

Mitschrift Numerik 1

Prof. Schaedle

July 7, 2019

Inhaltsverzeichnis

I	Numerische Integration	4
1	Einführung	4
2	Ordnung von Quadraturformeln	7
3	Quadraturfehler	11
4	Quadratur mit hoher Ordnung	16
5	Orthogonalpolynome	19
6	Ein adaptives Programm	23
7	Gauß- und Lobatto Quadraturformeln	27
II	Interpolation und Approximation	28
8	Newtonsche Interpolationsformel	29
9	Fehler bei der Polynominterpolation	33
10	Tschebyscheff-Interpolation	37
11	Hermité-Interpolation	46
12	Spline-Interpolation	48
13	Fehler bei der Splineinterpolation	53
14	Numerische Differentiation	57
III	Lineare Gleichungssysteme und lineare Ausgleichsrechnung	60
15	Gaußelimination	60
16	Wahl des Pivotelements	66
17	Cholesky-Zerlegung für symmetrische positiv definite Matrizen	68
18	Matrixnormen	71
19	Kondition eines Problems	74
20	Konditionszahl einer Matrix	75
21	Stabilität von Verfahren	78
22	QR-Zerlegung mit Hilfe der Householdertransformationen	81
23	Lineare Ausgleichsrechnung	85
IV	Nichtlineare Gleichungssysteme	89
24	Newton-Verfahren	91
V	Gewöhnliche Differentialgleichungen	95
25	Beispiele für gewöhnliche Differentialgleichungen	95
26	Erinnerung an die Theorie gewöhnlicher DGLs	96
27	Euler-Verfahren	100

28	Runge-Kutta Verfahren	103
----	---------------------------------	-----

I Numerische Integration

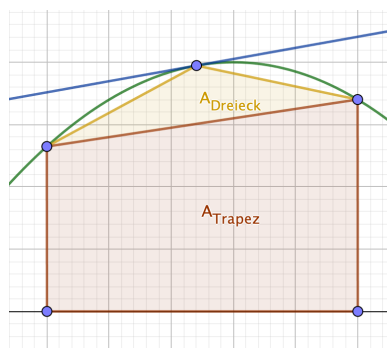
1 Einführung

Problem 1.1

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

Beispiel 1.2

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



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

2. Leibniz + Newton (1670):

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

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

3. Riemann (1850):

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

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

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

Bemerkung 1.3 (Approximation von Integralen)

1. (linke) Rechtecksregel:

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

2. Mittelpunktsregel:

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

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

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

Definition 1.4 (Quadraturformel)

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

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

Beispiel 1.5

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5. "pulcherrima et utilissima regula" von Newton:

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

Bemerkung 1.6 (Monte-Carlo Integration)

1. Eindimensionale Monte-Carlo Integration:

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

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

Nach dem Gesetz der großen Zahlen konvergiert dieser Ausdruck, falls

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

2. Mehrdimensionale Monte-Carlo Integration:

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

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

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

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

2 Ordnung von Quadraturformeln

Definition 2.1

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

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

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

Satz 2.2

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

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

für $q = 1, \dots, p$.

Beweis.

” \Rightarrow ”

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

\Rightarrow

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

” \Leftarrow ”

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

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

und

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

□

Beispiel 2.3

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

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

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

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

5. ”pulcherina et utilissima”: Übung

Bemerkung 2.4

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

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

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

Definition 2.5

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

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

Beispiel 2.6 (Symmetrische QF)

Mittelpunktsregel, Trapezregel, Simpsonregel,...

Satz 2.7

Die maximal erreichbare Ordnung einer symmetrischen QF ist gerade.

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

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

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

Wir zeigen QF ist exakt für f .

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

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

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

1. Für \tilde{g} ist die QF exakt

2.

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

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

Symmetrie \Rightarrow

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

Definiere $j := s + 1 - i$

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

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

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

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

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

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

□

Satz 2.8

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

Es gilt

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

mit

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

Beweis. von 2.8

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

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

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

□

Bemerkung (zu Satz (2.8))

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

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

3 Quadraturfehler

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

Definition 3.1

Der Fehler bei der Approximation des Integrals durch die QF ist

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

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

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

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

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

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

3.2 (Fehlerabschätzung - 1. Versuch)

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

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

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

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

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

mit $x_j = x_0 + jh$

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

3.3 (Rigorese Fehlerabschätzung)

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

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

wobei der Peanokern $K_k(\tau)$ durch

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

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

Beweis. Taylorentwicklung mit Integralrestglied und Transformation

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

eingesetzt in (*) und die Verwendung von

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

liefern

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

da

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

gilt. □

Satz 2: (Eigenschaften des Peanokerns)

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

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

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

Beweis. Eventuell Übungsaufgabe □

Beispiel: Mittelpunktsregel:

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

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

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

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

Beweis. Mit Satz 1 gilt

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

Zudem gilt

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

Damit folgt die Behauptung. □

Beispiele

Für die Mittelpunktsregel (maximale Ordnung = 2) erhält man

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

Für die Trapezregel (maximale Ordnung = 2)

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

Für die Simpsonregel (maximale Ordnung = 4)

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

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

4 Quadratur mit hoher Ordnung

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

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

Fragen:

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

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

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

g soll durch die QF exakt integriert werden.

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

$\deg(M) = s$

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

Dann gilt einerseits

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

und andererseits

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

da $p \leq s$

Damit ist gezeigt:

Satz 4.1

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

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

Korollar 4.2

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

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

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

Setze $h = M$, dann ist

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

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

□

4.3 (Beispiele/Korollare)

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

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

erfüllen, dh.

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

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

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

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

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

Trick:

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

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

$$\sigma_3 = c_1c_2c_3$$

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

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

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

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

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

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

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

5 Orthogonalpolynome

Bedingung 2. in Satz (4.1)

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

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

Erinnerung:

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

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

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

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

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

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

Satz 5.1

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

Definition 5.2

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

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

definieren wir auf den Vektorraum

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

das gewichtete Skalarprodukt

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

für $f, g \in V$.

Zudem definiere:

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

Satz 5.3

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

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

Diese Polynome lassen sich rekursiv berechnen durch

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

Wobei β und γ definiert sind durch:

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

Beweis. (vgl. Gram-Schmidt Orthogonalisierung LinA)

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

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

(damit ist 3. erfüllt)

Zur Bestimmung der α_j :

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

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

2.

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

Aufgrund von 3. \Rightarrow

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

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

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

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

3. Für $j \leq k-2$:

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

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

Insgesamt haben wir

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

□

Bemerkung

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

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

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

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

Satz 5.4

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

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

Klar ist: $r \leq k$.

Sei

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

Dann ist

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

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

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

$\Rightarrow r = k$

□

Beispiel 5.5 (Orthogonale Polynome)

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

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

6 Ein adaptives Programm

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

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

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

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

gilt

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

Schwierigkeiten:

- Schätzung des Fehlers
- Wahl der Zerlegung des Intervalls

6.1 (Zerlegung des Intervalls)

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

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

und

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

berechnen.

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

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

dann bietet sich folgendes Verfahren zur Konstruktion einer Zerlegung an:

1. Berechne $res[a, b]$, $resabs[a, b]$ und $err[a, b]$.

Falls

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

Gebe $res[a, b]$ zurück.

Ansonsten:

2. Zerlege $[a, b]$ in

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

und

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

und berechne

$res I_0$, $resabs I_0$, $err I_0$ und

$res I_1$, $resabs I_1$, $err I_1$

n = 2.

3. Falls

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

Gebe

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

zurück. Ansonsten:

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

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

und

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

und berechne:

$res I_l, resabs I_l, err I_l$ und

$res I_m, resabs I_m, err I_m$

$n = n + 1$

Gehe zu 3)

6.2 (Schätzung des Fehlers)

Ziel: Berechne Approximation an

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

ohne zusätzliche Funktionsauswertungen.

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

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

Eine Approximation des Fehlers für die eingebettete QF ist durch

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

gegeben. Es gilt

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

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

Drei Möglichkeiten den Fehler zu schätzen:

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

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

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

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

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

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

7 Gauß- und Lobatto Quadraturformeln

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

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

Satz 7.1

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

Beispiel

$s = 1$ Mittelpunktsregel

$s = 2$ $c_{1,2} = \frac{1}{2} \mp \frac{\sqrt{3}}{6}$, $b_1 = \frac{1}{2} = b_2$

$s = 3$ (4.3) 2)

7.2 (Bezeichnung der Knoten der Gauß-QF)

Details: Siehe Homepage (Übungsaufgabe).

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

Zusammengefasst:

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

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

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

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

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

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

7.3 (Lobatto Quadraturformeln)

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

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

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

Da die Legendre-Polynome folgende Rekursion erfüllen

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

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

ist

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

und damit

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

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

Damit gilt:

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

II Interpolation und Approximation

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

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

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

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

8 Newtonsche Interpolationsformel

Beispiel 8.1

n=1:

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

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

n=2:

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

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

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

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

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

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

Definition 8.2 (dividierte Differenzen)

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

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

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

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

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

Schema:

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

Bemerkung 8.3

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

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

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

Satz 8.4 (Newtonsche Interpolationsformel)

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

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

Beweis. (Induktion)

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

IS $n - 1 \rightarrow n$

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

ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

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

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

Für den Ansatz

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

ergibt die Forderung $p(x_n) = y_n$

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

Da a eindeutig ist, ist p eindeutig.

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

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

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

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

Setze Polynom

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

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

Das gilt, da:

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

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

Für $i = 1, \dots, n - 1$:

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

Andererseits:

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

Koeffizientenvergleich:

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

□

8.5 (Hornerschema)

Zur Auswertung des Interpolationspolynom p an der Stelle x verwendet man

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

Algorithmus:

```

 $s = \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$ 
for  $k = n - 1, \dots, 0$  do
     $s = \delta^k y[x_0, \dots, x_k] + (x - x_k)s$ 
end for

```

Beispiel 8.6

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

Das Interpolationspolynom ist also

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

bzw. nach HornerSchema

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

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

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

9 Fehler bei der Polynominterpolation

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

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

Satz 9.1

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

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

Beweis. Siehe (9.4)

□

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

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

Wähle Stützstellen:

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

Es seien

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

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

→ Interpolationspolynom p :

$$\log_{10}(56.5) = 1.752048448$$

$$p(56.5) = 1.75204845$$

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

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

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

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

Für $x \in [55, 58]$:

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

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

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

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

Lemma 9.3

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

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

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

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

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

Wiederhole dies bis:

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

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

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

Bemerkung

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

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

9.4 (Beweis von (9.1))

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

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

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

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

Fragen:

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

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

minimal? (Siehe Abschnitt 10)

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

Satz 9.5 (Lagrange Interpolationsformel)

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

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

mit

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

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

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

Bemerkung

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

Definition 9.6

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

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

Damit gilt:

Satz 9.7

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

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

Beweis. klar \square

Beispiel 9.8

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

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

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

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

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

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

Satz 9.9

Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, p Interpolationspolynom zu f in den Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$. So gilt:

$$\forall q \in \mathcal{P}_{n+1} : \max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)| \leq (1 + \Lambda_n) \max_{x \in [a, b]} |q(x) - f(x)|.$$

Hierbei ist Λ_n die Lebesgue-Konstante zu $(x_i)_{i=0}^n$ auf $[a, b]$.

Beweis. Sei $q \in \mathcal{P}$.

$$f - p = (f - q) + (q - p)$$

q ist das Interpolationspolynom zu sich selbst in den x_0, \dots, x_n . Nach (9.7) gilt für $y_i = f(x_i)$ $\tilde{y}_i = q(x_i)$.

$$\begin{aligned} \max_{x \in [a, b]} |p(x) - q(x)| &\leq \Lambda_n \max_{i=0, \dots, n} |f(x_i) - q(x_i)| \\ &\leq \Lambda_n \max_{x \in [a, b]} |f(x) - q(x)| \\ \Rightarrow \max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)| &\leq \max_{x \in [a, b]} |f(x) - q(x)| + \max_{x \in [a, b]} |p(x) - q(x)| \\ &\leq (1 + \Lambda_n) \max_{x \in [a, b]} |q(x) - f(x)| \end{aligned}$$

□

10 Tschebyscheff-Interpolation

Ziel: Interpoliere $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ in "guten" Stützstellen.

Ohne Einschränkungen sei $[a, b] = [-1, 1]$

Definition 10.1

$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x))$ für $x \in [-1, 1]$ heißt n-tes Tschebyscheff-Polynom.

Lemma 10.2

$T_n(x)$ ist für $x \in [-1, 1]$ ein Polynom mit folgenden Eigenschaften:

- i) $T_0(x) = 1, T_1(x) = x$
- ii) $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + r(x)$ mit $r_n \in \mathcal{P}_{n-1}$
- iii) $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$
- iv) $\forall x \in [-1, 1] : |T_n(x)| \leq 1$

$$\text{v)} \quad T_n(\cos(\frac{k\pi}{n})) = (-1)^k, \quad k = 0, \dots, n$$

$$\text{vi)} \quad T_n(\cos(\frac{(2k+1)\pi}{2n})) = 0, \quad k = 0, \dots, n-1$$

Beweis.

$$\text{i)} \quad \text{klar, da } T_0(x) = \cos(0) = 1, \quad T_1(x) = \cos(\arccos(x)) = x, \quad x \in [a, b]$$

$$\begin{aligned} \text{iii)} \quad & \cos((n+1)\phi) + \cos((n-1)\phi) \\ &= \cos(n\phi)\cos(\phi) - \sin(n\phi)\sin(\phi) + \cos(n\phi)\cos(-\phi) - \sin(n\phi)\sin(-\phi) \\ &= 2\cos(n\phi)\cos(\phi) \end{aligned}$$

ii) folgt aus i) und iii)

$$\text{iv)} \quad \text{klar, da } \cos : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned} \text{v)} + \text{vi)} \quad & \text{ebenfalls klar, da } T_n(\cos(\frac{k\pi}{n})) = \cos(n\frac{k\pi}{n}) = \cos(k\pi) = (-1)^k \\ & \text{analog: } T_n(\cos(\frac{(2k+1)\pi}{2n})) = \cos(n\frac{(2k+1)\pi}{2n}) = 0 \end{aligned}$$

□

Beispiel 10.3

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 2x(2x^2 - 1) - x = 4x^3 - 3x$$

Lemma 10.4

Sei $q \in \mathcal{P}_n$, $q(x) = 2^{n-1}x^n + r(x)$ mit $r(x) \in \mathcal{P}_{n-1}$, $q \neq T_n$. Dann gilt

$$\max_{x \in [-1, 1]} |q(x)| > \max_{x \in [-1, 1]} |T_n(x)| \quad (= 1)$$

Beweis. Annahme: $\forall x \in [-1, 1] : |q(x)| \leq 1$

$$T_n(1) = 1$$

$$T_n(\cos(\frac{\pi}{n})) = -1$$

Nach dem Zwischenwertsatz hat $q - T_n$ eine Nullstelle im Intervall $[\cos(\frac{\pi}{n}), 1]$. Falls ein "Randpunkt" x eine Nullstelle ist, so handelt es sich um eine doppelte Nullstelle, da $q'(x) = 0 = T'_n(x)$. Ebenso existiert in $[\cos(\frac{2\pi}{n}), \cos(\frac{\pi}{n})]$ und allgemein in $[\cos(\frac{(k+1)\pi}{n}), \cos(\frac{k\pi}{n})]$ für $k = 0, \dots, n-1$.

Nullstelle $\Rightarrow q - T_n$ hat n Nullstellen.

Andererseits ist $q - T_n \in \mathcal{P}_{n-1} \Rightarrow q - T_n \equiv 0 \Rightarrow q = T_n \quad \nexists$

□

Satz 10.5

Unter allen Unterteilungen $\{x_0, \dots, x_n\}$ von $[-1, 1]$ wird

$$\max_{x \in [-1, 1]} |(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)|$$

minimal für $x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{n+1} \frac{\pi}{2}\right)$, $k = 0, \dots, n$ (d.h. x_k sind die Wurzeln von T_{n+1})

Beweis. Nach Lemma (10.4) wird $\max_{x \in [-1, 1]} |(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)|$ minimal gdw. $(x - x_0) \dots (x - x_n) = 2^{-n} T_{n+1}(x)$, d.h. falls x_k Wurzeln von T_{n+1} sind. \square

Satz 10.6

Die Lebesguekonstanten Λ_n zu den Tschebyscheffknoten (Wurzeln von T_{n+1}) erfüllen

$$\Lambda_n \leq 3 \text{ für } n \leq 20$$

$$\Lambda_n \leq 4 \text{ für } n \leq 100$$

$$\Lambda_n \approx \frac{2}{\pi} \log(n) \text{ für } n \rightarrow \infty$$

Beweis. ohne Beweis. \square

Nach Satz (9.9) liefert die Interpolation in den Wurzeln der Tschebyscheffpolynome eine fast optimale Polynominterpolation an f .

Dazu kommen Eigenschaften, die die Berechnung eines Interpolationspolynoms in den Tschebyscheffknoten (Wurzeln der Tschebyscheffpolynome) vereinfachen.

