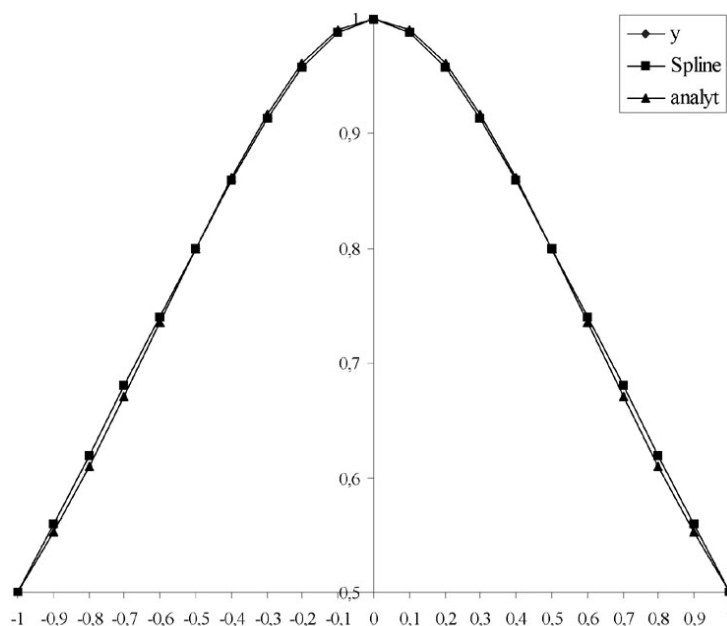


Abbildung 3.6: Interpolierte Spline-Funktion

Man erkennt, dass der Spline die ursprüngliche analytische Funktion

$$y = \frac{1}{x^2 + 1}$$

sehr gut nachbildet. Die maximale Abweichung zur analytischen Lösung beträgt 0,010244; dies entspricht 1,68%.

3.3 Kriging-Verfahren

Mit Kriging wird eine Familie spezieller Interpolationsverfahren bezeichnet, die auf folgendes Problem zielt:

Die Probenahme an einem Ort liefert Informationen für bestimmte raumbezogene Punkte. Es ist aber dadurch nicht bekannt, welche Werte für die zu messenden Variablen zwischen diesen Punkten vorliegen. Kriging ist ein Verfahren, das ermöglicht, die Werte an Zwischenpunkten oder den Durchschnitt über einen gesamten Block zu berechnen. Die verschiedenen Spezialverfahren basieren dabei alle auf der Bildung gewichteter Mittelwerte der raumbezogenen Variablen. Blockschätzungen sind vorwiegend im Bergbau notwendig, während Punktschätzungen für Kartendarstellungen eingesetzt werden, was im Folgenden erläutert wird.

Die einzelnen Kriging-Verfahren unterscheiden sich entweder in der Art der zu schätzenden Zielgrößen oder in ihrer methodischen Erweiterung zur Einbeziehung zusätzlicher Informationen.

Zusätzliche Informationen über das räumliche Verhalten einer ortsabhängigen Variablen bestehen in der Kenntnis anderer Messgrößen, die in Beziehung zu der betrachtenden Variablen stehen. Bekannt in der hydrogeologischen Praxis sind z.B. korrelierende Wasserinhaltsstoffe oder zeitliche Wiederholungsmessungen von Grundwasserdruckhöhen.

Gemeinsam sind allen Kriging-Verfahren die folgenden **Vorteile** gegenüber anderen Interpolationsverfahren:

- Kriging liefert den "besten" Schätzwert
- Kriging bezieht die Kenntnis der räumlichen Struktur der Variablen, das Variogramm, in die Schätzung mit ein.
- Die individuelle räumliche Anordnung des Messstellennetzes im Bezug auf das Interpolationsgitter wird berücksichtigt.
- Die Zuverlässigkeit der Ergebnisse wird für jeden Schätzwert in Form des Kriging-Fehlers angegeben.

