

Einführung in die Numerik WS2018/19

Dozent: Prof. Dr. ANDREAS FISCHER

21. November 2018

Inhaltsverzeichnis

I	Interpolation	2
1	Grundlagen	2
2	Interpolation durch Polynome	4
2.1	Existenz und Eindeutigkeit	4
2.2	NEWTON-Form des Interpolationspolynoms	5
2.3	Interpolationsfehler	6
3	Interpolation durch Polynomsplines	9
3.1	Polynomsplines	9
3.2	Interpolation durch kubische Polynomsplines	9
3.3	Interpolation mit kubischen C^2 -Splines	10
3.4	Eine Minimaleigenschaft kubischer C^2 -Interpolationssplines	13
3.5	Interpolationsfehler bei kubischer C^2 -Interpolation	14
II	numerische Integration (Quadratur)	15
1	Integration von Interpolationspolynomen	15
2	NEWTON-COTES-Formeln	16
3	spezielle NEWTON-COTES-Formeln	17
4	Zusammengesetzte NEWTON-COTES-Formeln	20
5	GAUSS'sche Quadraturformeln	21
III	direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme	23
1	GAUSS'scher Algorithmus für quadratische Systeme	23
1.1	Grundform des GAUSS'schen Algorithmus	23
1.2	Pivotisierung	26
1.3	LU-Faktorisierung	26
1.4	GAUSS'scher Algorithmus für trigonale Systeme	29
2	CHOLESKY-Faktorisierung für symmetrische positiv definite Matrizen	31
2.1	Existenz der CHOLESKY-Faktorisierung	31
2.2	Berechnung des CHOLESKY-Faktors	32
3	Lineare Quadratmittelprobleme	34
3.1	Die GAUSS'schen Normalgleichungen	35
3.2	Orthonormalisierungsverfahren nach HOUSEHOLDER	36
3.3	Anwendung der Ausgleichsrechnung	36
4	Kondition linearer Gleichungssysteme	37
IV	Kondition von Aufgaben und Stabilität von Algorithmen	38
1	Maschinenzahlen und Rundungsfehler	38
2	Fehleranalyse	39
V	Newton-Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme	40

1	Das NEWTON-Verfahren	40
2	Gedämpftes NEWTON-Verfahren	41
VI	lineare Optimierung	42
1	Ecken und ihre Charakterisierung	42
2	Simplex-Verfahren	43
3	Die Tableauform des Simplex-Verfahrens	44
4	Revidiertes Simplex-Verfahren	45
5	Bestimmung einer ersten zulässigen Basislösung	46
	Anhang	48
A	Listen	48
A.1	Liste der Theoreme	48
A.2	Liste der benannten Sätze, Lemmata und Folgerungen	49
	Index	50

Vorwort

Kapitel I

Interpolation

1. Grundlagen

Aufgabe:

Gegeben sind $n + 1$ Datenpaare $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, alles reelle Zahlen und paarweise verschieden.

Gesucht ist eine Funktion $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die die Interpolationsbedingungen

$$F(x_0) = f_0, \dots, F(x_n) = f_n \quad (1)$$

genügt.

Definition (Stützstellen, Stützwerte)

Die x_0 bis x_n werden Stützstellen genannt.

Die f_0 bis f_n werden Stützwerte genannt.

Die oben gestellte Aufgabe wird zum Beispiel durch

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

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

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

■ Beispiel 1.1

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

Interpolation im

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

2. Interpolation durch Polynome

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

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 \quad (1)$$

und umgekehrt.

2.1. Existenz und Eindeutigkeit

Satz 2.1

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

Beweis. • Existenz: Sei $j \in \{0, \dots, n\}$ und $L_j : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

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

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

$$L_j(x_k) = \begin{cases} 1 & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases} = \delta_{jk} \quad (2)$$

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

$$p(x) := \sum_{j=0}^n f_j \cdot L_j(x) \quad (3)$$

so ist $p \in \Pi_n$ und außerdem erfüllt p wegen Gleichung (2) die Interpolationsbedingung Gleichung (1)

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

Definition (Interpolationspolynom)

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

► Bemerkung 2.2

- Die Darstellung Gleichung (3) heißt LAGRANGE-Form des Interpolationspolynoms.
- Um mittels Gleichung (3) einen Funktionswert $p(x)$ zu berechnen, werden $\mathcal{O}(n^2)$ Operationen benötigt; bei gleichabständigen Stützstellen kann man diesen Aufwand auf $\mathcal{O}(n)$ verringern. Ändern sich die Stützwerte, kann man durch Wiederverwendung von den $L_j(x)$ das $p(x)$ in $\mathcal{O}(n)$ Operationen berechnen.
- Man kann zeigen, dass L_0 bis L_n eine Basis von Π_n bilden.

2.2. Newton-Form des Interpolationspolynoms

$$p(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + c_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \quad (4)$$

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

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

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

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

► Bemerkung 2.3

- Der Aufwand um die Koeffizienten c_0, \dots, c_n zu ermitteln ist $\mathcal{O}(n^2)$. Kommt ein Datenpaar hinzu, kann man Gleichung (4) um einen Summanden erweitern und mit $\mathcal{O}(n)$ Operationen c_{n+1} bestimmen.
- Sind die Koeffizienten c_0, \dots, c_n in Gleichung (4) bekannt, dann benötigt man zur Berechnung von $p(x)$ $\mathcal{O}(n)$ Operationen.
- Die Polynome $N_0, \dots, N_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

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

heißen NEWTON-Basispolynome und bilden eine Basis von Π_n .

Die Koeffizienten c_0, \dots, c_n ergeben sich wegen Gleichung (1) auch als Lösung des folgenden linearen Gleichungssystems:

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

Die Systemmatrix dieses linearen Gleichungssystems ist eine reguläre untere Dreiecksmatrix.

Zu effizienten Berechnung eines Funktionswertes $p(x)$ nach Gleichung (4) mit gegebenen Koeffizienten

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

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

Für beliebiges n liefert das den folgenden Algorithmus:

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

Input: $n, x, c_0, \dots, c_n, x_0, \dots, x_n$

```

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

2.3. Interpolationsfehler

Definition (Maximum-Norm)

Die Norm

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

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

Satz 2.5

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

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

Definition 2.6 (Stützstellensystem)

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

Satz 2.7 (Satz von Faber 1914)

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

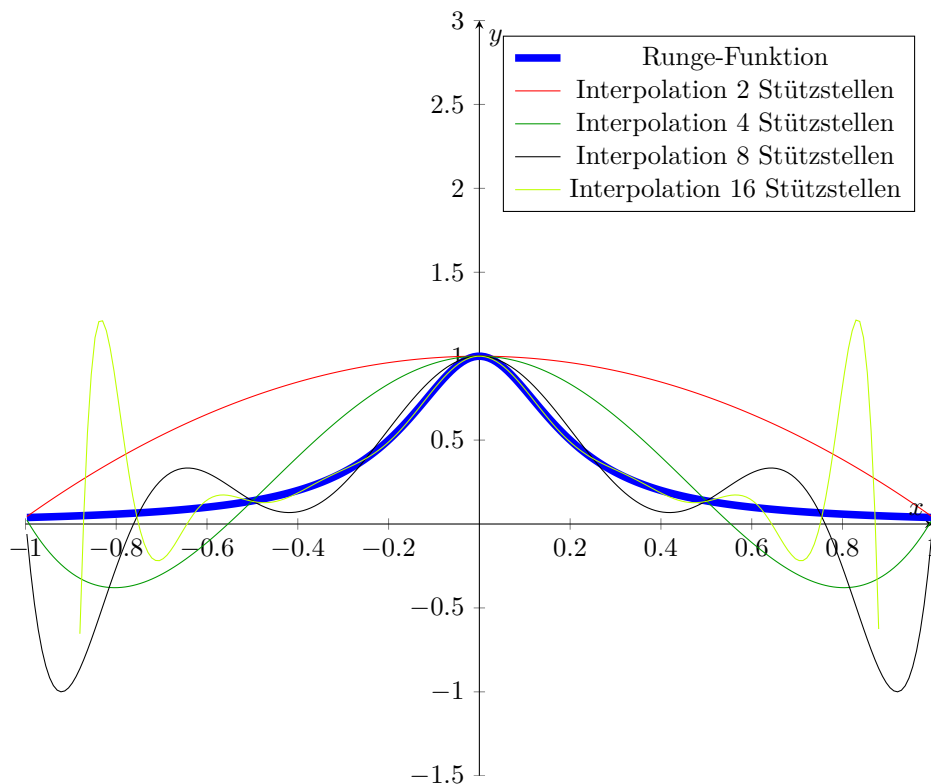
Nach einem Resultat von ERDÖS/VERTESI (1980) gilt sogar, dass $(p_n(x))$ fast überall divergiert.

■ **Beispiel 2.8 (Runge)**

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

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

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

**Anmerkung**

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

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

Satz 2.9

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

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

wobei $w(x) = (x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$

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

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

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

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

Da $w^{(n+1)} = (n+1)!$, erhält man

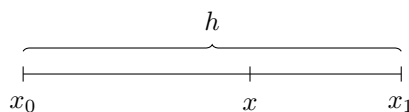
$$K = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}$$

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

■ Beispiel 2.10

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

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



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

3. Interpolation durch Polynomsplines

3.1. Polynomsplines

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

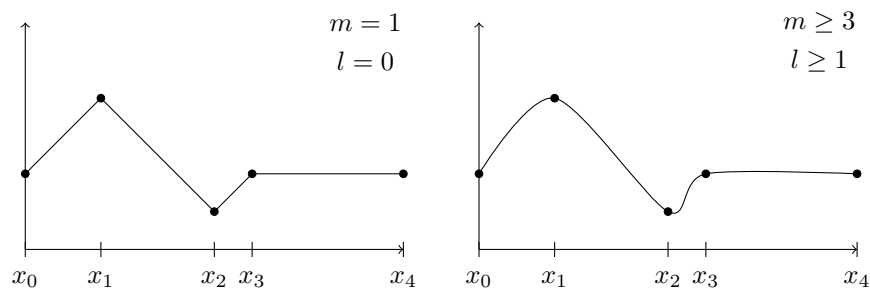
Definition 3.1 (Polynomspline)

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

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

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

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



3.2. Interpolation durch kubische Polynomsplines

Gegeben sei eine Zerlegung Δ und die Stützwerte f_0, \dots, f_n . Gesucht ist eine Funktion $s \in \mathcal{S}_3^l(\Delta)$ mit $l = 1, 2$ derart, dass

$$s(x_k) = f_k \quad \text{für } k = 0, \dots, n \tag{1}$$

Jede derartige Funktion heißt kubischer Interpolationspline.

Konstruktion eines solchen Splines:

$$\begin{aligned} h_k &:= x_{k+1} - x_k \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1 \\ m_k &:= s'(x_k) \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1 \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} s_k(x_k) &= f_k \quad \text{und} \quad s_k(x_{k+1}) = f_{k+1} \\ s'_k(x_k) &= m_k \quad \text{und} \quad s'_k(x_{k+1}) = m_{k+1} \end{aligned} \quad (3)$$

Diese liefern:

$$\begin{aligned} d_k &= s_k(x_k) = f_k \\ c_k &= s'_k(x_k) = m_k \end{aligned} \quad (4)$$

und damit:

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

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

$$\begin{pmatrix} h_k^3 & h_k^2 \\ 3h_k^2 & 2h_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{k+1} - f_k - m_k h_k \\ m_{k+1} - m_k \end{pmatrix} \quad (5)$$

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

Satz 3.2

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

$$s'(x_0) = m_0, \dots, s'(x_n) = m_n$$

genügt. Außerdem gilt: $s|_{[x_k, x_{k+1}]} = s_k$ für $k=0, \dots, n-1$ mit s_k entsprechend Gleichung (2), wobei sich a_k, b_k, c_k, d_k aus Gleichung (4) und Gleichung (5) ergeben.

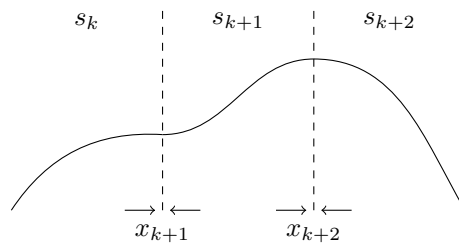
Für die Wahl der m_k gibt es verschiedene Möglichkeiten, zum Beispiel:

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

3.3. Interpolation mit kubischen C^2 -Splines

Damit ein kubischer Interpolationsspline s zu $\mathcal{S}_3^2(\Delta)$ gehört, muss neben den Forderungen in Gleichung (3) die Stetigkeit von s'' an den Stützstellen x_1, \dots, x_{n-1} gewährleistet sein. Also hat man zusätzliche Bedingungen

$$s''_k(x_{k+1}) = s''_{k+1}(x_{k+1}) \quad \text{für } k = 0, \dots, n-2$$



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

$$3a_k h_k + b_k = b_{k+1} \quad \text{für } k = 0, \dots, n-2 \quad (6)$$

Aus Gleichung (5) folgt

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

für $k = 0, \dots, n-1$. Wegen Gleichung (6) erhält man für $k = 0, \dots, n-2$

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

Damit folgt

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

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

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

genügen, wobei λ_k, μ_k, r_k durch

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

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

(a) **natürliche Randbedingungen:**

$$s''(x_0) = s''(x_n) = 0 \quad (7)$$

Diese sind gleichbedeutend mit

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

Also folgt

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

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

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

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

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

$$s'(x_0) = f'(a) \quad \text{und} \quad s'(x_n) = f'(b) \quad (8)$$

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

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

$$f'(a) = f'(b) \quad (9)$$

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

$$s'(x_0) = s'(x_n) \quad \text{und} \quad s''(x_0) = s''(x_n) \quad (10)$$

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

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

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

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

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

3.4. Eine Minimaleigenschaft kubischer C^2 -Interpolationssplines

Durch

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

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

Satz 3.3