Lemma 10.7

Die Tschebyscheffpolynome sind orthogonal, bzgl. des Skalarprodukts

$$\langle f, g \rangle := \int_{-1}^1 f(x)g(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

Beweis. Übungsaufgabe \square

Lemma 10.8

Die Tschebyscheffpolynome T_k , $k = 0, \dots, n$ sind orthogonal bzgl. des Skalarprodukts (auf \mathcal{P}_n)

$$(f, g) := \sum_{l=0}^n f(x_l)g(x_l), \quad \text{wobei } x_0, \dots, x_n \text{ Wurzeln von } T_{n+1}(x)$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
T_k(x_l) &= \cos \left(k * \arccos \left(\cos \left(\frac{2l-1}{n+1} \frac{\pi}{2} \right) \right) \right) \\
&= \cos \left(k \frac{2l-1}{n+1} \frac{\pi}{2} \right) \\
&= \cos \left(k \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right)
\end{aligned}$$

für $h = \frac{\pi}{n+1}$

Damit ist

$$(T_k, T_j) = \sum_{l=0}^n \cos \left(k \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right) * \cos \left(j \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right),$$

da $\cos(x)\cos(y) = \frac{1}{2}(\cos(x+y) + \cos(x-y))$

$$= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^n \cos \left((k+j) \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right) * \cos \left((k-j) \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right)$$

Es gilt: $\cos(x) = \operatorname{Re}(e^{ix})$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(\sum_{l=0}^n e^{i(k+j)(l+\frac{1}{2})h} + e^{i(k-j)(l+\frac{1}{2})h} \right) \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(\sum_{l=0}^n \left(e^{i(k+j)lh} e^{i(k+j)\frac{h}{2}} + e^{i(k-j)lh} e^{i(k-j)\frac{h}{2}} \right) \right) \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(e^{i(k+j)\frac{h}{2}} \frac{e^{i(k+j)h(n+1)} - 1}{e^{i(k+j)h} - 1} + e^{i(k-j)\frac{h}{2}} \frac{e^{i(k-j)h(n+1)} - 1}{e^{i(k-j)h} - 1} \right), \quad \text{für } k \neq j
\end{aligned}$$

Es gilt $k(n+1) = \pi$

$$\text{Behauptung} \equiv \begin{cases} 0 & k \neq j \\ \frac{1}{2}(n+1) & k = j \neq 0 \\ (n+1) & k = j = 0 \end{cases}$$

Fall 1: $k = j = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{l=0}^n (1+1) = (n+1)$

$$\textbf{Fall 2: } k = j \neq 0 \Rightarrow \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left((n+1) + e^{ijh} \underbrace{\frac{e^{\overbrace{i2j(n+1)h}^{=\pi}} - 1}{e^{\underbrace{i2jh} = 0} - 1}} \right) = \frac{1}{2}(n+1)$$

Fall 3: $k \neq j$:

Fall 1: $k + j$ ist gerade $\Rightarrow k - j$ ist gerade

$$\Rightarrow \frac{1}{2} \operatorname{Re}(0 + 0) = 0$$

Fall 2: $k + j$ ist ungerade $\Rightarrow k - j$ ist ungerade

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(e^{i(k+j)\frac{h}{2}} \frac{-2}{e^{i(k+j)h} - 1} + e^{i(k-j)\frac{h}{2}} \frac{-2}{e^{i(k-j)h} - 1} \right) \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(\underbrace{\frac{-2}{e^{i(k+j)\frac{h}{2}} + e^{-i(k+j)\frac{h}{2}}}}_{\text{rein imaginär}} + \underbrace{\frac{-2}{e^{i(k-j)\frac{h}{2}} - e^{-i(k-j)\frac{h}{2}}}}_{\text{rein imaginär}} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

□

Bemerkung

(\cdot, \cdot) ist ein Skalarprodukt auf \mathcal{P}_n , da

i) bilinear

ii) symmetrisch

iii) positiv definit

$$(f, f) = \sum_{l=0}^n f(x_l)^2 \geq 0$$

$$(f, f) = 0 \stackrel{!}{\Rightarrow} f \equiv 0$$

$$\sum_{l=0}^n f(x_l)^2 = 0 \Rightarrow \forall l: f(x_l) = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0, \text{ da } \deg(f) \leq n$$

Satz 10.9

Sei p das Interpolationspolynom zur Funktion f in den Tschebyscheffknoten x_0, \dots, x_n (Wurzeln von T_{n+1}), so gilt:

$$p(x) = \frac{1}{2}c_0 + \sum_{j=1}^n c_j T_j(x),$$

wobei

$$c_k = \frac{2}{n+1} \sum_{l=0}^n f(x_l) \cos \left(k \frac{2l+1}{n+1} \frac{\pi}{2} \right), \quad \text{für } k = 0, \dots, n$$

Beweis. Betrachte (p, T_k)

$$\begin{aligned} (p, T_k) &= \frac{1}{2}(T_0, T_k) + \sum_{l=1}^n c_l(T_l, T_k) \\ &= \begin{cases} c_k(T_k, T_k) & \text{für } k \neq 0 \\ \frac{1}{2}c_0(T_0, T_0) & \text{für } k = 0 \end{cases} \\ &\stackrel{(10.8)}{=} \frac{n+1}{2} c_k \\ &= \frac{n+1}{2} \sum_{l=0}^n f(x_l) T_k(x_l) \\ &= \frac{n+1}{2} \sum_{l=0}^n f(x_l) \cos \left(\underbrace{k \arccos \left(\cos \left(\frac{2l+1}{n+1} \frac{\pi}{2} \right) \right)}_{= \frac{2l+1}{n+1} \frac{\pi}{2}} \right) \end{aligned}$$

□

$p(x)$ lässt sich als bei bekannten Koeffizienten c_k leicht berechnen/auswerten.

Satz 10.10 (Clenshaw Algorithmus)

Sei $p \in \mathcal{P}_n$ durch die Koeffizienten c_0, \dots, c_n in der Form

$$p(x) = \frac{1}{2}c_0 + \sum_{j=1}^n c_j T_j(x)$$

gegeben. Setzt man

$$d_{n+1} = d_{n+2} = 0$$

und definiert für x

$$d_k = c_k + 2xd_{k+1} - d_{k+2}, \quad \text{für } k = n, n-1, \dots, 1, 0$$

so gilt:

$$p(x) = \frac{1}{2}(d_0 - d_2)$$

Beweis. Verwende die Rekursionsformel aus (10.2) iii) ($T_{k+1} = 2xT_k + T_{k-1}$). Dann ist

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^n c_l T_l(x) \\ &= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-3} c_l T_l(x) + c_{n-2}T_{n-2}(x) + c_{n-1}T_{n-1}(x) + c_n T_n(x) \\ &= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-3} c_l T_l(x) + (c_{n-2} - \underbrace{c_n}_{=d_n})T_{n-2}(x) + \underbrace{(c_{n-1} + 2xc_n)}_{=d_{n-1}}T_{n-1}(x) \\ &= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-4} c_l T_l(x) + (c_{n-3} - d_{n-1})T_{n-3}(x) + \underbrace{(c_{n-2} - d_n + 2xd_{n-1})}_{=d_{n-2}}T_{n-2}(x) \end{aligned}$$

induktiv erhält man

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{1}{2}c_0 - d_2 \right) \underbrace{T_0(x)}_{=1} + \underbrace{(c_1 - d_3 + 2xd_2)}_{=d_1} \underbrace{T_1(x)}_{=x} \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{(c_0 - 2d_1x - d_2 - d_2)}_{=d_0} \\ &= \frac{1}{2}(d_0 - d_2) \end{aligned}$$

□

Bemerkung

Bei der Verwendung von Rekursionen ist es wichtig zu verstehen, wie sich Rundungsfehler auswirken.

Beispiel: $x_{n+1} = 10x_n - 9, \quad x_0 = 1$

$$\Rightarrow \forall n \in \mathbb{N} : x_n = 1$$

Was passiert bei fehlerhafter Startwerten $\tilde{x}_0 = 1 + \varepsilon$?

$$\tilde{x}_{n+1} = 10\tilde{x}_n - 9, \quad \tilde{x}_n = 1 + 10^n \varepsilon$$

Der Clenshaw-Algorithmus ist stabil, wie im Folgenden gezeigt wird:

Satz 10.11

Für den Clenshaw-Algorithmus mit Fehlern ε_k in der Rekursion, d.h. für

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{n+1} &= \tilde{d}_{n+2} = 0 \\ \tilde{d}_k &= c_k + 2x\tilde{d}_{k+1} - \tilde{d}_{k+2} + \varepsilon_k, \quad k = n, n-1, \dots, 0 \end{aligned}$$

Dabei ist ε_k der Rundungsfehler in der k-ten Iteration. Für $\tilde{p}(x) = \frac{1}{2}(\tilde{d}_0 - \tilde{d}_2)$ gilt:

$$|\tilde{p}(x) - p(x)| \leq \sum_{j=0}^n |\varepsilon_j|, \quad \text{für } |x| < 1,$$

wobei $p(x)$ mit (10.10) berechnet wird.

Beweis. Setze $\varepsilon_k := \tilde{d}_k - d_k$ (für d_k aus (10.10)). Dann gilt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= \varepsilon_k + 2x\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_{k+2}, \quad \text{für } k = n, \dots, 0 \\ \varepsilon_{n+1} &= 0 \quad \text{und} \quad \varepsilon_{n+2} = 0 \end{aligned}$$

Mit Satz (10.10) gilt für $c_k = \varepsilon_k$ und $d_k = \varepsilon_k$:

$$\frac{1}{2}(\varepsilon_0 - \varepsilon_2) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 + \sum_{j=1}^n \varepsilon_j T_j(x)$$

Da $|T_j(x)| \leq 1$ für $x \in [1, 1]$ gilt:

$$|\tilde{p}(x) - p(x)| \stackrel{\Delta-UGL}{\leq} \frac{1}{2}|\varepsilon_0| + \sum_{j=1}^n |\varepsilon_j|$$

□

Bemerkung

Die Approximation einer Funktion durch die Summe von Tschebyscheffpolynomen wird im Computer zur Berechnung von Funktionen wie log, exp, sin, cos,... verwendet.

Beispiel 10.12

Ziel: Berechne $\ln(x)$ für $0 \leq x_{\min} < x \leq x_{\max}$. x_{\min}, x_{\max} ist die kleinste/größte positive darstellbare Zahl auf dem gegebenen Computer.

x " = " $\underbrace{[1, b_1, b_2, \dots, b_M]}_{\text{"Mantisse"}} * 2^N, \quad b_j \in \{0, 1\}$

d.h. $x = 2^N(1 + b_1 \frac{1}{2} + b_2 \frac{1}{4} + \dots + b_M \frac{1}{2^M}) = 2^N(1 + t), \quad t \in (0, 1)$

$\ln(x) = \ln(1 + t) + N \underbrace{\ln(2)}_{\text{Konstante}}$

Das Problem $\ln(x)$ zu berechnen ist damit auf das Problem $\ln(1 + t)$ für $t \in [0, 1]$ zu berechnen reduziert worden.

Tschebyscheffinterpolation: $[-1, 1] \rightarrow [0, 1], \quad x \mapsto t = \frac{1+x}{2} \quad (\Leftrightarrow x = 2t - 1)$

Für den Interpolationsfehler gilt:

$$\ln\left(1 + \frac{1+x}{2}\right) - p(x) = \underbrace{\prod_{j=0}^n (x - x_j)}_{=2^{-n} \text{ für Tschebyscheff}} \cdot \frac{1}{(n+1)!} \frac{(-1)^{n-1}(n-1)!}{\left(1 + \frac{1+\xi}{2}\right)^n} \left(\frac{1}{2}\right)^n, \quad \xi \in [-1, 1]$$
$$\Leftrightarrow \left| \ln\left(1 + \frac{1+x}{2}\right) - p(x) \right| = \frac{1}{4^n} \frac{1}{(n+1)^n}$$

Für $n=15$ ist $\frac{1}{4^n} \frac{1}{(n+1)^n} \leq 10^{-11}$

Berechnet werden also c_0, \dots, c_{15} (einmal für alle Zeiten):

$$c_0 = 0.75290562\dots$$

$$c_1 = 0.34\dots$$

$$c_2 = -0.029\dots$$

$$c_3 = 0.0036\dots$$

$$c_4 = -0.00004$$

$$|c_k| \leq 10^{-9}, \quad \text{für } k > 10$$

Beobachtung: c_k werden schnell klein.

Um eine Genauigkeit von 10^{-8} (einfache Genauigkeit) zu erreichen, benötigt

man nur c_0, \dots, c_9 .

Die Auswertung mit dem Clenshaw-Algorithmus benötigen wir 10 Multiplikation (vgl. Taylor $\log(1+t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} t^k$).

11 Hermité-Interpolation

Gegeben sind $(x_i, y_i, y'_i)_{i=0}^n$, $x_i \in [a, b]$ paarweise verschieden. Gesucht ist ein Polynom $p \in \mathcal{P}$, sodass

$$\begin{aligned} p(x_i) &= y_i \quad \text{und} \\ p'(x_i) &= y'_i, \quad \text{für } i = 0, \dots, n. \end{aligned}$$

Idee: Lasse $\varepsilon \rightarrow 0$ laufen im Newtonschema:

$$\begin{array}{ll} x_0 & y_0 \\ & \delta y[x_0, x_0 + \varepsilon] = \frac{(y_0 + \varepsilon y'_0) - y_0}{(x_0 + \varepsilon) - x_0} = y'_0 \\ x_0 + \varepsilon & y_0 + \varepsilon y'_0 \\ & \delta y[x_0 + \varepsilon, x_1] \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta y[x_0, x_1] \\ x_1 & y_1 \\ & \delta y[x_1, x_1 + \varepsilon] = y'_1 \\ x_1 + \varepsilon & y_1 + \varepsilon y'_1 \end{array}$$

Newtonsche Interpolationsformel:

$$\begin{aligned} p_\varepsilon(x) &= y_0 + (x - x_0)\delta y[x_0, x_0 + \varepsilon] \\ &\quad + (x - x_0)(x - (x_0 + \varepsilon))\delta^2 y[x_0, x_0 + \varepsilon, x_1] \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \left(\prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j)(x - (x_j + \varepsilon)) \right) (x - x_n) \delta^{2n+1} y[x_0, \dots, x_n] \end{aligned}$$

damit ist:

$$\begin{aligned} p_\varepsilon(x_i) &= y_i \\ p_\varepsilon(x_i + \varepsilon) &= y_i + \varepsilon y'_i \\ \Rightarrow y'_i &= \frac{p_\varepsilon(x_i + \varepsilon) - p_\varepsilon(x_i)}{\varepsilon} \stackrel{MWS}{=} p'_\varepsilon(\xi_i), \quad \text{für } \xi_i \in [x_i, x_i + \varepsilon] \end{aligned}$$

Für $\varepsilon \rightarrow 0$ definieren wir

$$\delta^k y[x_0, x_0, x_1, x_1, \dots] := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta^k y[x_0, x_0 + \varepsilon, x_1, x_1 + \varepsilon, \dots]$$

und

$$\begin{aligned} p(x) &:= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} p_\varepsilon(x) \\ &= y_0 + (x - x_0) \underbrace{\delta y[x_0, x_0]}_{y'_0} + (x - x_0)^2 \delta^2 y[x_0, x_0, x_1] \\ &\quad + (x - x_0)^2 (x - x_1) \delta^3 y[x_0, x_0, x_1, x_1] \\ &\quad + \dots + \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j)^2 (x - x_n) \delta^{2n-1} y[x_0, x_0, \dots, x_n, x_n] \\ p(x_i) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} p_\varepsilon(x_i) = y_i \\ p'(x_i) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} p'_\varepsilon(x_i) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\xi_{i,\varepsilon}) = y'_i \end{aligned}$$

für $\xi_{i,\varepsilon} \in [x_i, x_i + \varepsilon]$

Schema:

x_0	y_0			
		y'_0		
x_0	y_0	$\delta y[x_0, x_1]$	$\delta^2[x_0, x_0, x_1]$	
			$\delta^3[x_0, x_0, x_1, x_1]$	
x_1	y_1		$\delta^2[x_0, x_1, x_1]$	\dots
		y'_1	\dots	
x_1	y_1		$\delta^2[x_1, x_1, x_2]$	\dots
		$\delta y[x_1, x_2]$	\dots	
x_2	y_2	\dots		
		y'_2		
x_2	y_2			

Eindeutigkeit:

Annahme: $\exists q \in \mathcal{P}_{2n+1}$ mit $q(x_i) = y_i$, $q'(x_i) = y'_i$

Dann ist $q - p \in \mathcal{P}_{2n+1}$

$q - p$ besitzt doppelte Nullstelle in x_i
 $q - p = c \prod (x - x_i)^2$, da $\deg(\prod_{i=0}^n (x - x_i)^2) = 2n + 2$
 $\Rightarrow c = 0 \Rightarrow q = p$

Damit ist der folgende Satz bewiesen.

Satz 11.1

Zu gegebenen $(x_i, y_i, y'_i)_{i=0}^n$ mit $x_i \neq x_j$, falls $i \neq j$ existiert ein eindeutiges Polynom $p \in \mathcal{P}_{2n+1}$ mit $p(x_i) = y_i$ und $p'(x_i) = y'_i$ ($i = 0, \dots, n$). p kann mit Hilfe des Newtonschen Differenzenschemas mit doppelten eingeschriebenen Nullstellen (Knoten) berechnet werden.

Satz 11.2 (vgl. Satz (9.1))

Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ $(2n + 2)$ -mal stetig differenzierbar ($f \in \mathcal{C}^{2n+2}([a, b], \mathbb{R})$), seien x_0, \dots, x_n paarweise verschieden und sei p Hermitépolynom aus (11.1) zu $(x_i, y_i, y'_i)_{i=0}^n$. Dann gilt:

$$\forall x \in [a, b] \exists \xi \in [a, b] : f(x) - p(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}$$

Beweis. Betrachte $\varepsilon \rightarrow 0$ für $p_\varepsilon(x)$ in der Fehlerformel (9.1):

$$f(x) - p(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)(x - (x_j + \varepsilon)) \frac{f^{(2n+2)}(\xi_\varepsilon)}{(2n+2)!}, \quad \text{für } \xi_\varepsilon \in [a, b]$$

Sei ξ ein Häufungspunkt von $\{\xi_\varepsilon, \varepsilon > 0\}$. Dann existiert eine Nullfolge $(\varepsilon_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $\xi_{\varepsilon_k} \rightarrow \xi$ für $k \rightarrow \infty$. \Rightarrow

$$\begin{aligned} f(x) - p(x) &= \lim_{k \rightarrow \infty} (f(x) - p_{\varepsilon_k}(x)) \\ &= \prod_{j=0}^n (x - x_j)^2 \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \end{aligned}$$

□

12 Spline-Interpolation

Spline ist engl. für Holz- oder Metallfeder.