Beachte:

Auch bei den Kriging-Verfahren muss beachtet werden, dass durch die mathematischen Verfahren **keine Informationsgewinn** erreicht werden kann. Es wird nur der Informationsgehalt der Messwerte (Stützwerte) verarbeitet. Dabei können durchaus Interpolationsergebnisse entstehen, die physikalischen Gesetzen widersprechen (z. B. Grundwasserisohypsen durch Vorfluter). Will man physikalisch korrekte Interpolationen erhalten, so ist eine feinquantisierte Simulation mittels physikalischer Modelle (z. B. Grundwasserströmungsmodelle) notwendig und sinnvoll. Deshalb bieten derartige Simulationsprogramme interne Grafikroutinen zur Isolinienerzeugung an.

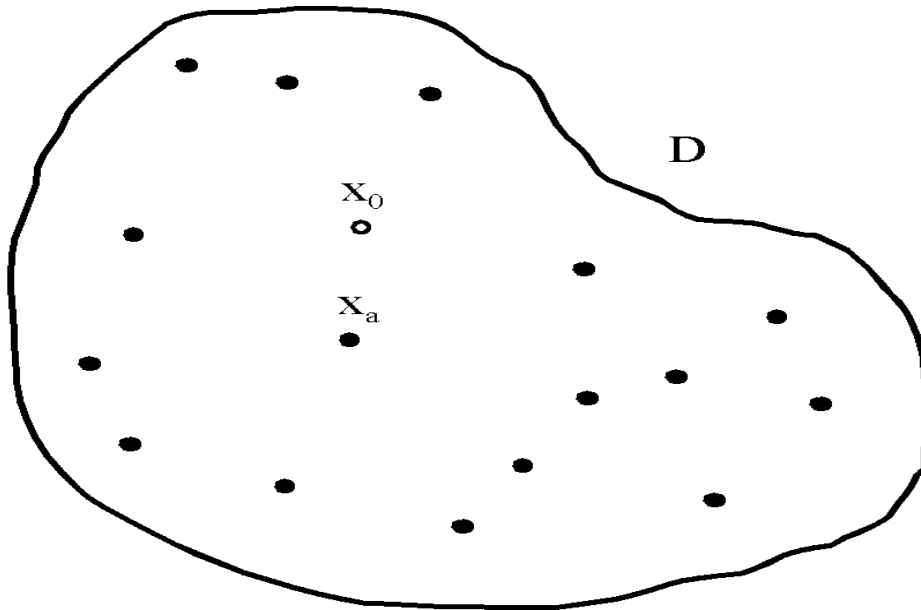


Abbildung 3.7: Darstellung des Kriging-Problems

Um die Kriging-Verfahren zu verstehen, müssen folgende Begriffe aus der Geostatistik bekannt sein:

Mittelwert	$m =$	$\frac{1}{n} \sum_{a=1}^n Z_a$
Erwartungswert	$E[Z] =$	$\int z \cdot p(z) dz = m,$ wobei $p(z)$ die Dichtefunktion ist
Varianz	$\text{var}(Z) =$	$\sigma^2 = E[(Z - E[Z])^2] = E[(Z - m)^2]$
Kovarianz zweier Zufallsvariablen Z_i, Z_j	$\text{cov}(Z_i, Z_j) =$	$E[(Z_i - m_i)(Z_j - m_j)] = \sigma_{ij}$
Korrelations- koeffizient	$\rho_{ij} =$	$\frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_i^2 \sigma_j^2}}$
Variogramm	$\gamma(\vec{h}) =$	$\frac{1}{2} E \left[\left(Z(\vec{x} + \vec{h}) - Z(\vec{x}) \right)^2 \right]$

Z ist eine ortsabhängige Zufallsvariable mit n bekannten Messwerten Z_a . Die Dichtefunktion $p(z)$ ist ein Maß dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit Z den Wert z_i annimmt. Das Variogramm ist ein Maß für die Variabilität einer Zufallsfunktion, durch Berechnung der Ungleichheit zweier Werte, die Punkten mit Abstand den Vektor \vec{h} entsprechen.