Seien $f \in C^2[a, b]$, Δ eine Zerlegung von $[a, b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, \dots, n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (9)) erfüllt, gilt:

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

Beweis. Durch Nachrechnen sieht man

$$\int_a^b (f''(x))^2 dx - \int_a^b (f''(x) - s''(x))^2 dx = \int_a^b (s''(x))^2 dx + 2 \int_a^b [f''(x) - s''(x)] s''(x) dx$$

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

$$J = [f'(x) - s'(x)] s''(x) \Big|_a^b - \int_a^b [f'(x) - s'(x)] s'''(x) dx$$

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

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

und damit

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

Nutzt man nun noch Gleichung (7), Gleichung (8) bzw. Gleichung (9) mit Gleichung (10), so folgt $J = 0$. \square

Anmerkung

- Gleichung (7): natürliche Randbedingungen: $s''(a) = s''(b) = 0$
- Gleichung (8): vollständige Randbedingungen: $s(a') = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$
- Gleichung (9) und Gleichung (10): periodische Randbedingungen: $s'(a) = s'(b)$, $s''(a) = s''(b)$, $f'(a) = f'(b)$

3.5. Interpolationsfehler bei kubischer C^2 -Interpolation

Anmerkung

Die CAUCHY-SCHWARZ-Ungleichung hat folgende Form:

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

Satz 3.4

Seien $f \in C^2[a, b]$, Δ eine Zerlegung von $[a, b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, \dots, n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (9)) erfüllt, gilt:

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

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

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

$$\begin{aligned} \|r'\|_\infty^2 &= |r'(z) - \underbrace{r'(z^0)}_{z^0 \text{ NST}}|^2 \\ &\stackrel{*}{=} \left| \int_{z^0}^z r''(x) \cdot 1 dx \right|^2 \\ &\stackrel{\text{CS}}{\leq} \int_{z^0}^z r''(x)^2 dx \cdot \underbrace{\int_{z^0}^z 1^2 dx}_{= z - z^0 \leq h} \\ &\stackrel{\text{UG}}{\leq} h \|r''\|_2^2 \end{aligned} \tag{11}$$

*: Anwendung des Hauptsatzes der Integralrechnung

Sei nun $y \in [a, b]$ so gewählt, dass $|r(y)| = \|r\|_\infty$. Dann gilt $|y - y_0| \leq h/2$ für die y am nächsten liegende Nullstelle y_0 von r . O.B.d.A. sei $y_0 \leq y$. Mit Gleichung (11) ergibt sich

$$\|r\|_\infty = |r(y) - r(y_0)| = \left| \int_{y_0}^y r'(x) dx \right| \leq \max |r'(x)| \cdot \int_{y_0}^y dx \leq \frac{1}{2} \|r'\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^{3/2} \|r''\|_2$$

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

► Bemerkung 3.5

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

Kapitel II

numerische Integration (Quadratur)

1. Integration von Interpolationspolynomen

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

$$J(f) := \int_a^b f(x) dx$$

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

$$Q_n(f) := J(p_n) = \int_a^b p_n(x) dx$$

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

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

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

2. Newton-Cotes-Formeln

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

$$x_{k+1} = x_k + h \quad \text{für } k = 0, \dots, n-1 \quad (1)$$

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

3. spezielle Newton-Cotes-Formeln

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

$$Q_1(f) = f_0 \int_a^b L_0(x) dx + f_1 \int_a^b L_1(x) dx$$

Mit

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

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

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

folgt

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

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

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

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

Satz 3.1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$W := \int_a^b (x-a)(x-x_1)(x-b) dx$$

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

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

$$W = \int_a^b (y+h)y(y-h) dy = 0 \quad (1)$$

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

$$\bar{W} = \int_{-h}^h |(y+h)y(y-h)| dy = -2 \int_0^h (y^2 - h^2)y dy = \frac{1}{2}h^4 \quad (2)$$

Wegen Satz 2.9 haben wir

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

für alle $x \in [a, b]$. Insbesondere ist daher $x \mapsto f'''(\xi(x))$ eine Funktion aus $C^4[a, b]$. Durch Integration folgt mit Gleichung (1):

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b f(x) - p_2(x) dx \right| &= \frac{1}{6} \left| f'''(x_1) \int_a^b w(x) dx + \int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1)) w(x) dx \right| \\ &= \frac{1}{6} \left| \int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1)) w(x) dx \right| \\ &\leq \max_{x \in [a, b]} \left\{ |f'''(x) - f'''(x_1)| \cdot \int_a^b |w(x)| dx \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

Da $f \in C^4[a, b]$ erhält man mit dem Mittelwertsatz

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

mit $\zeta \in (a, b)$. Deshalb und wegen Gleichung (2) folgt aus Gleichung (3) weiter

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

► Bemerkung 3.2

Durch verfeinerte Abschätzungen kann man in Satz 3.1 b)

$$|Q_2(f) - J(f)| \leq \frac{1}{90} h^5 \|f^{(4)}\|_\infty \quad (4)$$

erreichen. Auch für Quadraturformeln $Q_n(f)$ mit $n > 2$ lassen sich entsprechende Ergebnisse für den Quadraturfehler herleiten, insbesondere hat der Quadraturfehler für $n = 3$ mit $f \in C^4[a, b]$ die Ordnung h^5 und für $n = 4$ mit $f \in C^6[a, b]$ die Ordnung h^7 .

4. Zusammengesetzte Newton-Cotes-Formeln

Um den Quadraturfehler weiter zu reduzieren, bietet es sich unter Berücksichtigung der Abschätzung des Quadraturfehlers in Satz 3.1 an, das Intervall $[a, b]$ in r Teilintervalle zu zerlegen und auf jedem der Teilintervalle dieselbe Quadraturformel (niedriger Ordnung) anzuwenden. Dazu wird das Intervall $[a, b]$ in $l = rn$ Elementarintervalle gleicher Länge zerlegt, wobei n die Ordnung des auf jedem Teilintervall zu verwendenden Interpolationspolynoms ist. Mit f_0, \dots, f_l werden die Funktionswerte an den Stellen $x_k = a + kh$ für $k = 0, \dots, l$ bezeichnet, wobei $h = \frac{b-a}{l}$ die Länge des Elementarintervalls ist. Die zusammengesetzte Trapezformel ist dann gegeben durch:

$$T_h(f) = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{l-1} + f_l)$$

die zusammengesetzte SIMPSON-Formel durch