Theorie: stammt von Schoenberg aus dem Jahr 1946

Idee: Suche 'glatte' Funktion s durch vorgegebene Punkte $(x_i, y_i)_{i=0}^n$

- i) $s(x_i) = y_i$ ($i = 0, \dots, n$) 'Interpolationseigenschaft'
- ii) s muss mind. 2-mal stetig differenzierbar sein und $\int_a^b (s''(x))^2 dx$ soll minimal sein. 'glatt'

Dadurch vermeidet man Oszillationen, wie sie bei der Polynominterpolation hohen Grades entstehen.

Wir suchen also eine Funktion s , sodass für $\varepsilon \in \mathbb{R}$ und $h \in \mathcal{C}^2([a, b], \mathbb{R})$, $h(x_i) = 0$ ($i = 0, \dots, n$) und

$$\begin{aligned} \int_a^b (s''(x))^2 dx &\stackrel{!}{\leq} \int_a^b ((s(x) + \varepsilon h(x))'')^2 dx \\ &= \int_a^b (s''(x) + \varepsilon h''(x))^2 dx \\ &= \int_a^b (s''(x))^2 dx + 2\varepsilon \int_a^b s''(x)h''(x)dx + \underbrace{\varepsilon^2 \int_a^b (h''(x))^2 dx}_{\geq 0} \end{aligned}$$

Obige Ungleichung ist erfüllt, falls

$$\forall h \in \mathcal{C}^2([a, b]) \text{ mit } h(x_i) = 0 : \int_a^b h''(x)s''(x)dx = 0$$

Dabei gilt:

$$\int_a^b h''(x)s''(x)dx = [s''(x)h'(x)]_{x=a}^b - \int_a^b s'''(x)h'(x)dx$$

Falls $s'''(x) = \alpha_i$ für $x \in [x_{i-1}, x_i]$, dann ist

$$\begin{aligned} \int_a^b s'''(x)h'(x)dx &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} h'(x)dx \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \left(\underbrace{h(x_i)}_{=0} - \underbrace{h(x_{i-1})}_{=0} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Forderung: } [s''(x)h'(x)]_{x=a}^b = s''(b)h'(b) - s''(a)h'(a) \stackrel{!}{=} 0$$

Satz 12.1

Seien $f, s \in \mathcal{C}^2([a, b], \mathbb{R})$ zwei Funktionen, die in $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ dieselben Werte annehmen, d.h.

$$f(x_i) = s(x_i) \quad (i = 0, \dots, n) \quad \text{und} \quad s|_{[x_{i-1}, x_i]} \in \mathcal{P}_3 \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

Falls

$$s''(a)[f'(a) - s'(a)] = s''(b)[f'(b) - s'(b)], \quad (*)$$

so gilt:

$$\int_a^b (s''(x))^2 dx \leq \int_a^b (f''(x))^2 dx$$

Beweis. Obige Rechnung für $h = f - s$ und $\varepsilon = 1$, $h(x_i) = 0$
 $[s''(x)h'(x)]_{x=a}^b = 0 \Leftrightarrow (*)$ □

Bemerkung 12.2

Die Bedingung $(*)$ kann erreicht werden durch

- a) Vorgabe von $s'(a) = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$
 Der dadurch bestimmte Spline heißt **eingespannter** Spline.
- b) Vorgabe von $s''(a) = 0 = s''(b)$
 Der dadurch bestimmte Spline heißt **natürlicher** Spline. Dieser hat aber schlechtere Approximationseigenschaften.

12.3 (Konstruktion des Splines)

Gegeben sind (x_i, y_i) $i = 0, \dots, n$, $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, $s|_{[x_{i-1}, x_i]} =: s_i \in \mathcal{P}_3$.

Hermite-Interpolation:

$$\begin{aligned} s_i(x_i) &= y_i \\ s_i(x_{i-1}) &= y_{i-1} \\ s'_i(x_i) &= \tau_i \\ s'_i(x_{i-1}) &= \tau_{i-1} \end{aligned}$$

Dabei sind τ unbekannte Steigungen.

Ansatz:

$$\begin{aligned}
s_i(x) &= y_{i-1} + (x - x_{i-1})\delta y[x_{i-1}, x_i] + (x - x_{i-1})(x - x_i)(\alpha(x - x_{i-1}) + \beta(x - x_i)) \\
s'_i(x_{i-1}) &= \delta y[x_{i-1}, x_i] + \beta(x_{i-1} - x_i)^2 = \tau_{i-1} \\
s'_i(x_i) &= \delta y[x_{i-1}, x_i] + \alpha(x_i - x_{i-1})^2 = \tau_i \\
\Rightarrow \alpha &= \frac{\tau_i - \delta y[x_{i-1}, x_i]}{(x_i - x_{i-1})^2} \\
\beta &= \frac{\tau_{i-1} - \delta y[x_{i-1}, x_i]}{(x_{i-1} - x_i)^2} \\
h_i &= x_i - x_{i-1} \\
\Rightarrow s_i(x) &= y_{i-1} + (x - x_{i-1})\delta y[x_{i-1}, x_i] \\
&\quad + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h_i^2} ((\tau_i - \delta y[x_{i-1}, x_i])(x - x_{i-1}) + (\tau_{i-1} - \delta y[x_{i-1}, x_i])(x - x_i))
\end{aligned}$$

Für beliebige τ_0, \dots, τ_n erhalten wir $s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mit

- i) $s|_{[x_{i-1}, x_i]} \in \mathcal{P}_3$
- ii) $s(x_i) = y_i$
- iii) $s \in \mathcal{C}^1([a, b])$

Bestimme τ_0, \dots, τ_n so, dass $s \in \mathcal{C}^2([a, b])$, d.h. $s''_i(x_i) = s''_{i+1}(x_i)$ für $i = 1, \dots, n-1$. Das sind $(n-1)$ Bedingungen. (#)

Beim eingespannten Spline sind τ_0 und τ_n bekannt und die $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$ sind die Unbekannten.

Mit

$$(fg)'' = f''g + 2f'g' + fg''$$

gilt wegen

$$\frac{d^2}{dx^2} ((x - x_{i-1})^2(x - x_i)) \Big|_{x=x_i} = 4h_i$$

und

$$\frac{d^2}{dx^2} ((x - x_{i-1})(x - x_i)^2) \Big|_{x=x_i} = 2h_i$$

folgendes:

$$\begin{aligned} s''_i(x_i) &= \frac{1}{h_i^2} ((\tau_i - \delta y[x_{i-1}, x_i])4h_i + (\tau_{i-1} - \delta y[x_{i-1}, x_i])2h_i) \\ &= \frac{2}{h_i} (2\tau_i - 3\delta y[x_{i-1}, x_i] + \tau_{i-1}) \end{aligned}$$

Ebenso zeigt man:

$$s''_{i+1}(x_i) = -\frac{2}{h_{i+1}} (2\tau_i - 3\delta y[x_i, x_{i+1}] + \tau_{i+1})$$

Die Bedingung (#) $s''_i(x_i) = s''_{i+1}(x_i) \quad i = 1, \dots, n-1$ wird damit zu

$$\frac{\tau_{i-1}}{h_i} + 2 \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) \tau_i + \frac{\tau_{i+1}}{h_{i+1}} = 3 \left(\frac{\delta y[x_{i-1}, x_i]}{h_i} + \frac{\delta y[x_i, x_{i+1}]}{h_{i+1}} \right)$$

Damit erhalten wir ein LGS für $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} (\frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2}) & \frac{1}{h_2} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{h_2} & (\frac{2}{h_2} + \frac{2}{h_3}) & \frac{1}{h_3} & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \frac{1}{h_{n-1}} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{h_{n-1}} & (\frac{2}{h_{n-1}} + \frac{2}{h_n}) \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \vdots \\ \tau_{n-1} \end{bmatrix}}_{\tau} = \underbrace{\begin{bmatrix} 3 \left(\frac{\delta y[x_0, x_1]}{h_1} + \frac{\delta y[x_1, x_2]}{h_2} \right) - \frac{\tau_0}{h_1} \\ 3 \left(\frac{\delta y[x_1, x_2]}{h_2} + \frac{\delta y[x_2, x_3]}{h_3} \right) \\ \vdots \\ 3 \left(\frac{\delta y[x_{n-2}, x_{n-1}]}{h_{n-1}} + \frac{\delta y[x_{n-1}, x_n]}{h_n} \right) - \frac{\tau_n}{h_n} \end{bmatrix}}_b$$

Satz 12.4

Sei A wie in (12.3) und $A\tau = b$, dann gilt

$$\max_i |\tau_i| \leq \frac{h}{2} \max_i |b_i|,$$

wobei $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_{n-1})^T$, $b = (b, \dots, bn-1)^T$, $h = \max_i h_i$.

Beweis. Sei $j \in \{1, \dots, n-1\}$ so, dass $|\tau_j| = \max_i |\tau_i|$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
2 \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right) \tau_j &= -\frac{\tau_{j-1}}{h_j} - \frac{\tau_{j+1}}{h_{j+1}} + b_j \\
\Rightarrow 2 \left| \frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right| &\leq \left| \frac{\tau_{j-1}}{h_j} \right| + \left| \frac{\tau_{j+1}}{h_{j+1}} \right| + |b_j| \\
&\leq \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right) |\tau_j| + \max_i |b_i| \\
\Rightarrow \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right) |\tau_j| &\leq \max_i |b_i| \\
\Rightarrow \max_i |\tau_i| = |\tau_j| &\leq \frac{h}{2} \max_i |b_i|
\end{aligned}$$

□

Korollar 12.5

Die Matrix A aus (12.4) ist invertierbar.

Beweis. Die einzige Lösung von $A\tau = 0$ ist $\tau = 0$, $0 \in \mathbb{R}^{n-1}$

□

Korollar 12.6

Der eingespannte Spline existiert und ist eindeutig.

Beweis. Folgt aus (12.5)

□

13 Fehler bei der Splineinterpolation

Vorraussetzungen für diesen Abschnitt:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b,$$

$$h_i = x_i - x_{i-1},$$

$$h := \max_i |h_i|$$

Satz 13.1

Sei $f \in \mathcal{C}^4([a, b])$, s der eingespannte Spline, d.h. $s'(a) = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$, $s(x_i) = f(x_i)$ für $i = 0, \dots, n$. Dann gilt für $x \in [a, b]$

$$|f(x) - s(x)| \leq \frac{5}{384} h^4 \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

Beweis. Siehe (13.3)

□

Lemma 13.2

Unter den Voraussetzungen von (13.1) gilt für $s'(x_i) = \tau_i$:

$$|f'(x_i) - \tau_i| \leq \frac{h^3}{24} \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

Beweis (für den äquidistanten Fall). Für $i = 1, \dots, n-1$ erfüllen die τ_i

$$\frac{1}{h}(\tau_{i-1} + 4\tau_i + \tau_{i+1}) = \frac{3}{h^2}(f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})) = b_i$$

Ersetze nun τ_i durch $f'(x_i)$, so gilt:

$$\frac{1}{h}(f'(x_{i-1}) + 4f'(x_i) + f'(x_{i+1})) - \frac{3}{h^2}(f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})) =: \delta_j$$

Taylorentwicklung von $f'(x_{i-1}), f'(x_{i+1}), f(x_{i-1}), f(x_{i+1})$ um x_i

$$\begin{aligned} f(x_{i+1}) &= f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i) \\ &\quad + \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + h^4 \int_0^1 \frac{(1-t)^3}{3!}f^{(4)}(x_i + th)dt \\ f'(x_{i+1}) &= f'(x_i) + hf''(x_i) + \frac{h^2}{2!}f'''(x_i) \\ &\quad + h^3 \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2!}f^{(4)}(x_i + th)dt \end{aligned}$$

und analog für $f(x_{i-1}) = f(x_i - h)$ und $f'(x_{i-1})$. \Rightarrow

$$\begin{aligned}
\delta_j &= \frac{1}{h}(f'(x_i) - hf''(x_i) + \frac{h^2}{2}f'''(x_i) + R'_{i-} \\
&\quad + 4f'(x_i) + f'(x_i) + hf''(x_i) + \frac{h^2}{2}f'''(x_i) + R'_{i+}) \\
&\quad - \frac{3}{h^2}(f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + R_{i+} \\
&\quad - f(x_i) + hf'(x_i) - \frac{h^2}{2}f''(x_i) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + R_{i-}) \\
&= h^2 \int_0^1 \left(\frac{(1-t)^2}{2!} - 3 \frac{(1-t)^3}{3!} \right) f^{(4)}(x+th) dt \\
&\quad + h^2 \int_0^1 \left(\frac{(1-t)^2}{2!} - 3 \frac{(1-t)^3}{3!} \right) f^{(4)}(x-th) dt \\
&= h^2 (f^{(4)}(\xi_i) + f^{(4)}(\eta_i)) \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2} - \frac{(1-t)^3}{2} dt \\
&= \frac{h^2}{24} (f^{(4)}(\xi_i) + f^{(4)}(\eta_i)), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i], \eta_i \in [x_i, x_{i+1}] \\
\Rightarrow |\delta_i| &\leq \frac{h^2}{12} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|
\end{aligned}$$

Definiere nun $e_i := f'(x_i) - \tau_i$ für $i = 0, \dots, n$. Diese erfüllen die Bedingung $e_0 = 0$, $e_n = 0$ vom eingespannten Spline. Für $f' = (f'(x_1), \dots, f'(x_{n-1}))^T$, $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_{n-1})^T$ und $e = (e_1, \dots, e_{n-1})$ gilt: $A\tau = b$ und $Af' = b + \delta$. Mit (12.4) gilt dann

$$\max_i |e_i| \leq \frac{h}{2} \max_i |\delta_i| \leq \frac{h^3}{24} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

□

13.3 (Beweis von (13.1))

Für $x \in [x_{i-1}, x_i]$ ist $f(x) - s_i(x) = f(x) - p_i(x) + p_i(x) - s_i(x)$, wobei p_i das kubische Hermiteinterpolationspolynom zu f ist mit $p_i(x_i) = f(x_i)$, $p_i(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$, $p'_i(x_i) = f'(x_i)$, $p'_i(x_{i-1}) = f'(x_{i-1})$

Nach Satz (11.2) gilt für ein $\xi \in [x_{i-1}, x_i]$:

$$\begin{aligned} |f(x) - p_i(x)| &= |(x - x_i)^2(x - x_{i-1})^2| \left| \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \right| \\ &\leq \frac{h^4}{16 * 24} |f^{(4)}(\xi)| = \frac{h^4}{384} |f^{(4)}(\xi)| \end{aligned}$$

Weiter gilt:

$$\begin{aligned} s_i(x) - p_i(x) &= (x - x_{i-1})(x - x_i)((\tau_i - f'(x_i))(x - x_{i-1}) \\ &\quad + (\tau_{i-1} - f'(x_{i-1}))(x - x_i)) \frac{1}{h^2} \end{aligned}$$

Da $\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{h^2} \leq \frac{1}{4}$ für $x \in [x_{i-1}, x_i]$ gilt mit (13.2)

$$\begin{aligned} |s_i(x) - p_i(x)| &\leq \frac{1}{4} \frac{h^3}{24} \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(4)}(\xi)| \underbrace{(|x - x_{i-1}| + |x - x_i|)}_{=h} \\ &= \frac{h^4}{96} \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(4)}(\xi)| \end{aligned}$$

Ingesamt gilt also:

$$|f(x) - s_i(x)| \leq h^4 \frac{1+4}{384} \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

□

Bemerkung

Wie wirken sich Störungen/Fehler in den Daten auf den interpolierenden Spline aus?

Gegeben seien $(x_i, y_i)_{i=0}^n$ und (y'_0, y'_n) . Dadurch erhält man einen Spline $s(x)$. Für Daten $(x_i, \tilde{y}_i)_{i=0}^n$ und (y'_0, y'_n) erhält man einen Spline $\tilde{s}(x)$. Der Einfachheit halber sind y'_0 und y'_n fehlerfrei.

Nun gilt:

$$s(x) - \tilde{s}(x) = \sum_{i=0}^n (y_i - \tilde{y}_i) l_i(x),$$

wobei $l_i(x)$ ein kubischer Spline mit

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } i = j \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases}$$

und $l'_i(a) = 0 = l'_i(b)$ ist ("Lagrange-Spline").

Diese zeigen keine Oszillationen wie Lagrangepolynome auf äquidistanten Stützstellen. Es gilt

$$\max_{x \in [a,b]} |s(x) - \tilde{s}(x)| \leq \Lambda_n \max_i |y_i - \tilde{y}_i|$$

mit der Spline Lebesguekonstante

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

Ohne Beweis: Für äquidistante Verteilungen gilt für Splines $\forall n \in \mathbb{N} : \Lambda_n \leq 2$

14 Numerische Differentiation

Problemstellung: Zu $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ berechne näherungsweise $f'(x)$ für $x \in [a, b]$:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Falls $f \in \mathcal{C}^2([a, b])$ gilt:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi), \quad \text{für } \xi \in [a, b] \\ \Rightarrow \frac{f(x+h) - f(x)}{h} &= f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi) \end{aligned}$$

Allerdings ist ein Grenzübergang $h \rightarrow 0$ auf einem Computer problematisch, da statt $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ nur $\frac{f(x+h)-f(x)+\varepsilon}{h}$ berechnet werden kann für ein $\varepsilon < \text{eps}$ (Maschinengenauigkeit)
 $\text{eps} \approx 10^{-16}$

Idee: Um f' zu approximieren, ersetze f durch ein Polynom p oder ein Spline s und approximiere f' durch s' oder p' .