Dann kann das Kriging-Problem entsprechend Abbildung 3.7 dargestellt werden:

Wir haben eine Anzahl von Messwerten $Z(\vec{x}_a)$, wobei Z eine Zufallsvariable und \vec{x}_a die Messstellen eines Bereiches D sind.

Wir nehmen dann an, dass $Z(\vec{x}_a)$ eine Untermenge der Zufallsfunktion $Z(\vec{x})$ ist, die folgende Eigenschaften hat:

Sie ist eine stationäre Funktion 2. Ordnung, d.h.

1. der Erwartungswert ist konstant über dem Bereich D $E [Z (\vec{x} + \vec{h})] = E [Z (\vec{x})]$

2. die Kovarianz zwischen zwei Punkten ist nur vom Vektor \vec{h} abhängig, der diese Punkte verbindet:
 $\text{cov} [Z (\vec{x} + \vec{h}), Z (\vec{x})] = C (\vec{h})$

Auf Grund dieser Annahmen wollen wir ein gewichtetes Mittel berechnen, um einen Schätzwert für die Stelle \vec{x}_0 zu bekommen

Der Kriging-Schätzer $Z^* (\vec{x}_0)$ stellt eine Linearkombination gewichteter Probenwerte Z_i und n benachbarter Punkte dar:

$$Z^* (\vec{x}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z (\vec{x}_i) \quad (3.32)$$

Die Gewichte λ_i sind so zu bestimmen, dass der Schätzwert $Z^* (\vec{x}_0)$ des unbekanntem wahren Wertes die folgenden Bedingungen erfüllt:

1. $Z^* (\vec{x}_0)$ sei erwartungstreu, d.h. $E^* [Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)] = 0$

2. Der mittlere quadratische Fehler $E [Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)]^2$ sei ein Minimum.

Unter der Annahme der Stationarität ist der Erwartungswert $E [Z (\vec{x}_i)] = m$ und $Z (\vec{x}_0) = m$. Die Bedingung 1. (Erwartungstreue) liefert somit:

$$E \left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z (\vec{x}_i) - Z (\vec{x}_0) \right] = \sum_{i=1}^n \lambda_i m - m = m \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right) = 0 \quad (3.33)$$

Hieraus folgt, dass die Summe der Gewichte 1 sein muss.

Mit Hilfe des Variogramms kann der Erwartungswert des quadratischen Fehlers ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} E [Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)]^2 &= \text{var} (Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)) \\ &= 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_0) - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j (\vec{x}_i - \vec{x}_j) - \gamma (\vec{x}_0 - \vec{x}_0) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Um die Fehlervarianz unter der Nebenbedingung $1 \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \right)$ zu minimieren, wird ein LAGRANGE-Multiplikator μ eingeführt. Dann wird folgende Funktion minimiert:

$$\varphi = \text{var} (Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)) - 2\mu \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right)$$

Das Minimum erhält man durch Null-Setzen der partiellen Ableitungen $\frac{\partial \phi}{\partial \lambda_i}$ ($i = 1, \dots, n$) und $\frac{\partial \phi}{\partial \mu}$. Dies führt zu dem linearen Kriging-Gleichungssystem (KGS) mit $n + 1$ Gleichungen:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \lambda_j \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_j) + \mu &= \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_0) \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j &= 1 \end{aligned}$$

In Matrixform wird das KGS wie folgt geschrieben:

$$\begin{bmatrix} \gamma(\vec{x}_1 - \vec{x}_1) & \gamma(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) & \dots & \gamma(\vec{x}_1 - \vec{x}_n) & 1 \\ \gamma(\vec{x}_2 - \vec{x}_1) & \gamma(\vec{x}_2 - \vec{x}_2) & \dots & \gamma(\vec{x}_2 - \vec{x}_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma(\vec{x}_n - \vec{x}_1) & \gamma(\vec{x}_n - \vec{x}_2) & \dots & \gamma(\vec{x}_n - \vec{x}_n) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \\ \gamma(\vec{x}_2 - \vec{x}_0) \\ \vdots \\ \gamma(\vec{x}_n - \vec{x}_0) \\ 1 \end{bmatrix}$$

Dabei ist im Fall von Punktschätzungen $\gamma(\vec{x}_i - \vec{x}_i) = \gamma(0) = 0$, d.h. die Diagonale ist mit Null besetzt.