$$S_h(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{l-2} + 4f_{l-1} + f_l)$$

Satz 4.1

(a) Für $f \in C^2[a, b]$ gilt

$$|T_h(f) - J(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_\infty$$

(b) Für $f \in C^4[a, b]$ gilt

$$|S_h(f) - J(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis. Wendet man Satz 3.1 auf die SIMPSON-Formel (unter Beachtung von Gleichung (4)) für $[x_k, x_{k+2}]$ anstelle von $[a, b]$ an, so folgt

$$|S_h(f) - J(f)| = \left| S_h(f) - \sum_{k=0}^{r-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x) dx \right| \leq \frac{1}{90} r h^5 \|f^{(4)}\|_\infty \leq \frac{b-a}{2 \cdot 90} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

und damit Behauptung b). Behauptung a) zeigt man auf ähnliche Weise. \square

5. Gauss'sche Quadraturformeln

Wir gehen zunächst vom Interpolationsfehler (vgl. Satz 2.9)

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} w_n(x) \quad \text{für } x \in [a, b]$$

mit $w_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n)$ aus. Bezogen auf das ganze Intervall $[a, b]$, kann man etwa $\|f - p_n\|_\infty$ oder $\|f - p_n\|_2$ als Maß für diesen Fehler verwenden. Da man über $f^{(n+1)}$ nicht verfügt, wird anstelle dessen $\|w_n\|_\infty$ oder $\|w_n\|_2$ untersucht. Dieses Fehlermaß ist offenbar nur von der Lage der Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ abhängig. Zur Vereinfachung beschränkt man sich zunächst auf das Intervall $[-1, 1]$. Die Aufgabe, die Funktion

$$F_\infty : \begin{cases} \mathbb{R}^{n+1} & \rightarrow \mathbb{R} \\ F_\infty(x_0, \dots, x_n) & \mapsto \max_{x \in [-1, 1]} |(x - x_0) \dots (x - x_n)| \end{cases}$$

unter der Bedingung $(x_0, \dots, x_n) \in [-1, 1]^{n+1}$ zu minimieren, hat als Lösung die Nullstellen des sogenannten TSCHEBYSCHOW-Polynoms T_{n+1} der Ordnung $n + 1$. Die Funktion

$$F_2 : \begin{cases} \mathbb{R}^{n+1} & \rightarrow \mathbb{R} \\ F_2(x_0, \dots, x_n) & \mapsto \int_{-1}^1 (x - x_0)^2 \dots (x - x_n)^2 dx \end{cases}$$

wird unter der Bedingung $(x_0, \dots, x_n) \in [-1, 1]^{n+1}$ durch die Nullstellen des sogenannten LEGENDRE-Polynoms P_{n+1} minimiert. Die LEGENDRE-Polynome können rekursiv wie folgt definiert werden:

$$\begin{aligned} P_0(t) &= 1 \\ P_1(t) &= t \\ &\vdots \\ (k+1)P_{k+1}(t) &= (2k+1)tP_k(t) - kP_{k-1}(t) \end{aligned}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ und $k = 1, 2, \dots$. Für $n = 1$ erhält man zum Beispiel $P_2(t) = t^2 - \frac{1}{3}$ mit den Nullstellen $x_{1/2} = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}$. Das Interpolationspolynom zu diesen Stützstellen und den Stützwerten $f_0 = f(x_0)$ sowie $f_1 = f(x_1)$ lautet dann (in der LAGRANGE-Form)

$$q_1(x) = f_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx &= -\frac{\sqrt{3}}{2} \int_{-1}^1 \left(x - \frac{\sqrt{3}}{3} \right) dx = 1 \\ \int_{-1}^1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx &= 1 \end{aligned}$$

hat man die GAUSS-LEGENDRE-Quadraturformel für das Integral $\int_{-1}^1 f(x)dx$ für $n = 1$:

$$f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

Man kann zeigen, dass die GAUSS-LEGENDRE-Quadraturformel mit $n+1$ Stützstellen (also den Nullstellen von P_{n+1}) Polynome bis zum Grad $2n+1$ exakt integriert. Bei den geschlossenen NEWTON-COTES-Formeln ist dies nur bis Grad n (falls n ungerade) bzw. bis zum Grad $n+1$ (falls n gerade) möglich (vgl. Übungsaufgabe). Spezielle Modifikationen der GAUSS-LEGENDRE-Quadratur beziehen einen Randpunkt (GAUSS-RADAU) oder beide Randpunkte (GAUSS-LOBATTO) des Integrals mit ein.

Falls über $[a, b]$ zu integrieren ist, führt eine Variablentransformation auf ein Integral über $[-1, 1]$ zum Ziel. Mit

$$y = \frac{2}{b-a} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)$$

ergibt sich $x = \frac{b-a}{2}y + \frac{a+b}{2}$, $dx = \frac{b-a}{2}dy$ und

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}y + \frac{a+b}{2}\right) dy$$

Kapitel III

direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme

1. Gauss'scher Algorithmus für quadratische Systeme

1.1. Grundform des Gauss'schen Algorithmus

■ Beispiel 1.1

$$\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 & = & 10 \quad E_1 \\ x_1 + 3x_2 + 6x_3 & = & 25 \quad E_2 \\ -x_1 + 2x_2 + x_3 & = & 6 \quad E_3 \end{array}$$

$$E_1 \text{ behalten} \rightarrow E'_1, E_2 - \frac{1}{2}E_1 \rightarrow E'_2, E_3 + \frac{1}{2}E_1 \rightarrow E'_3$$

$$\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 & = & 10 \quad E'_1 \\ 4x_2 + 4x_3 & = & 20 \quad E'_2 \\ x_2 + 3x_3 & = & 11 \quad E'_3 \end{array}$$

$$E'_1 \text{ behalten} \rightarrow E''_1, E'_2 \text{ behalten} \rightarrow E''_2, E'_3 - \frac{1}{4}E'_2 \rightarrow E''_3$$

$$\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 & = & 10 \quad E''_1 \\ 4x_2 + 4x_3 & = & 20 \quad E''_2 \\ 2x_3 & = & 6 \quad E''_3 \end{array}$$

$$\Rightarrow x_3 = 3, x_2 = 2, x_1 = 1$$

Alle drei Systeme sind äquivalent, das heißt ihre Lösungsmengen sind gleich. Das letzte System wird Dreieckssystem oder System in Zeilenstufenform oder gestaffeltes System genannt.

Gegeben seien $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b = (b_i) \in \mathbb{R}^n$. Gesucht ist, falls vorhanden, eine Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \vdots & & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

bzw. in Matrix-Schreibweise: $Ax = b$.

Prinzipielles Vorgehen

1. Vorwärtselimination (unter Voraussetzung der Durchführbarkeit): Schrittweise Transformation der erweiterten Koeffizientenmatrix

$$(A, b) = (A^{(1)}, b^{(1)}) \rightarrow (A^{(2)}, b^{(2)}) \rightarrow \dots \rightarrow (A^{(n)}, b^{(n)}) = (U, z)$$

wobei U eine obere Dreiecksmatrix ist. Der Eliminationsschritt $(A^{(k)}, b^{(k)}) \rightarrow (A^{(k+1)}, b^{(k+1)})$ für $k = 1, \dots, n-1$ verwendet die Eliminationsfaktoren

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

um die i -te Zeile der neuen Matrix aus der alten Matrix zu bestimmen

$$\begin{aligned} \text{neue Zeile } i &= \text{alte Zeile } i && \text{für } i = 1, \dots, k \\ \text{neue Zeile } i &= \text{alte Zeile } i - l_{ik} \cdot \text{neue Zeile } k && \text{für } i = k+1, \dots, n \end{aligned}$$

2. Rücksubstitution (unter Voraussetzung der Durchführbarkeit): Lösung des Gleichungssystems $Ux = z$ nach x für gegebenes U, z

■ Algorithmus 1.2 (Vorwärtselimination)

Input: n, A, b