Berechnung von $p'(x)$: Dividierte Differenzen:

$$\begin{array}{ccccccccccc}
x & p(x) = b_0 & & & & & & & & & \\
& & b_1 & & & & & & & & \\
x_0 & y_0 = f(x_0) & & b_2 & & & & & & & \\
& & \delta^1 y[x_0, x_1] & & & & b_3 & & & & \\
x_1 & y_1 = f(x_1) & & & \delta^2 y[x_0, x_1, x_2] & & & \ddots & & & \\
& & \delta^1 y[x_1, x_2] & & & & \delta^3 y[x_0, x_1, x_2, x_3] & & & & \\
x_2 & y_2 = f(x_2) & & & \delta^2 y[x_1, x_2, x_3] & & & & b_n = \delta^n y[x_0, \dots, x_n] & & \\
& & \delta^1 y[x_2, x_3] & & & & & & & & \\
x_3 & y_3 = f(x_3) & & & & & & & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & & & & & \\
x_n & y_n = f(x_n) & & & & & & & & &
\end{array}$$

Interpolationspolynom $p \in \mathcal{P}_n$:

$$\begin{aligned}
p(x) &= \sum_{i=0}^n \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \delta^i y[x_0, \dots, x_i] \\
&= x^n \delta^n y[x_0, \dots, x_n] + r, \quad \text{für } r \in \mathcal{P}_{n-1} \\
p^{(n)} &= n! \delta^n y[x_0, \dots, x_n]
\end{aligned}$$

Füge weitere Diagonale zu Knoten x in obigem Schema hinzu mit $b_0 = p(x)$ und $b_k = \delta^k y[x, x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]$. Nach Definition ist

$$b_{k+1} = \frac{b_k - \delta^k y[x_0, \dots, x_k]}{x - x_k}$$

Rechne nun im Newtonschema von rechts nach links (da $b_n = \delta^n y[x_0, \dots, x_n]$).

```

bn = δn y[x0, ..., xn]
for k = n - 1, ..., 0 do
    bk = bk+1(x - xk) + δk y[x0, ..., xk]
end for
p(x) = b0

```

Nach dem Hornerschema.

Berechne nun die Ableitungen:

Füge weitere Diagonale zu Knoten $x + \varepsilon$ hinzu und lasse $\varepsilon \rightarrow 0$ laufen

$x + \varepsilon$	$p(x + \varepsilon) = c_0$					
		$c_1 = p'(x)$				
x	$p(x) = b_0$	b_1				
			b_2			\ddots
x_0	$y_0 = f(x_0)$	$\delta^1 y[x_0, x_1]$		b_3		c_n
			$\delta^2 y[x_0, x_1, x_2]$		\ddots	$=$
x_1	$y_1 = f(x_1)$	$\delta^1 y[x_1, x_2]$		$\delta^3 y[x_0, x_1, x_2, x_3]$		b_n
			$\delta^2 y[x_1, x_2, x_3]$			$=$
x_2	$y_2 = f(x_2)$	$\delta^1 y[x_2, x_3]$				$\delta^n y[x_0, \dots, x_n]$
x_3	$y_3 = f(x_3)$					
\vdots	\vdots					
x_n	$y_n = f(x_n)$					

Algorithmus zur Berechnung von $p'(x)$:

```

 $c_n = b_n$ 
for  $k = n - 1, \dots, 1$  do
     $c_k = b_k + (x - x_{k-1})c_{k+1}$ 
end for
 $p'(x) = c_1$ 

```

Satz 14.1

Sei $f \in \mathcal{C}^{n+2}([a, b])$, p Interpolationspolynom zu f in $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ paarweise verschieden ($p \in \mathcal{P}_n$).

$\forall x \in [a, b] \exists \xi, \xi' \in [a, b] :$

$$f'(x) - p'(x) = \left(\sum_{i=0}^n \prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right) + \prod_{j=0}^n (x - x_j) \frac{f^{(n+2)}(\xi')}{(n+2)!}$$

Beweisskizze. (vgl. 9.1)

Sei \bar{x} fest aber beliebig, \bar{p} das Hermiteinterpolationspolynom zu

$$\bar{p}(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \dots, n$$

$$\bar{p}(x) = f(x),$$

$$\bar{p}'(x) = f'(x)$$

Newtonschema und Newtoninterpolationspolynome liefert das Ergebnis. \square

III Lineare Gleichungssysteme und lineare Ausgleichsrechnung

- Ziele:**
- Berechne $x \in \mathbb{R}^n$, welches Lösung von $Ax = b$ ist, wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und $b \in \mathbb{R}^n$.
 - Berechne $x \in \mathbb{R}^m$, welches Lösung von $\min_{x \in \mathbb{R}^m} \|Ax - b\|_2$ ist, wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{R}^n$ und $n > m$.

15 Gaußelimination

Beispiel 15.1

- a) Splineinterpolation $A\tau = b$, A tridiagonal und symmetrisch.
- b) Computertomographie
 ΔI : gemessener Intensitätsunterschied zwischen Quelle und Detektor
 $\Delta I = \int_{[a,b]} \alpha(x) dx$
Dabei ist $\alpha(x)$ der Absorptionskoeffizient
Annahme: α ist konstant in jeder Volumenzelle (Voxel) \Rightarrow
 $\Delta I = \sum_{j \in \text{Voxel}} \alpha_j l_j$
 l_j : Länge des Weges $[a, b]$ in Voxel j
Viele Strahlen: $L_j(t) = \omega(\varphi_j) s_j + \omega^\perp(\varphi_j) t$
 $\omega(\varphi_j) = (\cos(\varphi_j), \sin(\varphi_j))$
 $\omega^\perp(\varphi_j) = (-\sin(\varphi_j), \cos(\varphi_j))$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & \dots & l_{1M} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{N1} & l_{N2} & \dots & l_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta I_1 \\ \vdots \\ \Delta I_N \end{bmatrix}$$

M ist dabei die Anzahl der Voxel.

l_{ij} : Länge des i-ten Strahl im j-ten Voxel

α_j : Absorption im j-ten Voxel

ΔI_i : Intensitätsunterschied entlang vom Strahl i

15.2 (Herleitung des Verfahrens (Wdh. LA))

$$Ax = b, A = (a_{ij})_{i,j=1}^n, b = (b_i)_{i=1}^n$$

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
&\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}$$

Ohne Einschränkungen sei $a_{11} \neq 0$. Da A invertierbar ist, ist mindestens ein Element aus $\{a_{i1}, i = 1, \dots, n\}$ ungleich 0. Man kann also Zeilen/Gleichungen so vertauschen, dass $a_{11} \neq 0$. Für $i = 2, 3, \dots, n$ multipliziere die i -te Zeile mit $l_{i1} := \frac{a_{i1}}{a_{11}}$ und ersetze die i -te Zeile durch (i-te Zeile) $- l_{i1} * (1\text{-ste Zeile})$. Dann ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)} \\
0 + a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n &= b_2^{(1)} \\
&\vdots \\
0 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n &= b_n^{(1)}
\end{aligned}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned}
a_{1j}^{(1)} &= a_{1j} \text{ für } j = 1, \dots, n, \\
b_1^{(1)} &= b_1, \\
(a_{i1}^{(1)} &= 0) \\
a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - l_{i1}a_{1j}, \\
b_i^{(1)} &= b_i - l_{i1}b_1 \text{ für } i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n.
\end{aligned}$$

Da die $(n-1) \times (n-1)$ Untermatrix $A^{(1)}(2:n, 2:n)$ ebenfalls invertierbar ist, wiederholt man den eben beschriebenen Schritt.

Nach eventuellem Zeilentausch ist $a_{22}^{(1)} \neq 0$

$$\begin{aligned}
l_{i2} &:= \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \quad i = 3, \dots, n \\
b_2^{(2)} &= b_2^{(1)}, \quad a_{2j}^{(2)} = a_{2j}^{(1)}, \quad j = 2, \dots, n \\
b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - l_{i2}b_2^{(1)}, \quad i = 3, \dots, n \\
a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - l_{i2}a_{2j}^{(1)}, \quad i = 3, \dots, n, j = 2, \dots, n
\end{aligned}$$

Damit entsteht eine Folge

$$(A, b), (A^{(1)}, b^{(1)}), (A^{(2)}, b^{(2)}), \dots, (A^{(n-1)}, b^{(n-1)}) =: (R, c)$$

für eine obere Dreiecksmatrix R (d.h. alle Einträge unter der Diagonalen sind 0).

Das Gleichungssystem mit $(r_{ii} \neq 0)$

$$\begin{aligned} r_{11}x_1 + r_{12}x_2 + \cdots + r_{1n}x_n &= c_1 \\ r_{22}x_2 + \cdots + r_{2n}x_n &= c_2 \\ &\vdots \\ r_{nn}x_n &= c_n \end{aligned}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{c_n}{r_{nn}} \\ x_i &= \frac{1}{r_{ii}}(c_i - \sum_{j=i+1}^n r_{ij}x_j) \text{ für } i = n-1, \dots, 1 \end{aligned}$$

Satz 15.3

Für eine invertierbare Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ liefert das in (15.2) beschriebene Verfahren

$$PA = LR,$$

wobei

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n(n-1)} & 1 \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

und P eine Permutationsmatrix ist.

Beweis. Nehme an, dass die notwendige Zeilenvertauschungen bereits durchgeführt wurden, d.h. ersetze A durch PA (Zeilen und Spalten von P bestehen aus kanonischen Einheitsvektoren z.B. $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$).

Bezeichne mit $L_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$:

$$L_i = \begin{bmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{i+1,i} & & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & \underbrace{-l_{n,i}}_{\text{i-te Spalte}} & & & 1 \end{bmatrix}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= L_1 A, \quad a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - l_{i1} a_{1j} \\ A^{(k)} &= L_k A^{(k-1)}, \quad k = 2, \dots, n-1 \\ R &= A^{(n-1)} = L_{n-1} L_{n-2} \dots L_1 A \\ \Rightarrow A &= \underbrace{L_1^{-1} \dots L_{n-2}^{-1} L_{n-1}^{-1}}_{=L} R \end{aligned}$$

Setzt man

$$V_i = \begin{bmatrix} 0 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & l_{i+1,i} & & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & \underbrace{l_{n,i}}_{\text{i-te Spalte}} & & & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

so ist $L_i = I_n - V_i$, da $V_i V_k = 0$ für $i \leq k$.

$$\underbrace{(I_n - V_i)}_{=L_i} (I_n + V_i) = I_n + V_i - V_i + \underbrace{V_i V_i}_{=0} = I_n$$

d.h. $L_i^{-1} = I_n + V_i$.

$$\begin{aligned} \text{Damit folgt } L &= L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} = (I_n + V_1)(I_n + V_2) \dots (I_n + V_{n-1}) = I_n + V_1 + \\ &V_2 + \dots + V_{n-1} + \underbrace{V_1 V_2 + \dots}_{=0} = L \end{aligned}$$

Das schließende L ist dabei das L aus (15.2). □

Bemerkung

$$\det(PA) = \det(P) \det(A) = (-1)^{\# \text{ Vertauschungen}} \det(A)$$

$$\det(PA) = \det(LR) = \underbrace{\det(L)}_{=1} \det(R) = \prod_{i=1}^n r_{ii}$$

15.4 (Vorwärts- und Rückwärts-Substitution)

Sobald man die LR-Zerlegung (lu-decomposition) von A kennt, löst man $Ax = b$ wie folgt:

$$Pb = PAx = L \underbrace{Rx}_{=:c}$$

Löse $Lc = Pb$ ("Vorwärtssubstitution"):

$c_1 = (Pb)_1$
for $i = 2, \dots, n$ **do**
 $c_i = (Pb)_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} c_j$
end for

und anschließend:

Löse $Rx = c$ wie in (15.2) angegeben ("Rückwärtssubstitution").

15.5 (Aufwand)

Beim Schritt $A \rightarrow A^{(1)}$ benötigt man

- $(n-1) \in \mathcal{O}(n)$ Divisionen
- $(n-1)^2 \in \mathcal{O}(n^2)$ Multiplikationen
- $(n-1)^2 \in \mathcal{O}(n^2)$ Additionen

Also insgesamt Operationen aus $\mathcal{O}(n^2)$.

$A^{(1)} \rightarrow A^{(2)}$: $(n-1)^2$ Operationen.

$A^{(2)} \rightarrow A^{(3)}$: $(n-2)^2$ Operationen.

\vdots

$$A \rightarrow L, R: \sum_{j=1}^n j^2 \approx \frac{1}{3}n^3 \quad (\in \mathcal{O}(n^3)), \text{ da } \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{j=0}^n \left(\frac{j}{n}\right)^2}_{\approx \int_0^1 x^2 = \frac{1}{3}} n^3$$

Die Lösung von $Lc = Pb$ kostet ebenso wie die Lösung von $Rx = c$

$1 + 2 + \dots + (n-1) \approx \frac{1}{2}n^2$ Operationen.

Der Hauptaufwand steckt also in der Berechnung der Zerlegung $PA = LR$.

Bemerkung (Einschub zur Gleitkommarechnung (floating point arithmetic))
 Jeder reelle Zahl $0 \neq x$ kann für festes $B \in \mathbb{N}$, $B \geq 2$ eindeutig durch

$$x = \pm m B^e$$

dargestellt werden, wobei $m \in [1, B)$, die Mantisse, $e \in \mathbb{Z}$, der Exponent und B die Basis ist.

Durch den Computer kommen folgende Einschränkungen hinzu:

- Es stehen nur l Ziffern für die Mantisse m zur Verfügung $\rightarrow m$ wird gerundet.
- Es stehen nur r Ziffern für den Exponenten zur Verfügung

Definition

Eine l -stellige-Basis- B -Gleitkommazahl mit Exponentialbereich $[e_{\min}, e_{\max}]$ ist ein Tripel (σ, m, e) . Dabei ist

- σ das Vorzeichen
- m eine l -stellige Zahl zur Basis B mit festgelegter Kommastelle
- e die ganze Zahl in $[e_{\min}, e_{\max}]$

Der Wert von (σ, m, e) ist $\sigma * m * B^e$.

Beispiel

Betrachte den Standard IEEE 754.

Dieser stellt eine Zahl mit einfacher Genauigkeit dar zur Basis $B = 2$ mit $l = 32$ und $[e_{\min}, e_{\max}] = [-128, 127]$.

Figure 1: From https://de.wikipedia.org/wiki/IEEE_754

Der Wert lässt sich berechnen aus

$$(-1)^\sigma * (1, m) * 2^{\sum_j e_j 2^j - 127}$$

Dabei ist m binär dargestellt.

Definition

Für eine reelle Zahl x bezeichnen wir mit $fl(x)$ eine l -stellige-Basis-10-Darstellung von x mit unbeschränktem Exponenten e , sodass

$$fl(x) = \pm m 10^e,$$

wobei m eine Zahl mit l Stellen ist.

Die Maschinengenauigkeit eps ist die kleinste positive Zahl, sodass $fl(1 + \text{eps}) > 1$. Also ist eps der Abstand zwischen zwei benachbarten Mantissen.

Beispiele

Dezimalsystem ($B = 10$) \Rightarrow $\text{eps} = 5 * 10^{-e}$

Binärsystem ($B = 2$) \Rightarrow $\text{eps} = 2^{-e}$

16 Wahl des Pivotelements

Beispiel 16.1

$$\begin{aligned} 10^{-4}x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$

exakte Lösung:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{0.9999} = 1.0001\overline{0001} \\ x_2 &= \frac{0.9998}{0.9999} = 0.9998\overline{9998} \end{aligned}$$

bei dreistelliger dezimaler Gleitkommaarithmetik (Mantissenlänge 3, Basis 10)

$$\begin{aligned} 0.100 * 10^{-3}x_1 + 0.100 * 10^1x_2 &= 0.199 * 10^1 \\ 0.100 * 10^1x_1 + 0.100 * 10^1x_2 &= 0.200 * 10^1 \end{aligned}$$

und damit erhält man für

a) $a_{11} = 10^{-4}$ (Pivot)

$$\begin{aligned} l_{21} &= \frac{a_{21}}{a_{11}} = 10^4 = 0.100 * 10^5 \\ a_{22}^{(1)} &= 0.100 * 10^1 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5 \\ b_2^{(1)} &= 0.200 * 10^1 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Aus } -0.100 * 10^5 x_2 &= -0.100 * 10^5 \text{ folgt } x_2 = 0.100 * 10^1 = 1 \\ \Rightarrow x_1 &= \frac{b_1 - a_{12}x_2}{a_{11}} = \frac{0.100 * 10^1 - 0.100 * 10^1 x_2}{0.100 * 10^1} = 0 \end{aligned}$$

b) Wähle Pivot $a_{21} = 1$:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 10^{-4}x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned}$$

$$\dots l_{21} = 10^{-4} \Rightarrow x_2 = 1, x_1 = 1$$

Erläuterung:

Falls $|l_{21}|$ groß ist, ergibt sich

$$\begin{aligned} a_{22}^{(1)} &= a_{22} - l_{21}a_{12} \approx l_{21}a_{12} \\ b_2^{(1)} &= b_2 - l_{21}b_1 \approx l_{21}b_1 \\ x_2 &= \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \approx \frac{b_1}{a_{21}} \end{aligned}$$

Bei der Berechnung von x_1 kommt es zu einer Stellenauslöschung $x_1 = (b_1 - \underbrace{a_{12}x_2}_{b_1}) : a_{11} \approx 0$

Ausweg: Zeilentausch, sodass $|a_{21}| \leq |a_{11}|$. Dann ist $|l_{21}| \leq 1$.
Spaltenpivotsuche:

Nehme Pivotelement im $(k+1)$ -ten Schritt

$$a_{j(k+1)}^{(k)} \quad \text{mit} \quad |a_{j(k+1)}^{(k)}| = \max_{i=k+1, \dots, n} |a_{i(k+1)}^{(k)}|,$$

d.h. das betragsmäßig größte Element der $(k+1)$ -ten Spalte von $A^{(k)}$ unterhalb der Diagonalen inklusive des Diagonalelements.

Damit erreicht man

$$|l_{i,(k+1)}| = \frac{|a_{i,k+1}^{(k)}|}{|a_{k+1,k+1}^{(k)}|} \leq 1, \quad i = k+2, \dots, n$$

17 Cholesky-Zerlegung für symmetrische positiv definite Matrizen

Definition 17.1

Eine Matrix $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt symmetrisch, falls $\forall i, j = 1, \dots, n : a_{ij} = a_{ji}$, d.h. $A = A^T$.