Da im stationären Fall die Beziehung $\gamma(\vec{h}) = C(0) - C(\vec{h})$ gilt, kann $\gamma(\vec{h})$ im KGS durch die Kovarianz $C(\vec{h})$ ersetzt werden. Dadurch erhält die Diagonale der Matrix die größten Elemente. In numerischer Hinsicht ist sie vorzuziehen und daher in den meisten Programmen verwirklicht.

Die Kriging-Schätzvarianz σ_K^2 für Punktschätzungen ergibt sich aus obigen Gleichungen:

$$\sigma_K^2 = \text{var}(Z^*(\vec{x}_0) - Z(\vec{x}_0)) = \mu + \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(\vec{x}_i - \vec{x}_0) \quad (3.35)$$

In einem Sonderfall, bei dem keine räumliche Abhängigkeit der Daten existiert, erhält man für die Gewichte $\lambda_i = \frac{1}{n}$. Der Kriging-Schätzer ist jetzt das einfache arithmetische Mittel der benachbarten Proben.

Folgende Eigenschaften zeichnen den Kriging-Schätzer aus:

- Das KGS ist nur lösbar, wenn die Determinante der Matrix $(\gamma_{ij}) \neq 0$ ist. Praktisch bedeutet dies, dass eine Probe nicht doppelt auftreten darf (d.h. mit identischen Koordinaten)
- Kriging liefert einen exakten Interpolator.
- Das KGS hängt nur von $\gamma(\vec{h})$ bzw. $C(\vec{h})$ ab, nicht jedoch von den Werten der Variablen Z in den Probenpunkten x_i . Bei identischer Datenkonfiguration braucht das KGS nur ein Mal gelöst zu werden.
- Mit Hilfe des Schätzfehlers σ_K können Vertrauensgrenzen der Schätzung angegeben werden.

In der Praxis ist eine Reihe von Kriging-Verfahren entwickelt und angewandt worden, die komplexere Situationen betrachten, z.B. instationäre Variablen, Raum-Zeit-Abhängigkeit usw.

3.4 Aufgaben

Aufgaben zu 3:

Interpolieren Sie die Aufgaben 1 und 2 mittels der Verfahren:

- analytische Potenzfunktion
- LAGRANGESche Interpolationsformel
- NEWTONSche Interpolationsformel
- Spline-Funktion

1. Für die Funktion der Normalverteilung $y(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$, die auszugswise tabelliert ist:

x	1,00	1,20	1,40	1,60	1,80	2,00
$y(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$	0,2420	0,1942	0,1497	0,1109	0,0790	0,0540

wird der Wert $y(x)$ für $x = 1,5$ gesucht.

2. Interpolieren Sie die Funktion $y = \sqrt{x}$ für die Werte $x = 1,03$ und $x = 1,26$ an Hand der Tabelle.

x	1,00	1,05	1,10	1,15	1,20	1,25	1,30
$y = \sqrt{x}$	1,00000	1,02470	1,04881	1,07238	1,09544	1,11803	1,14017

3. Durch die drei Stützpunkte $(1, -2)$, $(2, 3)$, $(3, 1)$, ist eine ganze rationale Funktion möglichst niedrigen Grades zu legen.
Wie ändert sich diese Interpolationsfunktion, wenn man auch noch den Stützpunkt $(4, 4)$ dazunimmt?