```

1  do k = 1, n-1
2  do i = k+1, n
3    lik = aik / akk
4    bi = bi - likbk
5  do j = k+1, n
6    aij = aij - likakj
7  end do
8  end do
9  end do
```

Output: (U, z) und l_{ik} für $i > k$. U steht in der oberen Hälfte von A mit Hauptdiagonale, b enthält z , die Zahlen l_{ik} lassen sich in der unteren Hälfte von A abspeichern.

■ Algorithmus 1.3 (Rücksubstitution)

Input: n, U, z

```

1  do i = n, 1, -1
2    s = 0
3    do j = i+1, n
4      s = s + uijxj
```

```

5   end do
6   end do

```

Output: x

Der Aufwand bei uneingeschränkter Durchführbarkeit von Algorithmus 1.2 ist $\sim \frac{2}{3}n^3$ und Algorithmus 1.3 ist $\sim n^2$

Durchführbarkeit

Der Algorithmus 1.2 ist genau dann durchführbar, wenn $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ für alle $k = 1, \dots, n-1$ gilt. Gilt auch $a_{nn}^{(n)} \neq 0$, so folgt $u_{ii} \neq 0$ für $i = 1, \dots, n$ und damit die Durchführbarkeit von Algorithmus 1.3.

Definition 1.4 (streng diagonaldominant)

Eine Matrix $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt streng diagonaldominant, wenn

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \quad \text{für alle } i = 0, \dots, n$$

Lemma 1.5

Ist die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ streng diagonaldominant, so sind Algorithmus 1.2 und Algorithmus 1.3 durchführbar

Beweis (nicht in der Vorlesung). Die Matrix $A^{(1)}$ sei streng diagonaldominant. Weiter seien die Matrizen $A^{(k)}$ für ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$ durch Vorwärtselimination erzeugt und streng diagonaldominant. Dies zieht $|a_{kk}^{(k)}| > 0$ nach sich, so dass die Erzeugung von $A^{(k+1)}$ durch Vorwärtselimination wohldefiniert ist. Es wird nun gezeigt, dass $A^{(k+1)}$ wieder streng diagonaldominant ist. Da $A^{(1)} = A$ als streng diagonaldominant vorausgesetzt wurde, folgt dann die Durchführbarkeit der gesamten Vorwärtselimination durch vollständige Induktion. Sei $i > k$ eine Zeile der Matrix $A^{(k+1)}$. Dann hat man

$$\begin{aligned}
 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}^{(k+1)}| &= \sum_{\substack{j=k+1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}^{(k+1)}| = \sum_{\substack{j=k+1 \\ j \neq i}}^n \left| a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{kj}^{(k)} a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
 &\leq \sum_{\substack{j=k+1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}^{(k)}| + \left| \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \sum_{\substack{j=k+1 \\ j \neq i}}^n |a_{kj}^{(k)}| \\
 &< |a_{ii}^{(k)}| - |a_{ik}^{(k)}| + \left| \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \left(|a_{kk}^{(k)}| - |a_{ki}^{(k)}| \right) \\
 &= |a_{ii}^{(k)}| - \left| \frac{a_{ik}^{(k)} a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
 &\leq \left| a_{ii}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
 &= |a_{ii}^{(k+1)}|
 \end{aligned}$$

Falls $i \leq k$, so ändert sich $A^{(k+1)}$ gegenüber $A^{(k)}$ bezüglich der Zeile i nicht. Also ist $A^{(k+1)}$ streng diagonaldominant und man schließt auf die Durchführbarkeit der Vorwärtselimination für $k = 1, \dots, n-1$ und insbesondere auf $|a_{ii}^{(n)}| > 0$ für $i = 1, \dots, n$. Die Matrix $A^{(n)}$ enthält die Matrix U im oberen Dreieck, deren Diagonalelemente

sind gerade $a_{11}^{(n)}, \dots, a_{nn}^{(n)}$, also ist auch die Rücksubstitution wohldefiniert. \square

1.2. Pivotisierung

Die Regularität der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist zwar äquivalent zur Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems $Ax = b$, für jeden beliebigen Vektor $b \in \mathbb{R}^n$, jedoch sichert die Regularität nicht die Durchführbarkeit der Grundform des GAUSS'schen Algorithmus. Um die Durchführbarkeit bei regulärem A zu erzwingen, kann man eine Spaltenpivotisierung der Matrix durchführen. Dabei werden in jedem Durchlauf der Vorwärtselimination auf bestimmte Weise Zeilen der Matrix (A, b) vertauscht:

- Bestimme $p = p(k) \in \{k, \dots, n\}$, sodass $|a_{pk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$.
 k -te Spalte von $A^{(k)}$ heißt Pivotspalte, $a_{pk}^{(k)}$ heißt Pivotelement, die Regularität von A sichert dann $a_{pk}^{(k)} \neq 0$.
- Vertausche die Zeilen p und k in der Matrix $(A^{(k)}, b^{(k)})$.
praktisch: Zeilentausch nicht ausführen, sondern einen Permutationsvektor mitführen.
formal: Beschreibung der Zeilen- und Spaltenvertauschungen durch Permutationsmatrizen. Dazu sei $\pi : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$ eine Permutation und e_i bezeichne den i -ten kanonischen Einheitsvektor. Dann heißt $P_\pi = (e_{\pi(1)}, \dots, e_{\pi(n)})$ Permutationsmatrix.

Satz 1.6

Ist die Matrix A regulär, so ist der GAUSS'sche Algorithmus mit Spaltenpivotisierung (bei exakter Arithmetik) durchführbar.

Weitere Pivotisierungstechniken sind insbesondere die Zeilenpivotisierung (in Analogie zur Spaltenpivotisierung) und die vollständige Pivotisierung.

1.3. LU-Faktorisierung

Der k -te Schritt von Algorithmus 1.2 (ohne Pivotisierung) lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} A^{(k+1)} &= L_k A^{(k)} \\ b^{k+1} &= L_k b^{(k)} \end{aligned} \tag{1}$$

mit der GAUSS'schen Eliminationsmatrix

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & -l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & -l_{n,k} & & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} k \\ \\ \\ k\text{-te Zeile} \end{matrix}$$

Satz 1.7

Es gelten

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & l_{n,k} & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix} = L$$

Beweis. (a) Zunächst erkennt man, dass $L_k = \mathbb{1} - l_k e_k^T$, wobei $\mathbb{1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Einheitsmatrix und $e_k \in \mathbb{R}^n$ den k -ten kanonischen Einheitsvektor bezeichnen. Damit erhält man

$$\begin{aligned} L_k(\mathbb{1} + l_k e_k^T) &= (\mathbb{1} - l_k e_k^T)(\mathbb{1} + l_k e_k^T) \\ &= \mathbb{1} - l_k e_k^T + l_k e_k^T - l_k e_k^T l_k e_k^T \\ &\stackrel{(*)}{=} \mathbb{1} \end{aligned}$$

(*) $l_k e_k^T = 0$, da l_k erst an der $k+1$ -ten Stelle einen Wert hat, aber e_k nur an der k -ten Stelle eine 1 hat

(b) Es wird durch vollständige Induktion gezeigt, dass

$$L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{n-1}^{-1} = \mathbb{1} + \sum_{i=1}^k l_i e_i^T \quad (2)$$

für $k = 1, \dots, n-1$ gilt. Daraus ergibt sich unmittelbar die zweite Aussage des Satzes. Für $k = 1$ folgt Gleichung (2) direkt aus Teil (a). Sei nun Gleichung (2) für ein $k < n-1$ erfüllt. Dann folgt mit $e_i^T l_{k+1} = 0$ für $i < k$, dass

$$\begin{aligned} L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{k+1}^{-1} &= \left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^k l_i e_i^T \right) L_{k+1}^{-1} \\ &= \left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^k l_i e_i^T \right) (\mathbb{1} + l_{k+1} e_{k+1}^T) \\ &= \mathbb{1} + \sum_{i=1}^k l_i e_i^T + l_{k+1} e_{k+1}^T + \sum_{i=1}^k l_i e_i^T l_{k+1} e_{k+1}^T \\ &= \mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k+1} l_i e_i^T \end{aligned} \quad \square$$

Aus $A^{(k+1)} = L_k A^{(k)}$ nach Gleichung (1) folgt

$$A = A^{(1)} = L_1^{-1} A^{(2)} = \dots = L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{n-1}^{-1} A^{(n)} = L \cdot U$$

und analog $b = Lz$.

Satz 1.8

Seien $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ gegeben. Falls Algorithmus 1.2 ohne Pivotisierung durchführbar ist, dann gilt $A = LU$ mit der oberen Dreiecksmatrix $U = A^{(n)}$ und der unteren Dreiecksmatrix $L = (l_{ik})$ mit

$$l_{ik} = \begin{cases} 0 & i < k \\ 1 & i = k \\ l_{ik} & i > k \end{cases}$$

■ Algorithmus 1.9 (LU-Version der Grundform des Gauss'schen Algorithmus)

Input: A, b