Eine Matrix A ist positiv definit, falls

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

Satz 17.2

Sei A symmetrisch positiv definit (kurz: spd), $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann gilt:

- i) Die Gaußelimination kann ohne Zeilenvertauschungen durchgeführt werden
- ii) Für die Zerlegung $A = LR$ gilt $R = DL^T$ für eine Diagonalmatrix

$$D = \begin{bmatrix} r_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & r_{nn} \end{bmatrix}, \quad \text{wobei } \forall i = 1, \dots, n : r_{ii} > 0$$

Beweis. Es gilt: $a_{11} = e_1^T A e_1 > 0$, da A spd, wobei $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^n$ der 1. kanonische Basisvektor ist. Also ist a_{11} ein möglicher Pivot. Schreibe A nun als:

$$\left[\begin{array}{c|c} a_{11} & z^T \\ \hline z & C \end{array} \right]$$

wobei $z = (a_{21}, \dots, a_{n1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$ und C eine symmetrische $(n-1) \times (n-1)$ -Matrix ist.

Nun ist

$$A^{(1)} = \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & z^T \\ \hline 0 & C^{(1)} \end{array} \right]$$

$C^{(1)}$ ist symmetrisch, da

$$c_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \underbrace{\frac{a_{i1}}{a_{11}}}_{=l_{i1}} a_{1j} = a_{ji} - \underbrace{\frac{a_{j1}}{a_{11}}}_{=l_{j1}} a_{1i} = c_{ji}^{(1)}$$

Also ist $C^{(1)}$ insbesondere spd, da für $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} \neq 0$ gilt:

$$0 < \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & z^T \\ \hline z & C \end{array} \right] \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} = a_{11}x_1^2 + \underbrace{y^T z x_1 + x_1 z^T y}_{=2x_1 y^T z} + y^T C y$$

Weiter ist:

$$y^T C^{(1)} y = y^T C y - \frac{1}{a_{11}} y^T z z^T y = y^T C y - \frac{1}{a_{11}} (y^T z)^2$$

Wählt man nun $x_1 = -\frac{y^T z}{a_{11}}$, so gilt:

$$\begin{aligned} 0 &< a_{11} \left(-\frac{y^T z}{a_{11}} \right)^2 - 2 \frac{y^T z}{a_{11}} y^T z + y^T C y \\ &= -\frac{(y^T z)^2}{a_{11}} + y^T C y \\ &= y^T C^{(1)} y \end{aligned}$$

für beliebiges $y \in \mathbb{R}^{n-1} \setminus \{0\}$.

Induktiv folgt dann $a_{22}^{(1)} > 0$ $C^{(2)}$ spd, ...

Zeige nun noch ii):

Es gilt

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}} = \frac{a_{i1}}{r_{11}} = \frac{r_{1i}}{r_{11}}$$

da $r_{1i} = a_{1i} = a_{i1}$ für $i = 2, \dots, n$.

Außerdem gilt

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}}{a_{22}} = \frac{a_{i2}}{r_{22}} = \frac{r_{2i}}{r_{22}}$$

da $r_{2i} = a_{2i}^{(1)} = a_{i2}^{(1)}$ für $i = 3, \dots, n$.

Allgemein gilt also

$$\forall i > j : l_{ij} = \frac{r_{ji}}{r_{jj}},$$

wobei $r_{ii} = a_{ii}^{(i-1)} > 0$ und $r_{ij} = l_{ij} * r_{jj} = r_{jj} * l_{ij}$, d.h. $R = DL^T$ für

$$D = \begin{bmatrix} r_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

Es wird die i-te Zeile von L^T mit r_{ii} skaliert. □

Bemerkung

Wegen $R_{ii} > 0$ ist $D = D^{1/2} D^{1/2}$ mit

$$D^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{r_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{r_{nn}} \end{bmatrix}$$

Damit erhält man für $\tilde{L} = LD^{1/2}$ (Spaltenskalierung)

$$A = LDL^T = LD^{1/2} D^{1/2} L^T = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^T = \tilde{L} \tilde{L}^T$$

Wir bezeichnen die Elemente von \tilde{L} wieder mit l_{ij} :

$$\tilde{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ l_{1n} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

Diese l_{ij} 's lassen sich direkt aus der Gleichung $A = \tilde{L} \tilde{L}^T$ berechnen.

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ l_{1n} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & \dots & l_{n1} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & l_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Nun folgt:

$$\begin{aligned} l_{11}^2 = a_{11} > 0 & \Rightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}} \\ l_{11} l_{i1} = a_{i1} & \Rightarrow l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}} \end{aligned}$$

allgemein gilt:

$$a_{kk} = l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + \dots + l_{kk-1}^2 + l_{kk}^2$$

$$l_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 \right)^{1/2}$$

und für $i > k$:

$$a_{ik} = l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + \dots + l_{ik-1}l_{kk-1} + l_{ik}l_{kk}$$

$$l_{ik} = \frac{\left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}l_{kj} \right)}{l_{kk}}$$

Choleski-Verfahren:

```

for  $k = 1, \dots, n$  do
   $l_{kk} = \left( a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 \right)^{1/2}$ 
  for  $i = k + 1, \dots, n$  do
     $l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}l_{kj}) / l_{kk}$ 
  end for
end for

```

Nun stellen sich folgende zwei Fragen:

- Wie wirken sich Störungen in A und b auf die Lösung von $Ax = b$ aus?
- Wie wirken sich Rundungsfehler im Verfahren auf die berechnete Lösung aus?

18 Matrixnormen

Definition 18.1

Die Abbildung $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, x \mapsto \|x\|$ ist eine Norm auf dem \mathbb{R} - Vektorraum \mathbb{R}^n , falls gilt:

- i) $\forall x \in \mathbb{R}^n : \|x\| \geq 0$
- ii) $\|x\| = 0 \Rightarrow x = 0 \in \mathbb{R}^n$
- iii) $\forall \alpha \in \mathbb{R} \forall x \in \mathbb{R}^n : \|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$

iv) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

Beispiel 18.2

i) $\|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j|$ für $x = (x_1, \dots, x_n)^T$

ii) $\|x\|_2 = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right)^{1/2}$ oder allgemein $\|x\|_p = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^p \right)^{1/p}$ für $1 \leq p < \infty$

iii) $\|x\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|$

Definition 18.3

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, d.h. $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ linear. Nun heißt

$$\|A\|_{a \rightarrow b} := \sup_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|_a}{\|x\|_b}$$

die von den Vektorraumnormen induzierte Norm. Schreibe einfach nur $\|\cdot\|$.

Bemerkung 18.4

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\alpha \in \mathbb{R}$ Es gilt für die in (18.3) definierte Matrixnorm

i) $\forall x \in \mathbb{R}^n : \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$
 $\|A\|$ ist die kleinste Zahl mit dieser Eigenschaft.

ii) Es gilt $\|A\| \geq 0$. Weiter gilt $\|A\| = 0 \Rightarrow A = 0$

iii) $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$

iv) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$.
 Damit ist $\|\cdot\|$ tatsächlich eine Norm.

v) $\|I\| = 1$ falls $m = n$, $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m} = \|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$

vi) $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ (Submultiplikativität)

Satz 18.5

Sei $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{m,n} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Es gilt für $\|A\|_p = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$ für $p \geq 1$

i) $\|A\|_1 = \max_{j=1, \dots, n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$ ist die maximale Spaltenbetragssumme

ii) $\|A\|_2$ ist die Wurzel des größten Eigenwerts von $A^T A$

iii) $\|A\|_\infty = \max_{i=1,\dots,m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ ist die maximale Zeilenbetragssumme

Beweis.

i) + iii) Übungsaufgabe

ii) $A^T A$ ist symmetrisch und positiv semidefinit. Es gilt nämlich

$$(A^T A)^T = A^T A^{TT} = A^T A$$

und

$$x^T A^T A x = (Ax)^T Ax = \|Ax\|_2^2 \geq 0$$

Damit ist $A^T A$ orthogonal diagonalisierbar, d.h. es ex. Q mit $Q^T Q = I$ sodass $Q^T A^T A Q = D$ mit

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_m \end{bmatrix}$$

wobei $\lambda_j \geq 0$ ($j = 1, \dots, m$) die Eigenwerte von $A^T A$ sind.

Damit ist

$$\begin{aligned} \|Ax\|_2^2 &= x^T A^T A x \underset{x=Qy}{=} y^T Q^T A^T A Q y = \sum_{j=1}^m \lambda_j y_j^2 \\ &\leq \lambda_{\max} \sum_{j=1}^m y_j^2 = \lambda_{\max} y^T y = \lambda_{\max} \|y\|_2^2 = \lambda_{\max} \|x\|_2^2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \|A\|_2 \leq \sqrt{\lambda_{\max}}$ für den größten Eigenwert λ_{\max} von $A^T A$.

Sei $\tilde{x} = Q\tilde{y}$ mit $\tilde{y} = (0, \dots, 0, \underset{j_0\text{-ter Eintrag}}{1}, 0, \dots, 0)^T$ mit $\lambda_{j_0} = \lambda_{\max}$. Dann

ist $\|A\tilde{x}\|_2^2 = \lambda_{\max} \|\tilde{x}\|_2^2 \Rightarrow \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}}$.

□

19 Kondition eines Problems

Definition 19.1

Seien X, Y normierte Vektorräume $(X, \|\cdot\|_X)$, $(Y, \|\cdot\|_Y)$. Ein Problem bzw. eine Problemstellung ist eine Abbildung $f : X \rightarrow Y$, wobei X die Eingaben und Y die Ausgaben enthält.

Beispiel 19.2

Sei $X = Y = \mathbb{R}^2$ und $\|\cdot\|_X = \|\cdot\|_Y = \|\cdot\|_2$.

- i) $f : (x_1, x_2) \mapsto A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ für eine 2×2 Matrix A . "Anwendung der linearen Abbildung A "
- ii) $f : (p, q) \mapsto$ Wurzeln von $z^2 + pz + q = 0$. "Berechnung der Wurzeln eines normierten quadratischen Polynoms"

Definition 19.3 (Absolute Kondition)

Seien X, Y normierte Vektorräume $f : X \rightarrow Y$ ein Problem. Die **absolute Kondition** von f in $x \in X$ ist

$$\kappa_{\text{abs}}(f, x) := \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\|z\|_X \leq \delta} \frac{\|f(x+z) - f(x)\|_Y}{\|z\|_X}$$

Lemma 19.4

Sei $f : (\mathbb{R}, \|\cdot\|) \rightarrow (\mathbb{R}, \|\cdot\|)$ differenzierbar, so gilt

$$\kappa_{\text{abs}}(f, x) = |f'(x)|$$

Beweis. Übungsaufgabe. □

Definition 19.5 (Relative Kondition)

Seien X, Y normierte Räume, $f : X \rightarrow Y$ ein Problem. Die **relative Kondition** von f in $x \in X$ ist

$$\kappa_{\text{rel}}(f, x) := \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\|z\|_X \leq \delta} \frac{\frac{\|f(x+z) - f(x)\|_Y}{\|f(x)\|_Y}}{\frac{\|z\|_X}{\|x\|_X}}$$

d.h. $\kappa_{\text{rel}}(f, x)$ ist die kleinste Zahl sodass

$$\underbrace{\frac{\|f(x) - f(x+z)\|_Y}{\|f(x)\|_Y}}_{\text{relativer Fehler in der Ausgabe, wenn man statt } f(x) \text{ das Problem } f(x+z) \text{ gelöst hat}} \leq \kappa_{\text{rel}}(f, x) \underbrace{\frac{\|z\|_X}{\|x\|_X}}_{\text{relativer Fehler in der Eingabe}}$$

Beispiel 19.6

Kondition der Addition:

$$\begin{aligned} f : (\mathbb{R}^2, \|\cdot\|_1) &\rightarrow (\mathbb{R}, |\cdot|), (a, b) \mapsto a + b \\ \kappa_{\text{abs}}(f, (a, b)) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq \delta, z=(\alpha, \beta)} \frac{|a + \alpha + b + \beta - a - b|}{|\alpha| + |\beta|} = 1 \\ \kappa_{\text{rel}}(f, (a, b)) &= \dots = \frac{|a| + |b|}{|a + b|} \end{aligned}$$

d.h. für die Addition zweier Zahlen mit gleichem Vorzeichen ist $\kappa_{\text{rel}} = 1$. Für Subtraktion zweier annähernd gleich großer Zahlen ist κ_{rel} groß.

Definition 19.7

Ein Problem heißt **gut konditioniert**, falls κ_{rel} klein ist ($< 10^3$) und **schlecht konditioniert**, falls κ_{rel} groß ist ($> 10^8$).

20 Konditionszahl einer Matrix

Gegeben sei $Ax = b$. Welchen Einfluss haben Fehler in A und in b auf die Lösung x ?

In Form von §19: $f : (A, b) \mapsto x$. Statt a_{ij} stehen nun $\tilde{a}_{ij} = a_{ij}(1 + \varepsilon_{ij})$ und statt b_i nun $b_i(1 + \varepsilon_i)$ zur Verfügung. Also $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$.

Satz 20.1

Sei A invertierbar, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $Ax = b$, $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$, $x \neq 0$.

Falls

$$\frac{\|A - \tilde{A}\|}{\|A\|} \leq \varepsilon_A, \quad \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|} \leq \varepsilon_b$$

so gilt für die Lösung des LGS:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \varepsilon_A \text{cond}(A)} (\varepsilon_A + \varepsilon_b)$$

falls $\varepsilon_A * \text{cond}(A) < 1$. Hierbei ist $\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ die Konditionszahl von A und die Matrixnorm wird von der Vektorraumnorm induziert (vgl. 18.3).

Beweis.

$$\begin{aligned}
b - \tilde{b} &= Ax - \tilde{A}\tilde{x} \\
&= Ax - A\tilde{x} + A\tilde{x} - \tilde{A}\tilde{x} \\
&= A(x - \tilde{x}) + (A - \tilde{A})\tilde{x} \\
\Rightarrow x - \tilde{x} &= A^{-1}(b - \tilde{b} - (A - \tilde{A})\tilde{x}) \\
\|x - \tilde{x}\| &\leq \|A^{-1}\|(\|b\|\varepsilon_b + \varepsilon_A\|A\|\|\tilde{x}\|) \\
&\leq \underset{b=Ax}{\text{cond}(A)}(\|x\|\varepsilon_b + \varepsilon_A(\|\tilde{x} - x\| + \|x\|)) \\
\Rightarrow (1 - \text{cond}(A)\varepsilon_A)\|x - \tilde{x}\| &\leq \text{cond}(A)\|x\|(\varepsilon_b + \varepsilon_A)
\end{aligned}$$

□

Bemerkung 20.2

Die Abschätzung aus (20.1) ist scharf, d.h. es gibt \tilde{A} und \tilde{b} , sodass Gleichheit gilt. Aber sie ist oft zu pessimistisch für Rundungsfehlerabschätzungen.

Beispiel: Betrachte folgendes Gleichungssystem:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 10^{-8} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

Sei des Weiteren $|\varepsilon_j| < \textit{eps}$.

Es gilt $\text{cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty = 2 * 10^8$. Das gestörte System ist nun:

$$\begin{aligned}
(1 + \varepsilon_1)\tilde{x}_1 + (1 + \varepsilon_2)\tilde{x}_2 &= \overbrace{b_1(1 + \varepsilon_3)}^{=\tilde{b}_1} \\
(1 + \varepsilon_4)10^{-8}\tilde{x}_2 &= b_2(1 + \varepsilon_5)
\end{aligned}$$

Mit $\frac{1}{1+\varepsilon} = 1 - \varepsilon + \varepsilon^2 - \varepsilon^3 + \varepsilon^4 - \dots$ folgt

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \tilde{x}_2 &= 10^8 b_2 \frac{1 + \varepsilon_5}{1 + \varepsilon_4} = 10^8 b_2 (1 + \varepsilon_5 - \varepsilon_4) + \mathcal{O}(\textit{eps}^2) \\
\Rightarrow \frac{|x_2 - \tilde{x}_2|}{|x_2|} &\leq 2\textit{eps}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{x}_1 &= [b_1(1 + \varepsilon_3) - x_2(1 + \varepsilon_5 - \varepsilon_4 + \varepsilon_3)](1 - \varepsilon_1) + \mathcal{O}(eps^2) \\ &= [x_1 + \underbrace{b_1}_{=x_1+x_2} \varepsilon_3 - x_2(\varepsilon_5 - \varepsilon_4 + \varepsilon_2)](1 - \varepsilon_1) + \mathcal{O}(eps^2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{x}_1 - x_1 &= x_1(-\varepsilon_1 + \varepsilon_3) - x_2(-\varepsilon_3 + \varepsilon_5 - \varepsilon_4 + \varepsilon_2) + \mathcal{O}(eps^2) \\ \frac{|\tilde{x}_1 - x_1|}{|x_1|} &\leq (2 + 4 \frac{|x_2|}{|x_1|})eps\end{aligned}$$

Dieser Wert kann sehr groß werden für $\frac{|x_2|}{|x_1|} \rightarrow \infty$, aber $\frac{|\tilde{x}_1 - x_1|}{\|x_1\|_\infty} \leq 6eps$.