```
1  compute L,U
2  solve Lz=b
3  solve Ux=z
```

Output: x, L, U

Der Aufwand an Rechenoperationen bei uneingeschränkter Durchführbarkeit: $\frac{2}{3}n^3 + 2n^2$.

Ein Vorteil der LU-Version besteht darin, dass man mit einer ermittelten LU-Faktorisierung von A das Gleichungssystem $Ax = b$ für mehrere rechte Seiten b mit dem Aufwand von je $2n^2$ lösen kann.

Satz 1.10

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär. Dann gibt es eine durch Zeilenvertauschungen aus A hervorgegangene Matrix \tilde{A} , für die Algorithmus 1.2 ohne Pivotisierung durchführbar ist und $\tilde{A} = \tilde{L}\tilde{U}$.

Beweis. Nach Satz 1.6 ist der GAUSS'sche Algorithmus mit Spaltenpivotisierung durchführbar. Wendet man die dabei vorkommenden Zeilenvertauschungen vor Beginn von Algorithmus 1.2 auf A an, entsteht die Matrix \tilde{A} . Für $A = \tilde{A}$ liefert Satz 1.8 die Darstellung $\tilde{A} = \tilde{L}\tilde{U}$. Die Regularität von U folgt aus der Regularität von A mit dem Determinantenmultiplikationssatz. \square

1.4. Gauss'scher Algorithmus für trigonale Systeme

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ trigonal, das heißt

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & \beta_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (3)$$

Die Speicherung kann mittels geeigneter Vektoren, etwa

$$\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T \quad \beta = (\beta_1, \dots, \beta_{n-1}, 0)^T \quad \gamma = (0, \gamma_2, \dots, \gamma_n)^T \quad (4)$$

erfolgen. Angenommen Algorithmus 1.2 ist ohne Pivotisierung durchführbar. Dann gibt es eine LU-Faktorisierung von A . Aus der Trigonalität von A und aus $A = LU$ ergibt sich die folgende Gestalt für L und U

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad U = \begin{pmatrix} d_1 & \beta_1 & & & \\ & d_2 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & d_n \end{pmatrix} \quad (5)$$

mit $d_1 = \alpha_1$ und $l_k = \frac{\gamma_k}{d_{k-1}}$, $d_k = \alpha_k - l_k \beta_k$ für $k = 2, \dots, n$.

■ Algorithmus 1.11 (LU-Faktorisierung einer trigonalen Matrix ohne Pivotisierung)

Input: α, β, γ entsprechend Gleichung (3) und Gleichung (4)

```

1  d1 = α1
2  do k = 2, n
```



```

3    $l_k = \gamma_k / d_{k-1}$ 
4    $d_k = \alpha_k - l_k \beta_k$ 
5   end do

```

Output: $l = (0, l_2, \dots, l_n)^T$, $d = (d_1, \dots, d_n)^T$ für Gleichung (5)

► **Bemerkung 1.12**

Der Aufwand für Algorithmus 1.11 beträgt etwa $3n$ Operationen. Auch das Lösen der Dreieckssysteme $Lz = b$ und $Ux = z$ ist billig (je etwa $2n^2$). Bei Spaltenpivotisierung kommt in U im Allgemeinen eine zweite Nebendiagonale hinzu. Die dargestellte Verfahrensweise lässt sich auf Systeme mit Bandmatrizen erweitern, die mehr als je eine untere bzw. obere Nebendiagonale besitzen.

2. Cholesky-Faktorisierung für symmetrische positiv definite Matrizen

Definition 2.1 (positiv definit)

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt positiv definit, wenn

$$x^T A x > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$$

Bekannt sind folgende Zusammenhänge:

- Falls A symmetrisch ist, besitzt A nur reelle Eigenwerte.
- Sei A symmetrisch. Dann ist A genau dann positiv definit, wenn alle Eigenwerte von A positiv sind.
- Eine Matrix A ist genau dann positiv definit, wenn ihr symmetrischer Anteil $\frac{1}{2}(A + A^T)$ positiv definit ist.

2.1. Existenz der Cholesky-Faktorisierung

Satz 2.2

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und positiv definit. Dann existiert genau eine untere Dreiecksmatrix $L = (l_{ik})$ mit $l_{kk} > 0$, sodass

$$A = LL^T$$

Beweis. Mittels vollständiger Induktion. Für $n = 1$ gilt $A = (a_{11})$ mit $a_{11} > 0$ (wegen positiver Definitheit). Also gilt die Behauptung genau für $L = (l_{11})$ mit $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$. Sei nun die Behauptung für $n - 1$ erfüllt. Die Matrix A kann man wegen ihrer Symmetrie mit geeigneten $A_{n-1} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$, $a \in \mathbb{R}^{n-1}$ und $a_{nn} \in \mathbb{R}$ schreiben als

$$A = \begin{pmatrix} A_{n-1} & a \\ a^T & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Aus der positiven Definitheit von A folgt

$$0 < \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = x^T A_{n-1} x \quad (2)$$

das heißt A_{n-1} ist positiv definit. Nach Induktionsvoraussetzung gibt es genau eine untere Dreiecksmatrix $L_{n-1} = (l_{ij}^{(n-1)})$ mit $l_{kk}^{(n-1)} > 0$ für $k = 1, \dots, n-1$. Um A als Produkt der Form $L_n L_n^T$ mit einer unteren Dreiecksmatrix $L_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit ausschließlich positiven Hauptdiagonalelementen darzustellen, ist der Ansatz

$$L_n = \begin{pmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^T & l_{nn} \end{pmatrix}$$

mit freien Parametern $c \in \mathbb{R}^{n-1}$ und $l_{nn} > 0$ die einzige Möglichkeit. Der Ansatz liefert

$$L_n L_n^T = \begin{pmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^T & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{n-1}^T & c \\ 0 & l_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{n-1} L_{n-1}^T & L_{n-1} c \\ c^T L_{n-1}^T & c^T c + l_{nn}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{n-1} & a \\ a^T & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Also müssen c und l_{nn} den Bedingungen $L_{n-1} c = a$ und $c^T c + l_{nn}^2 = a_{nn}$ genügen. Da L_{n-1} regulär ist, folgt

$$c = L_{n-1}^{-1} a \quad (3)$$

so dass c eindeutig bestimmt ist. Es wird nun gezeigt, dass $a_{nn} - c^T c > 0$ ist und damit $l_{nn}^2 > 0$ folgt. Somit ist dann l_{nn} in L_n durch die Bedingung $l_{nn} > 0$ eindeutig festgelegt auf $l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - c^T c}$. Da A positiv definit ist und die Darstellung Gleichung (1) mit $A_{n-1} = L_{n-1} L_{n-1}^T$ nach Induktionsvoraussetzung angenommen werden kann, folgt

$$0 < (x^T, y) A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x^T L_{n-1} L_{n-1}^T x + 2y a^T x + y^2 a_{nn}$$

für alle $(x, y) \in \mathbb{R}^{n-1} \times \mathbb{R}$ mit $(x^T, y) \neq 0$. Setzt man speziell $(x, y) = (\hat{x}, \hat{y})$ mit

$$\hat{x} = (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a \quad \text{und} \quad \hat{y} = -1$$

so folgt mit Gleichung (3) das Gewünschte.

$$0 < a^T (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a - 2a^T (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a + a_{nn} = -c^T c + a_{nn} \quad \square$$

2.2. Berechnung des Cholesky-Faktors

Sei A wieder symmetrisch und positiv definit. Aus $A = LL^T$ folgt durch elementweises Vergleichen beider Matrizen

$$a_{ik} = (LL^T)_{ik} = \sum_{j=1}^l l_{ij} (L^T)_{kj} = \sum_{j=1}^k l_{ij} l_{kj}$$

Dies sind $\frac{n(n+1)}{2}$ Gleichungen für $\frac{n(n+1)}{2}$ Unbekannte l_{ik} , da A symmetrisch ist. Diese Gleichungen lassen sich durch spaltenweise Bestimmung der l_{ik} in L wie folgt lösen.

■ Algorithmus 2.3 (Cholesky-Faktorisierung)

Input: n , A symmetrisch und positiv definit