Lemma 20.3

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar. Dann gilt:

- i) $\text{cond}(A) \geq 1$
- ii) $\forall \alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\} : \text{cond}(\alpha A) = \text{cond}(A)$
- iii) $\text{cond}(A) = \frac{\max_{\|y\|=1} \|Ay\|}{\min_{\|x\|=1} \|A^{-1}x\|}$

Beweis. Übungsaufgabe. □

Beispiel 20.4

1) Matrizen mit kleiner Konditionszahl:

- I mit $\text{cond}(I) = 1$
- orthogonale Matrizen Q ($Q^T Q = I$)

$$\begin{aligned}\|Qx\|_2^2 &= x^T Q^T Q x = x^T x = \|x\|_2^2 \Rightarrow \|Q\|_2 = 1 \\ Q^{-1} &= Q^T \Rightarrow \|Q^{-1}\|_2 = 1 \Rightarrow \text{cond}_2(Q) = 1\end{aligned}$$

- Splineinterpolationsmatrix ($h_i = h$)

$$A = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 4 & 1 & & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & & 1 \\ 0 & & 1 & 4 \end{bmatrix}, \quad \|A\|_{\infty} = 6$$

$$A = 4(I + N) \quad \text{mit } N = \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & & 0 \\ 1/4 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & & 1/4 \\ 0 & & 1/4 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = 1/4(I + N)^{-1} = 1/4(I - N + N^2 - N^3 + \dots), \quad \|N\|_{\infty} = 1/2$$

$$\|A^{-1}\| \leq 1/4(\|I\| + \|N\| + \|N\|^2 + \dots) = 1/2$$

2) Matrizen mit großer Konditionszahl:

- Hilbertmatrix $H = \left(\frac{1}{i+j-1} \right)_{i,j=1}^n$

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & \dots \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & & \\ 1/3 & 1/4 & & & \\ 1/4 & & & & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix}$$

Für $n \in \{1, \dots, 10\}$ ergibt sich folgende Tabelle:

n	$\text{cond}_2(A)$
1	1
2	27
3	740
4	2300
\vdots	\vdots
10	$35 * 10^{13}$

21 Stabilität von Verfahren

Definition 21.1

Ein Verfahren zur Auswertung eines Problems f ist die Hintereinander-

Ausführung von elementaren Operationen \tilde{f}_k
 $\tilde{f} = \tilde{f}_n \circ \tilde{f}_{n-1} \circ \dots \circ \tilde{f}_1, \quad \tilde{f}_k \in \{+, -, *, /, fl, \sqrt{\cdot}, \dots\}$

Definition 21.2

Ein Verfahren zur Auswertung des Problems f ist stabil im Sinne der Vorwärtsanalysis, falls

$$\|\tilde{f}(x) - f(x)\| < C * eps * \|f(x)\|$$

für eine nicht zu große Konstante C .

Beispiel 21.3

Berechnung von $\frac{1}{x(x-1)}$ für $x = 10^4$.

$$\begin{array}{lcl} 1) & x & \begin{array}{ccccc} \nearrow & fl(x) & \searrow & & \\ & & & fl(x(x-1)) & \rightarrow & fl(\frac{1}{x(x-1)}) \\ & \searrow & fl(x-1) & \nearrow & & \end{array} \\ 2) & x & \begin{array}{ccccc} \nearrow & fl(x) & \rightarrow & fl(\frac{1}{x}) & \searrow & \\ & \searrow & fl(x-1) & \rightarrow & fl(\frac{1}{x-1}) & \nearrow & fl(-\frac{1}{x} + \frac{1}{x-1}) \end{array} \end{array}$$

Verfahren 2) ist nicht stabil, da $\frac{1}{x} \approx \frac{1}{x-1}$, falls $x = 10^4$ gilt und die Subtraktion im letzten Schritt schlecht konditioniert ist.

Definition 21.4

Ein Verfahren \tilde{f} zur Auswertung eines Problems f ist stabil im Sinne der Rückwärtsanalysis, falls für jedes $x \in X$ ein $\tilde{x} \in X$ existiert, sodass

$$\tilde{f}(x) = f(\tilde{x}) \quad \text{mit} \quad \frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \leq C * eps$$

für eine nicht zu große Konstante C . Die berechnete Lösung $\tilde{f}(x)$ kann als exakte Lösung eines benachbarten Problems $f(\tilde{x})$ aufgefasst werden.

Beispiel 21.5

Zur Berechnung von $x_1x_2 + x_3x_4$ verwendet man:

$$\begin{array}{lcl} (x_1, x_2, x_3, x_4) & \begin{array}{ccccc} \nearrow & x_1x_2 & \searrow & & \\ & & & + & x_1x_2 + x_3x_4 \\ & \searrow & x_1x_2 & \nearrow & \end{array} \end{array}$$

und erhält unter Berücksichtigung von Rundungsfehlern

$$[(x_1(1 + \varepsilon_1)x_2(1 + \varepsilon_2))(1 + \eta_1) + (x_3(1 + \varepsilon_3)x_4(1 + \varepsilon_4))(1 + \eta_2)](1 + \eta_3) \quad \text{für } |\varepsilon_j|, |\eta_j| \leq eps$$

Das ist das exakte Ergebnis für

$$\tilde{x}_1 = x_1(1 + \varepsilon_1)(1 + \eta_1)(1 + \eta_3)$$

$$\tilde{x}_2 = x_2(1 + \varepsilon_2)(1 + \eta_1)(1 + \eta_3)$$

$$\tilde{x}_3 = x_3(1 + \varepsilon_3)(1 + \eta_2)(1 + \eta_3)$$

$$\tilde{x}_4 = x_4(1 + \varepsilon_4)(1 + \eta_2)(1 + \eta_3)$$

Die Konstante C in (21.4) ist etwa 3, wenn man Produkte von ε_j und η_j vernachlässigt. Das Verfahren ist also rückwärtsstabil, auch wenn evtl. das Problem schlecht konditioniert ist.

Satz 21.6 (Stabilität der Gaußelimination (LR-Zerlegung))

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und $\hat{L}\hat{R}$ das rundungsfehlerbehaftete Ergebnis der Gaußelimination mit Pivotisierung, sodass $|\hat{l}_{ij}| \leq 1$ für alle $i, j \in \{1, \dots, n\}$.

Dann gilt für $\hat{A} = (\hat{a}_{ij})_{i,j=1}^n = \hat{L}\hat{R}$:

$$|a_{ij} - \hat{a}_{ij}| \leq 2 \max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}| * \min\{i-1, j\} * eps$$

für Maschinengenauigkeit eps .

Beweis. Im k -ten Schritt berechnet man ausgehend von $\hat{a}_{ij}^{(k-1)}$

$$\begin{aligned} \hat{a}_{ij}^{(k)} &= \left(\hat{a}_{ij}^{(k-1)} - \hat{l}_{ik} \hat{a}_{kj}^{(k-1)} (1 + \varepsilon_{ijk}) \right) (1 + \eta_{ijk}) \\ &= \hat{a}_{ij}^{(k-1)} - \hat{l}_{ik} \hat{a}_{kj}^{(k-1)} + \mu_{ijk} \quad (*) \end{aligned}$$

mit $|\varepsilon_{ijk}|, |\eta_{ijk}| \leq eps$ und $\mu_{ijk} \leq |\hat{a}_{ij}^{(k-1)}| |\eta_{ijk}| + |\hat{l}_{ik}| |\hat{a}_{kj}^{(k-1)}| |\varepsilon_{ijk}| + \mathcal{O}(eps^2)$. (**)

Nach Definition von \hat{A} ist

$$\hat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} \hat{l}_{ik} \hat{r}_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} \hat{l}_{ik} \hat{a}_{kj}^{(k-1)}$$

Verwendet man für $i > j$ (*), so erhält man

$$\hat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^j \left(\hat{a}_{ij}^{(k-1)} - \hat{a}_{ij}^{(k)} + \mu_{ijk} \right) = a_{ij} + \sum_{k=1}^j \mu_{ijk}, \quad \text{da } a_{ij}^{(j)} = 0$$

Für $i \leq j$ erhält man

$$\hat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} \left(\hat{a}_{ij}^{(k-1)} - \hat{a}_{ij}^{(k)} + \mu_{ijk} \right) + \hat{l}_{ii} a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} \mu_{ijk}, \quad \text{da } \hat{l}_{ii} = 1$$

Zusammen mit (**) folgt die Behauptung. \square

Bemerkung

Aus dem Satz (21.6) kann man entnehmen, dass die Gaußelimination im Sinne der Rückwärtsanalyse stabil ist, falls

$$\frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}$$

nicht zu groß wird. Dieser Quotient ist meistens klein. Mehr kann man nicht beweisen.

22 QR-Zerlegung mit Hilfe der Householdertransformationen

Ziel: Konstruiere zu einer gegebenen Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) eine Zerlegung $A = QR$ mit einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ($Q^T Q = I_m$) und

$$R = \underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix}}_n \begin{matrix} \} n \\ \} m - n \end{matrix}$$

Dabei ist $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix.

Anwendungen:

- a) $m = n$, $Ax = b$, $Qc = b$, $Rx = c$, $Q^{-1} = Q^T$. Besonders stabiler Algorithmus (stabiler als Gauß). Dafür doppelt so teuer.
- b) $m > n \rightarrow$ lineare Ausgleichsrechnung (siehe §23)
- c) QR-Algorithmus zur Berechnung von Eigenwerten (siehe Numerik II)

Definition 22.1

Für $v \in \mathbb{R}^m$, $\|v\|_2 = 1$ heißt

$$Q = I - 2vv^T$$

Householderreflexion zum Vektor v .

Satz 22.2

Für eine Householderreflexion $v \in \mathbb{R}^m$, $\|v\|_2 = 1$, $Q = I - 2vv^T$ gilt:

- i) Q ist symmetrisch
- ii) Q ist orthogonal
- iii) $Qv = -v$
- iv) $Qw = w$ für alle $w \in \mathbb{R}^m$ mit $w^T v = 0$

Mit iii) und iv) erhält man, dass Q eine Spiegelung an der Hyperebene $\{x \in \mathbb{R}^m : x^T v = 0\}$ ist.

Beweis.

- i) $Q^T = (I - 2vv^T)^T = I - 2vv^T = Q$
- ii) $Q^T Q \stackrel{i)}{=} (I - 2vv^T)(I - 2vv^T) = I - 4vv^T + \underbrace{2v(v^T v)}_{=1}v^T = I$
- iii) $Qv = (I - 2vv^T)v = v - 2v \underbrace{v^T v}_{=1} = -v$
- iv) $Qw = (I - 2vv^T)w = w - 2v \underbrace{v^T w}_{=0} = w$

□

22.3 (Algorithmus der QR-Zerlegung)

Sei $A = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{bmatrix}$ mit a_j als die j-te Spalte von A .

$$1) \text{ Suche } Q_1 a_1 = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \alpha_1 e_1$$

Da Q_1 orthogonal ist, gilt $\|a_1\|_2^2 = \|Q_1 a_1\|_2^2 = |\alpha_1|^2$

$\Rightarrow \alpha_1 = \pm \|a_1\|_2$ (Vorzeichen noch nicht fest)

$$Q_1 a_1 = \alpha_1 e_1$$

$$Q_1 a_1 = (I - 2u_1 u_1^T) a_1 = a_1 - 2u_1 \underbrace{u_1^T a_1}_{\in \mathbb{R}}$$

$\Rightarrow u_1$ ist ein Vielfaches von $a_1 - \alpha_1 e_1$

Mit der Forderung $\|u_1\|_2 = 1$ ergibt sich

$$u_1 = \frac{a_1 - \alpha_1 e_1}{\|a_1 - \alpha_1 e_1\|_2}$$

Dabei ist $\|a_1 - \alpha_1 e_1\|_2^2 = \underbrace{\|a_1\|_2^2}_{=\alpha_1^2} - 2\alpha_1 \underbrace{e_1^T a_1}_{a_{11}} + \alpha_1^2 = 2\alpha_1(\alpha_1 - a_{11})$ Man

wählt das Vorzeichen von α_1 so, dass keine Stellenauslöschung bei der Berechnung von $\alpha_1 - a_{11}$ auftritt

$$\alpha_1 = -\text{sgn}(a_{11}) \|a_1\|_2$$

Es ist dann

$$Q_1 A = A^{(1)} = \left[\begin{array}{c|c} \alpha_1 & * \\ \hline 0 & \\ \vdots & B \\ 0 & \end{array} \right]$$

wobei die j-te Spalte von $A^{(1)}$ (Nenne diese $a_j^{(1)}$) durch

$$a_j^{(1)} = Q_1 a_j = a_j - \frac{2v_1^T a_j}{v_1^T v_1} v_1, \quad j = 2, \dots, n$$

für $v_1 = a_1 - \alpha_1 e_1$ gegeben ist. Weiter gilt

$$\frac{v_1^T v_1}{2} = \frac{1}{2} \|a_1 - \alpha_1 e_1\|_2^2 = \alpha_1(\alpha_1 - a_{11})$$

Bemerkung: Zur Berechnung von $Q_1 A$ reicht es v_1 und α zu kennen. Die Matrix $Q_1 = I - 2u_1 u_1^T$ wird nicht aufgestellt.

- 2) Suche nun $\tilde{Q}_2 = I_{m-1} - 2u_2 u_2^T$ mit $u_2 \in \mathbb{R}^{m-1}$, sodass $\tilde{Q}_2 b_1 = \alpha_2 e_1$ ($e_1 \in \mathbb{R}^{m-1}$).

$$\text{Für } Q_2 = \left[\begin{array}{cccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{Q}_2 & \\ 0 & & & \end{array} \right] \text{ ist dann } Q_2 A^{(1)} = \left[\begin{array}{cc|c} \alpha_1 & * & * \\ 0 & \alpha_2 & \\ \vdots & 0 & \\ & \vdots & \\ 0 & 0 & C \end{array} \right]$$

usw.

im k-ten Schritt hat man dann

$$Q_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & \\ & \tilde{Q}_k \end{bmatrix}$$

mit dem Ergebnis $Q_n Q_{n-1} \cdots Q_1 A = R$ mit

$$R = \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \alpha_n \\ & & & 0 \end{bmatrix}}_n \left. \begin{array}{l} \left. \vphantom{\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}} \right\} n \\ \left. \vphantom{\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}} \right\} m - n \end{array} \right\}$$

22.4 (Rechenaufwand)

Schritt 1: $\approx 2 * m * n$ (*,+) Operationen

Gesamtaufwand: $2(m * n + (m - 1)(n - 1) \cdots (m - n + 1)1)$

Falls $m = n \rightarrow \frac{2}{3} n^3$

Falls $m \gg n \rightarrow 2m(n + (n - 1) + \cdots + 1) \approx mn^2$

22.5 (Stabilität)

$$A = QR$$

Da Q orthogonal ist, gilt $\|A\|_2 = \|QR\|_2 = \|R\|_2$

\Rightarrow Einträge von R können nicht groß werden.

Für das berechnete \hat{Q} gilt $\|\hat{Q}^T \hat{Q} - I\| < c * eps$ für eine kleine Konstante c , d.h. \hat{Q} ist fast orthogonal.

Man kann zeigen, dass

$$\|A - \hat{Q}\hat{R}\|_2 < c \|A\|_2 eps$$

Bemerkung 22.6

QR-Zerlegung ist bis zum Ende durchführbar, falls $\text{rang}(A) = n$ (dann ist $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \neq 0$, da $\text{rang}(A) = \text{rang}(R)$)

Falls $\text{rang}(A) = k < n$ wäre bei der Rechnung ohne Rundungsfehler $\alpha_l = 0$ für ein l und das Verfahren bricht ab. Modifiziere den Algorithmus deswegen:

- 1. Schritt:** Berechne $\|a_1\|_2, \dots, \|a_n\|_2$ die Spaltennormen und vertausche die Spalten, sodass $\|a_1\|_2$ maximal wird:

$$Q_1 A P_1 = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & \\ 0 & & \\ \vdots & * & \\ 0 & & \end{bmatrix}, \quad |\alpha_1| = \|a_1\|_2$$

usw. mit Spaltenvertauschungen in weiteren Schritten.

$\Rightarrow |\alpha_1| \geq |\alpha_2| \geq \dots \geq |\alpha_n| > 0$. Falls $\text{rang}(A) = k < n$ erhält man $\alpha_{k+1} = 0$ und

$$\left[\begin{array}{cc|c} \alpha_1 & & R_1 \\ & \ddots & \\ 0 & & \alpha_k \\ \hline & 0 & 0 \end{array} \right]$$

$AP = QR$ (numerische Rangentscheidung)

falls $\frac{|\alpha_{k+1}|}{|\alpha_1|} < 100\text{eps}$ setze $\text{Rang}(A) = k$.

23 Lineare Ausgleichsrechnung

Problem 23.1

Zu gegebenen Messdaten (t_j, y_j) $j = 1, \dots, m$ suche $y = f(t)$

$$f(t) = \sum_{i=1}^n x_i \varphi_i(t),$$

sodass $y_j \approx f(t_j)$ für $j = 1, \dots, m$.

Hierbei sind die $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ gegebene Funktionen und x_1, \dots, x_n unbekannte Parameter, wobei $m \gg n$.

Genauer: $\sum_{j=1}^m (y_j - f(t_j))^2$ soll minimal werden.

23.2 (Matrix-Vektor Formulierung)

Es sei

$$A = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

$$b = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

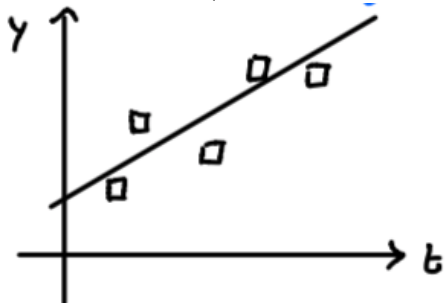
Setze

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Nun gilt es $\|Ax - b\|_2$ zu minimieren

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Beispiel 23.3 (Ausgleichsproblem)



Wähle $n = 2$ mit $\varphi_1(t) = 1$ und $\varphi_2(t) = t$. Dann ergibt sich

$$f(t) = x_2 t + x_1.$$

Bezeichne nun x_2 mit m und x_1 mit c , um die übliche Geradedarstellung zu erhalten:

$$f(t) = mt + c,$$

wobei c der y-Achsenabschnitt und m die Steigung ist. Dann ergibt sich:

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_m & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

Satz 23.4 (von Gauß)

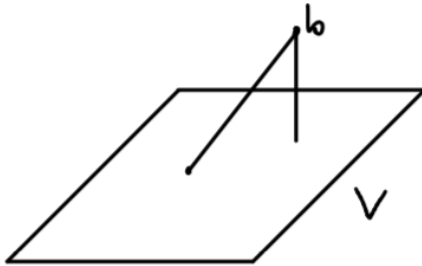
Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $m \geq n$. Äquivalent sind:

- i) $\|Ax - b\|_2 = \min_{v \in \mathbb{R}^n} \|Av - b\|_2$
- ii) $A^T Ax = A^T b$ "Normalengleichung"

Bemerkung

$V = \{Ax : x \in \mathbb{R}^n\} \leq \mathbb{R}^n$ Unterraum

Das gesuchte Ax ist die orthogonale Projektion von b in V .



Beweis.

i) \Leftrightarrow

Für beliebiges $y \in \mathbb{R}^n$ gilt:

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &\leq \|A(x + y) - b\|_2^2 \\ &= (A(x + y) - b)^T (A(x + y) - b) \\ &= (A(x - b) + Ay)^T ((Ax - b) + Ay) \\ &= \|Ax - b\|_2^2 + 2 \underbrace{(Ay)^T (Ax - b)}_{=0} + \underbrace{\|Ay\|_2^2}_{\geq 0} \end{aligned}$$

$\Leftrightarrow (Ay)^T (Ax - b) = 0$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$

$\Leftrightarrow Ax - b$ ist orthogonal auf V

$$\Leftrightarrow y^T A^T A x - y^T A^T b = 0 \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n$$

$$\Leftrightarrow A^T A x - A^T b = 0$$

□

Eigenschaften 23.5

- $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv semidefinit [$\forall x \in \mathbb{R}^n : \|Ax\|_2^2 = x^T A^T A x \geq 0$]
- $A^T A$ ist positiv definit $\Leftrightarrow \text{Rang}(A) = n$ [$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 = 0 \Leftrightarrow Ax = 0 \stackrel{\text{falls } \text{Rang}(A) = n}{\Leftrightarrow} x = 0$]

Algorithmus 23.6

1. Algorithmus

Berechne $A^T A$ ($\frac{1}{2}mn^2$ Operationen)

und $A^T b$ (mn Operationen)

Löse $A^T A x = A^T b$ mit der Choleskyzerlegung ($\frac{1}{6}n^3$ Operationen)

2. Algorithmus

Berechne QR-Zerlegung von A (mn^2 Operationen)

Nun gilt $A = QR$ und damit lässt sich $\|Ax - b\|_2^2 = \|QRx - b\|_2^2 =$

$$\|Rx - Q^T b\|_2^2 = \|\tilde{R}x - c\|_2^2 + \|d\|_2^2 \text{ mit } R = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix} \text{ und } Q^T b = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$$

umschreiben.

Dabei ist $\tilde{R} = (r_{ij})_{i,j=1}^n$ eine quadratische $n \times n$ rechte obere Dreiecksmatrix und c der Vektor aus den ersten n Einträgen von $Q^T b$.

$\|Ax - b\|_2 = \min! \Leftrightarrow \tilde{R}x = c$, dann ist $\|Ax - b\|_2^2 = \|d\|_2^2$

Berechne $Q^T b = Q_n Q_{n-1} \dots Q_1 b$ ($2nm$ Operationen)

Löse $\tilde{R}x = c$ ($\frac{1}{2}n^2$ Operationen)

Der 2. Algorithmus mit der QR-Zerlegung ist etwa doppelt so teuer wie der 1. Algorithmus dafür aber deutlich stabiler.

Beispiel 23.7

Sei $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{bmatrix}$, $b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ und $\varepsilon^2 < eps$.

Es gilt $A^T A = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 + \varepsilon^2 \end{bmatrix}$ und $A^T b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

Die exakte Lösung ist $x_1 = x_2 = \frac{1}{2+\varepsilon^2} \approx \frac{1}{2}$

In Gleitkommaarithmetik ist $A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ singulär

Die QR-Zerlegung mit Householder (in Gleitkommaarithmetik) liefert das exakte Ergebnis: $\alpha_1 = 1$, $v_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ \varepsilon \\ 0 \end{bmatrix}$, $R = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 0 & \sqrt{2}\varepsilon \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, $Q^T b = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon \end{bmatrix}$

Alg. 1: Lösung von $A^T A x = A^T b$ $\text{cond}_2(A^T A) = \text{cond}_2(A)^2 \geq \text{cond}_2(A) = \frac{\max_y \|Ay\|}{\min_z \|Az\|}$ Der abschließende Bruch funktioniert auch für nicht inv. Matrizen.

Alg. 2: Lösung von $\tilde{R}x = c$, $\text{cond}_2(\tilde{R}) = \text{cond}_2(R) = \text{cond}_2(A)$

IV Nichtlineare Gleichungssysteme

Problemstellung:

Zu einer Funktion $f : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, U offen, suche $x \in U$ mit $f(x) = 0$,

$$\text{d.h. } \begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}.$$

Eventuell ex. keine Lösungen

$$f(x) = e^x$$

oder es ex. mehrere Lösungen

$$f(x) = x^2 - 1 \quad \text{oder} \quad f(x) = \tan(x) - x$$

Erinnerung/Wiederholung:

Definition:

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ abgeschlossen. Eine Abbildung $\Phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ heißt kontrahierend, falls

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \Theta \|x - y\| \quad \text{für } \Theta \in (0, 1) \text{ und alle } x, y \in \Omega.$$

Eine Abbildung heißt Selbstabbildung, falls $\Phi(x) \in \Omega$ für alle $x \in \Omega$.

Satz: (Spezialfall von BFS)

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ abgeschlossen, $\Phi : \Omega \rightarrow \Omega$ eine kontrahierende Selbstabbildung. Dann gilt:

- i) Es existiert ein Fixpunkt X^* von Φ , d.h. $\Phi(X^*) = X^*$
- ii) Für alle $x^{(0)} \in \Omega$ konvergiert die Folge $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ definiert durch $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$ gegen x^* mit

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq L \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \quad \text{und} \quad (\text{a priori Schranke})$$

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{L^k}{1-L} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \quad \text{für ein } L < 1 \quad (\text{a posteriori Schranke})$$

Beweis. Ana II

□

Bemerkung:

$$f(x) \stackrel{!}{=} 0$$

Kann man das nichtlineare Gleichungssystem $f(x) = 0$ in eine äquivalente Fixpunktgleichung umwandeln?

$$x = \Phi(x)$$

Mit Hilfe der Fixpunktgleichung konstruiert man eine Folge $(x_n)_n$ ausgehend von x_0 durch $x_{n+1} = \Phi(x_n)$, die hoffentlich gegen x^* mit $x^* = \Phi(x^*)$ konvergiert.

Beispiel:

$$f(x) = 2x - \tan(x) \stackrel{!}{=} 0$$

Fixpunktgleichungen:

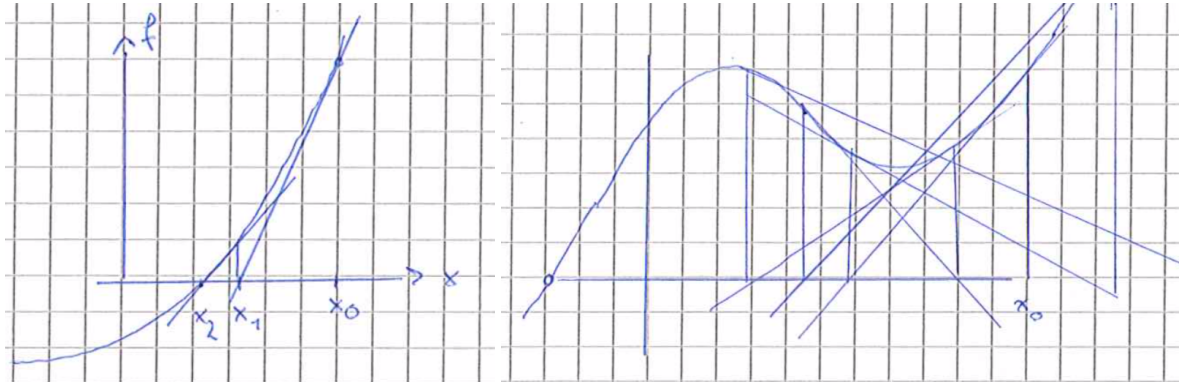
$$x = \frac{1}{2} \tan(x) \Rightarrow \Phi_1(x) = \frac{1}{2} \tan(x)$$

$$x = \arctan(2x) \Rightarrow \Phi_2(x) = \arctan(2x)$$

$$\begin{pmatrix} 2x - \tan(x) - x = -x \\ x = \tan(x) - x \end{pmatrix}$$

24 Newton-Verfahren

24.1 (Illustration)



Startwert x_0 , x_1 Schnitt der Tangente von f im Punkt $(x_0, f(x_0))$ mit der x-Achse, x_2 Schnitt der Tangente in $(x_1, f(x_1))$ mit x-Achse, usw.

24.2 (Herleitung Newton-Verfahren)

Sei x_0 in der Nähe einer Nullstelle x^* von $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Taylorentwicklung liefert

$$0 = f(x^*) = f(x_0 + (x^* - x_0)) = f(x_0) + f'(x_0)(x^* - x_0) + \mathcal{O}(\|x^* - x_0\|^2)$$

Dabei ist $f'(x_0)$ die Jacobimatrix an der Stelle x_0 .

Näherungsweise gilt damit, falls $f'(x_0)$ invertierbar ist

$$x^* - x_0 \approx -f'(x_0)^{-1}f(x_0)$$

Setze nun

$$x_1 = x_0 - f'(x_0)^{-1}f(x_0)$$

Gewöhnliches Newtonverfahren:

x_0 ist gegeben

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

 Löse $f'(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$ LGS (z.B. mit LR-Zerlegung)

$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$

end for

Satz 24.3

Sei f dreimal stetig differenzierbar, $f(x^*) = 0$, f' invertierbar in einer Umge-

bung von x^* und die Folge $(x_k)_k$ definiert durch das gewöhnliche Newtonverfahren. Dann gilt für den Fehler $e_k = x_k - x^*$

$$e_k = \frac{1}{2} f'(x_k)^{-1} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3)$$

Insbesondere gilt $\|e_{k+1}\| \leq C\|e_k\|^2$, d.h. das Newtonverfahren konvergiert quadratische (Ordnung 2), falls $\|e_k\|$ genügend klein ist.

Dabei ist

$$f''(x)[y, z] = \sum_{k=1}^n z_k \sum_{j=1}^n \frac{\delta^2}{\delta_{x_k} \delta_{x_j}} f(x) y_j \in \mathbb{R}^n$$

Beweis.

$$\begin{aligned} 0 &= f(x^*) = f(x_k - e_k) \\ &\stackrel{\text{Taylor}}{=} f(x_k) - f'(x_k)e_k + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\ &= -f''(x_k)(x_{k+1} + x^* - x_k) - f'(x_k)e_k + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\ &= -f'(x_k)(e_{k+1}) + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\ \Rightarrow e_{k+1} &= \frac{1}{2} f'(x_k)^{-1} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\ \Rightarrow \|e_{k+1}\| &\leq \frac{1}{2} C \|e_k\|^2 \end{aligned}$$

□

Definition 24.4

Eine Folge $(x_k)_k$ konvergiert mit Ordnung p für $p \geq 1$ gegen x^* falls ein $C \geq 0$ existiert mit

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq C \|x_k - x^*\|^p,$$

wobei $C < 1$, falls $p = 1$.

Satz 24.5 (Newton Mysovskii)

$f \in \mathcal{C}^1(D, \mathbb{R}^n)$, $D \subset \mathbb{R}^n$ offene Teilmenge, $f'(x)$ invertierbar für bel. $x \in D$ und es gelte:

- i) $\|\Delta x_0\| \leq \alpha$ (Definition von α)

- ii) $\|f'(x)^{-1}(f'(y) - f'(z))(y - z)\| \leq \omega \|y - z\|^2$ (Definiton von ω) für bel.
 $x, z \in D$ und festes $y \in \overline{xz}$
- iii) $y := \frac{1}{2}\alpha\omega < 1$
- iv) Für $\rho := \frac{\alpha}{1-y}$ ist $B_\rho(x_0) \subset D$

Dann gilt für die Folge der Iteration des Newtonverfahrens $(x_k)_k$:

- $(x_k)_k \subset B_\rho(x_0)$
- $x_k \rightarrow x^*$ für $k \rightarrow \infty$ mit $f(x^*) = 0$, genauer:
- $\|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{\omega}{2} \|x_k - x_{k-1}\|^2$

Hierbei ist \overline{xz} die Strecke zwischen x und z und $B_\rho(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n, \|x - x_0\| < \rho\}$ die offene Kugel um x_0 mit Radius ρ .

Beweis. mühsam □

24.6 (Praktische Durchführung)

x_0 sei gegeben.

for $k = 0, 1, 2, \dots$ **do**

Löse $f'(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$ mit LR-Zerlegung

$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$

if $\|\Delta_k\| \leq \text{TOL}$ or $k \geq k_{\max}$ **then**

x_{k+1} ist die Lösung

Warnung, falls $k \geq k_{\max}$

end if

end for

$\|f(x_k)\| \leq \text{TOL}$ ist **kein** geeignetes Abbruchkriterium. Ersetzt man die nichtlineare Gleichung $f(x) = 0$ durch $\tilde{f}(x) = Af(x) = 0$ für A invertierbare Matrix, so ändern sich die Iterierten nicht.

$$f \mapsto Af \Rightarrow f'(x)^{-1}f(x) \mapsto f'(x)^{-1}A^{-1}Af(x)$$

Man sagt, das Newtonverfahren ist affin invariant. Deswegen sollte sich auch das Abbruchkriterium nicht ändern.

$$\|f(x)\| \mapsto \|Af(x)\| \text{ statt } \|x_k\| \leq \text{TOL} \text{ oft } \|x_k\| \leq \frac{\text{TOL}}{1 - \frac{\|\Delta_k\|}{\|\Delta_k - 1\|}}$$

24.7 (Vereinfachtes Newtonverfahren)

Algorithmus:

```
A ≈ f'(x0) (LR = A)
for k = 0, 1, ... do
  Löse AΔxk = -f(xk) (mit LR von A)
  xk+1 = xk + Δxk
end for
```

Satz 1:

Sei $f \in \mathcal{C}^2(D, \mathbb{R}^n)$, $f(x^*) = 0$ und A invertierbar. Dann gilt für $e_k = x_k - x^*$

$$e_{k+1} = (I - A^{-1}f'(x_k))e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} 0 &= f(x^*) = f(x_k - e_k) \stackrel{\text{Taylor}}{=} f(x_0) - f'(x_k)e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2) \\ f(x_k) &= -A(x_{k+1} - x^* + x^* - x_k) = -A(e_{k+1} - e_k) \\ 0 &= -A(e_{k+1} - e_k) - f'(x_k)e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2) \\ \Rightarrow Ae_{k+1} &= (A - f'(x_k))e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2) \end{aligned}$$

□

Satz 2:

Sei $f \in \mathcal{C}^1(D, \mathbb{R}^n)$, A invertierbar, $x_0 \in D$ mit

- i) $\|\Delta x_0\| \leq \alpha$
- ii) $\|I - A^{-1}f'(x)\| \leq y < 1$ für bel. $x \in D$
- iii) $B_\rho(x_0) \subset D$ mit $\rho = \frac{\alpha}{1-y}$

Dann konvergiert x_k aus dem Algorithmus gegen x^* mit $f(x^*) = 0$
 $\|x_{k+1} - x_k\| \leq y\|x_k - x_{k-1}\|$, d.h. das vereinfachte Newtonverfahren konvergiert lokal linear.

Beweis. Das vereinfachte Newtonverfahren ist Fixpunktiteration zu $\Phi(x) = x - A^{-1}f(x)$

- Φ ist kontrahierend wegen ii)
- Φ ist eine Selbstabbildung

\Rightarrow BFS liefert die Behauptung.

□

V Gewöhnliche Differentialgleichungen

Problem:

Suche Lösung $y : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ der Anfangswertaufgabe

$$\frac{d}{dt}y(t) = y'(t) = f(t, y(t)) \quad \text{für } t \in (t_0, T)$$

d.h. eine Funktion, die die obige Gleichung erfüllt.

$f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}^d$, $\mathcal{U} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ offen, $y(t_0) = y_0$ Anfangswert, $(t_0, y_0) \in \mathcal{U}$.

25 Beispiele für gewöhnliche Differentialgleichungen

Beispiel 25.1 (Harmonischer Oszillator)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p(t) &= -q(t) \\ \frac{d}{dt}q(t) &= p(t)\end{aligned}$$

Dabei ist $\frac{d}{dt}p(t)$ die Änderungsrate zur Zeit t von p ,
 $q(t)$ die Position zur Zeit t und
 $p(t)$ die Geschwindigkeit zur Zeit t .

Beispiel 25.2 (Pendel)

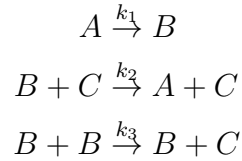
$$\begin{aligned}ms''(t) &= -mg \sin(\phi(t)), \quad s(t) = l\phi(t) \\ \phi''(t) &= -\frac{g}{l} \sin(\phi(t)) \\ y(t) &:= \begin{pmatrix} \phi(t) \\ \phi'(t) \end{pmatrix}, \quad y'(t) = \underbrace{\begin{pmatrix} \phi'(t) \\ -\frac{g}{l} \sin(\phi(t)) \end{pmatrix}}_{=f(t, y(t))}\end{aligned}$$

Dabei ist $\phi(t)$ der Winkel zur Zeit t , $s(t)$ die Position zur Zeit t , l die Länge des Pendels, m die Masse und g die Erdbeschleunigung.

Beispiel 25.3 (Chemische Reaktionen)

Hier möchte man den Verlauf chemischer Reaktionen simulieren. Weiß man

etwa, dass die Substanzen A, B, C gemäß



mit Reaktionskonstanten k_1, k_2, k_3 reagieren, dann liefert das Massenwirkungsgesetz für die Konzentrationen $a(t), b(t), c(t)$ der Substanzen A, B, C zur Zeit t .

$$\begin{aligned} a' &= -k_1 a + k_2 bc \\ b' &= k_1 a - k_2 bc - k_3 b^2 \\ c' &= k_3 b^2 \end{aligned}$$

Zusätzlich müssen Anfangskonzentrationen $a(0), b(0)$ und $c(0)$ gegeben sein.