```

1  do k = 1, n
2    lkk =  $\sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2}$ 
3    do i = k+1, n
4      lik =  $\left( a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} l_{kj} \right) / l_{kk}$ 
5    end do
6  end do
```

Output: l_{ik} für $1 \leq k \leq i \leq n$

► **Bemerkung 2.4**

Der Aufwand von Algorithmus 2.3 beträgt etwa $\frac{n^3}{3}$ Operationen. Der Algorithmus ist genau dann durchführbar, wenn A symmetrisch und positiv definit ist. Andernfalls entsteht im Verlauf des Verfahrens ein nicht-positiver Wert unter der Wurzel. Um das Ziehen der Quadratwurzel zu vermeiden, kann man anstelle von $A = LL^T$ die Umformung

$$A = LL^T = LD^{-1}D^2D^{-1}L^T$$

mit $D = \text{diag}(l_{11}, \dots, l_{nn})$ verwenden. Dann ist $\tilde{L} = LD^{-1}$ genau eine untere Dreiecksmatrix mit $l_{kk} = 1$ für $k = 1, \dots, n$ und $\tilde{D} = D^2$ eine Diagonalmatrix mit $\tilde{D} = \text{diag}(l_{11}^2, \dots, l_{nn}^2)$, sodass die sogenannte LDL-Faktorisierung $A = LL^T = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T$ folgt.

■ **Algorithmus 2.5 (Wurzelfreie Cholesky-Faktorisierung)**

Input: n , A symmetrisch und positiv definit

```

1  do k = 1, n
2     $\widetilde{d}_{kk} = a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 \widetilde{d}_{jj}$ 
3    do i = k+1, n
4       $\widetilde{l}_{ik} = \left( a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \widetilde{d}_{jj} l_{ij} l_{kj} \right) / \widetilde{d}_{kk}$ 
5    end do
6  end do
```

Output: $\widetilde{l}_{ik}, \widetilde{d}_{kk}$ für $1 \leq k \leq i \leq n$

Der Aufwand beträgt etwa $\frac{n^3}{3}$. Hat man die Faktorisierung $A = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T$ bestimmt, so ist auch die LU-Faktorisierung von A bekannt: $A = \tilde{L}U$ mit $U = \tilde{D}\tilde{L}^T$.

3. Lineare Quadratmittelprobleme

Das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ besitzt genau dann eine Lösung, wenn $\text{rang}(A) = \text{rang}((A, b))$. Falls $m > n$, so heißt das Gleichungssystem überbestimmt. Im Allgemeinen gilt dann $\text{rang}(A) \leq n < \text{rang}((A, b))$, so dass das Gleichungssystem keine Lösung besitzt. Der Fall der Nichtlösbarkeit kann auch für $m \leq n$ eintreten, falls $\text{rang}(A) < m$. Anstelle des Systems $Ax = b$ betrachtet man folgende Ersatzaufgabe:

$$\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min \quad (1)$$

die als lineares Quadraturmittelproblem bezeichnet wird. Kurz schreibt man dafür auch $Ax \cong b$.

Satz 3.1

Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Da ist das lineare Quadraturmittelproblem Gleichung (1) lösbar.

Beweis. Die restringierte Optimierungsaufgabe

$$f(y) = \|y - b\|_2 \rightarrow \min \quad \text{mit } y \in L = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\} \quad (2)$$

ist offenbar genau dann lösbar, wenn Gleichung (1) eine Lösung besitzt. Wegen $f(0) = \|b\|_2$ und $0 \in L$ hat

$$f(y) \rightarrow \min \quad \text{mit } y \in L, \|y - b\|_2 \leq \|b\|_2 \quad (3)$$

dieselbe Lösungsmenge wie Gleichung (2). Der zulässige Bereich $\{x \in L \mid \|y - b\|_2 \leq \|b\|_2\}$ dieser Optimierungsaufgabe ist nicht-leer, abgeschlossen und beschränkt. Da zudem $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ stetig ist, besitzt Gleichung (3) nach dem Satz von WEIERSTRASS eine Lösung. Also sind auch Gleichung (2) und Gleichung (1) lösbar. \square

■ Beispiel 3.2

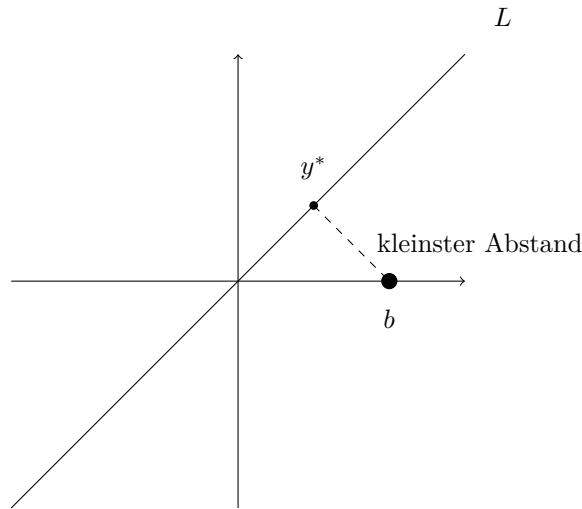
Seien

$$A = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dann ist der lineare Teilraum L gegeben durch $L = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x \mid x \in \mathbb{R} \right\}$. Anschaulich ergibt sich, dass eine Lösung $y^* \in L$ von Gleichung (2) der Bedingung $(y^* - b) \perp L$ genügen muss. Daraus folgt

$$\left(\begin{pmatrix} y_1^* \\ y_2^* \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x = 0 \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} y_1^* \\ y_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Einzige Lösung von Gleichung (2) ist damit $y^* = (1, 1)^T$. Somit ist $x^* = 1$ die einzige Lösung von Gleichung (1).



3.1. Die Gauss'schen Normalgleichungen

Satz 3.3

Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Dann gilt:

- (a) Jede Lösung des linearen Quadratmittelproblems Gleichung (1) löst die GAUSS'schen Normalgleichungen

$$A^T A x = A^T b \quad (4)$$

und umgekehrt.

- (b) Falls $\text{rang}(A) = n$ (dies impliziert $m \geq n$), so ist $A^T A$ positiv definit und Gleichung (1) besitzt genau eine Lösung, nämlich $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$.
- (c) Falls $\text{rang}(A) < n$, so ist $A^T A$ positiv semidefinit und singulär und Gleichung (1) besitzt unendlich viele Lösungen.

Beweis. (a) Die Zielfunktion $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ der zu Gleichung (1) äquivalenten Aufgabe

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \rightarrow \min \quad (5)$$

lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{1}{2} (Ax - b)^T (Ax - b) \\ &= \frac{1}{2} (x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b) \end{aligned}$$

Die notwendige Optimalitätsbedingung für Gleichung (5) lautet $\nabla \varphi(x) = 0$, das heißt

$$A^T A x = A^T b$$

Also ist jede Lösung von Gleichung (1) auch eine Lösung der GAUSS'schen Normalgleichungen Gleichung (4). Da φ eine konvexe Funktion ist (wegen $\nabla^2 \varphi(x) = A^T A$ positiv semidefinit), ist Gleichung (4) zugleich eine hinreichende Optimalitätsbedingung, das heißt jede Lösung von Gleichung (4) löst Gleichung (1).

chung (1).

- (b) Sei $\text{rang}(A) = n$. Dann hat A vollen Spaltenrang und $Ax \neq 0$ für alle $x \neq 0$. Folglich gilt $x^T A^T A x = (x^T A^T)(Ax) = \|Ax\|_2^2 > 0$ für alle $x \neq 0$. Also ist A positiv definit und damit regulär. Somit sind die GAUSS'schen Normalgleichungen Gleichung (4) eindeutig lösbar, ihre Lösung ist $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$. Wegen Teil (a) ist dies auch die einzige Lösung von Gleichung (1).
- (c) Sei $\text{rang}(A) < n$. Dann gibt es $\hat{x} \neq 0$ mit $A\hat{x} = 0$. Folglich ist einerseits A positiv semidefinit (denn $x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 \geq 0$) aber andererseits $A^T A \hat{x} = 0$ und $A^T A$ daher singulär. Da nach Satz 3.1 das lineare Quadratmittelproblem Gleichung (1) eine Lösung besitzt, muss nach Teil (a) auch Gleichung (4) lösbar sein. Aufgrund der Singularität von $A^T A$ hat Gleichung (4) unendlich viele Lösungen. \square

Sei x^* eine Lösung von Gleichung (1). Dann gilt wegen Satz 3.3

$$0 = A^T A x^* - A^T b = A^T (A x^* - b)$$

Dies ist äquivalent zu folgenden Aussagen

- $0 = x^T A^T (A x^* - b)$
- $(A x^* - b) \perp Ax$
- $(A x^* - b) \perp L$

■ Algorithmus 3.4 (Prinzip des Normalgleichungsverfahrens)

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{rang}(A) = n$, $b \in \mathbb{R}^m$

```

1  G = transpose(A) * A
2  c = transpose(A) * b
3  compute L ! als Cholesky-Faktor von G
4  solve Lz=c
5  solve transpose(L)x = z
```

Output: x, L

► Bemerkung 3.5

Der Aufwand beträgt etwa mn^2 Operationen zur Berechnung der unteren Hälfte von G , $\frac{n^3}{3}$ für die CHOLESKY-Faktorisierung sowie je n^2 für die Lösung der Dreieckssysteme. Offenbar ist der Aufwand für kleine n günstig. Nachteilig bezüglich numerischer Fehler kann sich beim Normalgleichungsverfahren die schlechte Kondition (siehe später) der Matrix $A^T A$ auswirken. Abhilfe schaffen geeignete Nachiterationen oder andere Verfahren (HOUSEHOLDER, SVD) zur Lösung des linearen Quadratmittelproblems.

3.2. Orthonormalisierungsverfahren nach Householder

3.3. Anwendung der Ausgleichsrechnung

4. Kondition linearer Gleichungssysteme

Kapitel IV

Kondition von Aufgaben und Stabilität von Algorithmen

1. Maschinenzahlen und Rundungsfehler

2. Fehleranalyse

Kapitel V

Newton- *Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme*

1. Das Newton-Verfahren

2. Gedämpftes Newton-Verfahren

Kapitel VI

lineare Optimierung

1. Ecken und ihre Charakterisierung

2. Simplex-Verfahren

3. Die Tableauform des Simplex-Verfahrens

4. Revidiertes Simplex-Verfahren

5. Bestimmung einer ersten zulässigen Basislösung

Anhang

Anhang A: Listen

A.1. Liste der Theoreme

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

Satz I.2.7:	Satz von FABER 1914	6
-------------	-------------------------------	-------------------

Index

- GAUSS'schen Normalgleichungen, [35](#)
- HORNER-Schema, [6](#)
- KEPLER'sche Fassregel, [17](#)
- LAGRANGE-Form, [4](#)
- LEGENDRE-Polynoms, [21](#)
- SIMPSON-Formel, [17](#)
- TSCHEBYSCHOW-Polynoms, [21](#)
- Basispolynom
 - LAGRANGE-Basispolynom, [4](#)
 - NEWTON-Basispolynome, [5](#)
- Dreieckssystem, [23](#)
- Ersatzaufgabe, [34](#)
- Funktionsraum, [2](#)
- gestaffeltes System, [23](#)
- Interpolationsbedingungen, [2](#)
- Interpolationspolynom, [4](#)
- Interpolierende, [2](#)
- kubischer Interpolationspline, [9](#)
- LDL-Faktorisierung, [33](#)
- lineares Gleichungssystem
 - überbestimmt, [34](#)
- lineares Quadraturmittelproblem, [34](#)
- Maximum-Norm, [6](#)
- Newton-Cotes-Formel
 - geschlossene NEWTON-COTES-Formel, [16](#)
 - offene NEWTON-COTES-Formel, [16](#)
- Permutationsmatrix, [26](#)
- Pivotelement, [26](#)
- Pivotisierung
 - Spaltenpivotisierung, [26](#)
 - vollständige Pivotisierung, [26](#)
 - Zeilenpivotisierung, [26](#)
- Pivotspalte, [26](#)
- Polynomspline, [9](#)
- positiv definit, [31](#)
- Stützstellen, [2](#)
- Stützstellensystem, [6](#)
- Stützwerte, [2](#)
- streng diagonaldominant, [25](#)
- Trapezformel, [17](#)
- Zeilenstufenform, [23](#)
- zusammengesetzte SIMPSON-Formel, [20](#)
- zusammengesetzte Trapezformel, [20](#)