Beispiel 25.4 (Räuber Beute Modell)

Die Anzahl $y(t)$ von Speisefischen zur Zeit t und die Anzahl $z(t)$ von Raubfischen mit Hilfe des Populationsmodells

$$\begin{aligned} y' &= ay - byz \\ z' &= -cz \end{aligned}$$

berechnet werden.

Hierbei ist a die Geburtenrate der Speisefische, b die Effizienz der Raubfische, c die Sterberate der Raubfische und d die nahrungsabhängige Geburtenrate der Raubfische.

26 Erinnerung an die Theorie gewöhnlicher DGLs

Bemerkung 26.1

Jeder Differentialgleichung k -ter Ordnung

$$y^{(k)} = f(t, y, y', \dots, y^{(k-1)})$$

kann in ein System erster Ordnung umgeschrieben werden:
Mit der Setzung

$$\begin{array}{ll} y_1 = y & y'_1 = y_2 \\ y_2 = y' & y'_2 = y_3 \\ \vdots & \vdots \\ y_{k-1} = y^{(k-2)} & y'_{k-1} = y_k \\ y_k = y^{(k-1)} & y'_k = f(t, y_1, \dots, y_k) \end{array}$$

erhält man für $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}$ das System $Y' = F(t, Y)$, wenn man F durch

$$F(t, Y) = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_k \\ f(t, y_1) \end{bmatrix} \text{ setzt.}$$

Definition 26.2

Hängt die rechte Seite f nicht explizit von t ab, so heißt die Differentialgleichung autonom.

Bemerkung

Jede nichtautonome Differentialgleichung

$$y' = f(t, y) \quad y(t_0) = y_0$$

ist äquivalent zu einem autonomen System

$$Y' = F(Y) \text{ mit } Y = \begin{bmatrix} y \\ t \end{bmatrix} \text{ und } F(Y) = \begin{bmatrix} f(t, y) \\ 1 \end{bmatrix}$$

Bemerkung (Allgemeine Voraussetzungen)

Als nächstes wiederholen wir einige theoretische Resultate zur Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität von Lösungen von Anfangswertproblemen. Dazu sei ab jetzt

- $U \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ offen und zusammenhängend
- $f : U \rightarrow \mathbb{R}^d$ stetig und erfülle folgende lokale Lipschitz-Bedingung:

$$\exists L \forall K \subset U \text{ kompakt } \forall (t, y), (t, z) \in K : \|f(t, y) - f(t, z)\| \leq L\|y - z\|$$

Die lokale Lipschitz-Bedingung ist erfüllt, falls f stetig differenzierbar ist. Dann kann $L = \max_{(t,y) \in K} \|f_y(t, y)\|$ gewählt werden.

Satz 26.3 (Satz von Picard-Lindelöf zur lokalen Existenz und Eindeutigkeit))
Unter obigen Voraussetzungen gilt: Es gibt ein offenes Intervall I mit $t_0 \in I$, sodass genau eine Lösung $y : I \rightarrow \mathbb{R}^d$ existiert, mit

$$y'(t) = f(t, y(t)), \text{ für } t \in I \text{ und } y(t_0) = y_0$$

Diese Lösung kann bis an den Rand von U fortgesetzt werden.

Beweis. Ana II

□

Beispiel 26.4

Die rechte Seite der Differentialgleichung

$$y' = y^2, \quad y(0) = 1, \quad U = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$$

ist lokal Lipschitz-stetig, erfüllt also die Voraussetzungen von Picard-Lindelöf. Die eindeutige Lösung $y(t) = (1 - t)^{-1}$ existiert auf dem offenen Intervall $I = (-\infty, 1)$ und $t_0 = 0 \in I$. Es ist jedoch $\lim_{t \nearrow 1} y(t) = +\infty$.

Für numerische Verfahren ist es wichtig wie sich Störungen der Anfangswerte auf die Lösung auswirken.

Satz 26.5

Zusätzlich zu den allgemeinen Voraussetzungen erfülle für $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ein Skalarprodukt auf \mathbb{C}^d und $\|\cdot\|$ die induzierte Norm die rechte Seite $f : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{C}^d$ für ein l folgende einseitige Lipschitz-Bedingung

$$\Re \langle f(t, y) - f(t, z), y - z \rangle \leq l \|y - z\|^2 \quad \text{für alle } y, z \in U$$

Sind y und z zwei Lösungen von $y' = f(t, y)$ zu verschiedenen Anfangswerten y_0 bzw. z_0 , so gilt

$$\|y(t) - z(t)\| \leq e^{l(t-t_0)} \|y_0 - z_0\| \quad \text{für alle } t \in [t_0, T].$$

Beweis.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\|y(t) - z(t)\|^2 &= 2\Re\langle y'(t) - z'(t), y(t) - z(t) \rangle \\ &= 2\Re\langle f(t, y(t)) - f(t, z(t)), y(t) - z(t) \rangle \\ &\leq 2l\|y(t) - z(t)\|^2\end{aligned}$$

Falls $y(t_0) \neq z(t_0)$ so gilt wegen der Eindeutigkeit der Lösung auch $y(t) \neq z(t)$ für alle t .

Mit

$$\varphi(t) := \|y(t) - z(t)\|^2 \neq 0$$

erhalten wir

$$\frac{\varphi'(t)}{\varphi(t)} = \frac{d}{dt} \log \varphi(t) \leq 2l.$$

Integration ergibt

$$\begin{aligned}\log(\varphi(t)) - \log(\varphi(t_0)) &= \int_{t_0}^t \frac{d}{ds} \log(\varphi(s)) ds \leq \int_{t_0}^t 2l ds = 2l(t - t_0) \\ \Rightarrow \log\left(\frac{\varphi(t)}{\varphi(t_0)}\right) &\leq 2l(t - t_0)\end{aligned}$$

”Exponieren” liefert $\phi(t) \leq e^{2l(t-t_0)}\varphi(t_0)$ □

Bemerkung 26.6

- i) Fehler in den Anfangsdaten können maximal mit dem Faktor $e^{l(t-t_0)}$ verstärkt werden.
- ii) Da f lokal Lipschitz-stetig ist, ist die Voraussetzung des Satzes mit $l = L$ erfüllt. Für das bestmögliche (kleinste) l kann aber $l \ll L$ gelten.
- iii) $l < 0$ ist möglich, hingegen ist immer $L > 0$

Beispiel 26.7 (Testgleichung)

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad y(t_0) = y_0$$

Lösung

$$y(t) = e^{(t-t_0)\lambda} y_0$$

$$l = \Re \lambda, \quad L = |\lambda|$$

- $\Re \lambda < 0$: Fehler werden gedämpft 0, ist asymptotisch stabil
- $\Re \lambda = 0$: keine Fehlerverstärkung
- $\Re \lambda > 0$: Fehler wachsen exponentiell

27 Euler-Verfahren

Einfachstes und ältestes Verfahren zur näherungsweisen Lösung von

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0$$

Idee: Ersetze lokal die (unbekannte) Lösung durch die bekannte Tangente an der Stelle t_0 , so erhält man $y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0)$, usw.

Allgemeine Iterationsvorschrift (explizites Eulerverfahren):

$$t_n = t_0 + nh$$

$$y_i = y_{i-1} + hf(t_{i-1}, y_{i-1}) \text{ für } i \in \mathbb{N}.$$

Ersetzt man lokal die (unbekannte) Lösung durch die Tangente an der ebenfalls unbekannten Stelle (t_1, y_1) , so erhält man $y_1 = y_0 + hf(t_1, y_1)$, usw.

Allgemeine Iterationsvorschrift (implizites Eulerverfahren):

$$t_n = t_0 + nh$$

$$y_i = y_{i-1} + hf(t_i, y_i) \text{ für } i \in \mathbb{N}.$$

Hierbei muss in jedem Schritt ein nicht-lineares Gleichungssystem gelöst werden (etwa mit Newton-Verfahren oder Fixpunktiteration).

Approximationsfehler beim expliziten Eulerverfahren:

Sei $I = [t_0, T]$ ein Intervall und $f : I \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ stetig differenzierbar und (global) Lipschitz-stetig, d.h.:

$$\forall y, z \in \mathbb{R}^d \forall t \in I : \|f(t, y) - f(t, z)\| \leq L\|y - z\|$$

Ist $y : I \rightarrow \mathbb{R}^d$ Lösung des Anfangswertproblems $y' = f(t, y), y(t_0) = y_0$, dann ist y jetzt zweimal stetig differenzierbar, denn

$$y'' = \delta_t f + D_y f \cdot y' = \delta_t f + D_y f \cdot f$$

$D_y f = D_y f(t, y)$ bezeichnet die Ableitung ($d \times d$ Matrix) nach y . Die Folge $(y_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ist mit $t_n = t_0 + nh \in I$ durch das explizite Eulerverfahren definiert.

Satz 27.1 (Fehlerabschätzung für das explizite Eulerverfahren)

Mit den eben gemachten Voraussetzungen gilt für den Fehler des expliziten Euler-Verfahrens

$$\|y_n - y(t_n)\| \leq M \cdot h,$$

mit

$$M = \frac{e^{L(T-t_0)} - 1}{L} \frac{1}{2} \max_{t \in I} \|y''(t)\|$$

Insbesondere gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max_{n \in \mathbb{N}} \|y_n - y(t_n)\| = 0,$$

d.h. die Näherungslösung konvergiert gleichmäßig gegen die exakte Lösung der Anfangswertaufgabe, falls h gegen Null geht.

Beweis. Beweis erfolgt in 3 Schritten:

1) Abschätzung für den lokalen Fehler

Fehler nach einem Schritt des Verfahrens mit Startwert auf der exakten Lösung:

$$\underbrace{y(t_{n+1})}_{\text{exakte Lsg. bei } t_{n+1}} - \underbrace{(y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)))}_{\text{expl. Eulerverfahren mit Startwert } y(t_n)} = y(t_{n+1}) - y(t_n) - hy'(t_n)$$

$$\stackrel{\text{Taylorentwicklung von } y(t_{n+1}) \text{ im } t_n}{=} h^2 \int_0^1 (1-\theta) y''(t_n + \theta h) d\theta$$

$$\Rightarrow \|y(t_{n+1}) - (y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)))\| \leq Ch^2$$

$$\text{für } C = \frac{1}{2} \max_{t \in I} \|y''(t)\|.$$

2) Fehlerfortpflanzung

Ausgehend von Anfangswerten v_n bzw. w_n ergeben sich durch einen Eulerschritt die Näherungen

$$v_{n+1} = v_n + hf(t_n, v_n)$$

$$w_{n+1} = w_n + hf(t_n, w_n)$$

Bildet man die Norm der Differenz, so gilt:

$$\begin{aligned}\|v_{n+1} - w_{n+1}\| &\leq \|v_n - w_n\| + h\|f(t_n, v_n) - f(t_n, w_n)\| \\ &\leq (1 + Lh)\|v_n - w_n\|\end{aligned}$$

3) Fehlerakkumulation

Bezeichne im Folgenden mit y_n^k die Näherung an $y(t_n)$ zum Anfangswert $y(t_k)$ nach $(n - k)$ Schritten.

Dann ist $y_k = y_k^0$ und $y(t_k) = y_k^k$

Nach Schritt 1: $\|y_{k+1}^k - y_{k+1}^{k+1}\| < Ch^2$

Nach Schritt 2: $\|y_m^k - y_m^{k+1}\| \leq (1 + hL)\|y_{m-1}^k - y_{m-1}^{k+1}\|$
induktiv erhält man also:

$$\begin{aligned}\|y_n^k - y_n^{k+1}\| &\leq (1 + hL)\|y_{n-1}^k - y_{n-1}^{k+1}\| \\ &\leq \dots \\ &\leq (1 + hL)^{n-k-1}\|y_{k+1}^k - y_{k+1}^{k+1}\| \\ &\leq (1 + hL)^{n-k-1}Ch^2\end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}\|y_n - y(t_n)\| &= \|y_n^0 - y_n^n\| \\ &\leq \|y_n^0 - y_n^1\| + \|y_n^1 - y_n^2\| + \dots + \|y_n^{n-1} - y_n^n\| \\ &= \sum_{l=1}^n \|y_n^{l-1} - y_n^l\| \\ &\leq Ch^2 \sum_{l=1}^n (1 + hL)^{n-l} \\ &= Ch^2 \frac{(1 + hL)^n - 1}{1 + hL - 1} = Ch \frac{(1 + hL)^n - 1}{L} \\ &\leq Ch \frac{e^{nhL} - 1}{L} \leq Ch \frac{e^{(T-t_0)L} - 1}{L}\end{aligned}$$

Die vorletzte Ungleichung folgt aus $(1 + x) \leq e^x$, die letzte aus $nh \leq T - t_0$.

□

28 Runge-Kutta Verfahren

Ziel: Verfahren höherer Ordnung.

Das (explizite) Eulerverfahren hatte nur Ordnung 1. D.h. der Fehler ist aus $\mathcal{O}(h)$ für $h \rightarrow 0$.

Die exakte Lösung y erfüllt für $t_1 = t_0 + h$

$$y(t_1) = y_0 + \int_{t_0}^{t_1} y'(t) dt = y_0 + \int_{t_0}^{t_1} f(t, y(t)) dt$$

Anwendung einer s-stufigen Quadraturformel mit Knoten c_1, \dots, c_s und Gewichten b_1, \dots, b_s ergibt

$$y(t_1) \approx y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, y(t_0 + c_i h))$$

Beispiel 28.1 (Mittelpunktsregel)

Sei $s = 1$, $b_1 = 1$, $c_1 = 1/2$

$$y(t_1) \approx y(t_0) + h f(t_0 + \frac{1}{2}h, y(t_0 + \frac{1}{2}h))$$

Wie berechnet man $y(t_0 + \frac{1}{2}h)$? Zum Beispiel mit einem Schritt des expliziten Eulerverfahrens

$$y(t_0 + \frac{1}{2}h) \approx y(t_0) + \frac{1}{2}h f(t_0, y(t_0))$$

Bemerkung

In der Quadraturformel treten also die Werte der unbekannten Lösung an den Stellen $t_0 + c_i h$ auf.

Zur Approximation von $y(t_0 + c_i h)$ verwenden wir daher erneut die Integraldarstellung der Lösung

$$y(t_0 + c_i h) = y_0 + \int_{t_0}^{t_0 + c_i h} f(t, y(t)) dt$$

und approximieren die Integrale $\int_{t_0}^{t_0 + c_i h} f(t, y(t)) dt$ mit Quadraturformeln mit **denselben** Knoten $t_0 + c_j h$ und Gewichten a_{ij} passend zu $\int_0^{c_i}$

$$y(t_0 + c_i h) \approx y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, y(t_0 + c_j h))$$

Zusammenfassend:

Definition 28.2

Ein Schritt eines Runge-Kutta Verfahrens zur Lösung von $y' = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ ist durch

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i Y'_i$$

$$Y'_i = f(t_0 + c_i h, Y_i), \quad i = 1, \dots, s$$

$$Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Y'_j, \quad i = 1, \dots, s$$

gegeben mit Koeffizienten a_{ij} , b_i und c_i ($i, j = 1, \dots, s$).

Bemerkung

Üblicherweise stellt man ein Runge-Kutta Verfahren in einem sogenannten Butcher Tableau dar:

$$\begin{array}{c|ccc} \vdots & & & \\ c_i & & a_{ij} & \\ \vdots & & & \\ \hline & \dots & b_j & \dots \end{array}$$

Die Y_i 's sind im Allgemeinen Lösungen eines nichtlinearen Gleichungssystems.

Falls $a_{ij} = 0$ für $j \geq i$, können die Y_i 's nacheinander explizit berechnet werden:

```

for  $i = 1, \dots, s$  do
   $Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} Y'_j$ 
   $Y'_i = f(t_0 + c_i h, Y_i)$ 
end for
 $y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i Y'_i$ 

```

Beispiel 28.3 (Explizites Eulerverfahren)

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

$Y_1 = y_0$, $Y'_1 = f(t_0, Y_1)$ und $y_1 = y_0 + hY'_1$. Der lokale Fehler des expliziten Euler-Verfahrens ist aus $\mathcal{O}(h^2)$ (Fraglich, warum der Fehler plötzlich kleiner im Vergleich zur Einleitung des Kapitels geworden ist).

Beispiel 28.4 (Runge-Verfahren 1895)

Mittelpunktsregel + explizites Eulerverfahren

$$y_1 = y_0 + hf(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}f(t_0, y_0))$$

oder

$$\begin{aligned} Y_1 &= y_0, & Y_2 &= y_0 + \frac{h}{2}Y_1' \\ Y_1' &= f(t_0, y_0), & Y_2' &= f(t_0 + \frac{h}{2}, Y_2) \\ y_1 &= y_0 + hY_2' \end{aligned}$$

Butcher Tableau

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

lokaler Fehler (Taylorentwicklung um $y_1 = y_0 + hf(t_0 + \frac{h}{2}f(t_0, y_0))$ um (t_0, y_0))

$$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) + \frac{h^2}{2}(\partial_t f(t_0, y_0) + D_y f(t_0, y_0)f(t_0, y_0)) + \mathcal{O}(h^3)$$

(Taylorentwicklung von $y(t_0 + h)$ um t_0)

$$\begin{aligned} y(t_0 + h) &= y(t_0) + hy'(t_0) + \frac{h^2}{2}y''(t_0) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= y(t_0) + hf(t_0, y_0) + \frac{h^2}{2}(\partial_t f(t_0, y_0) + D_y f(t_0, y_0)f(t_0, y_0)) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Bildet man die Differenz, so erhält man

$$\|y_1 - y(t_0 + h)\| \in \mathcal{O}(h^3)$$

Beispiel 28.5 (Kutta-Verfahren 1901)Simpsonregel mit doppeltem Knoten bei $1/2$

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h(1/6Y_1' + 1/3Y_2' + 1/3Y_3' + 1/6Y_4') \\ Y_1' &= f(t_0, Y_1) & Y_1 &= y_0 \\ Y_2' &= f(t_0 + h/2, Y_2) & Y_2 &= y_0 + h/2f(t_0, Y_1) \\ Y_3' &= f(t_0 + h/2, Y_3) & Y_3 &= y_0 + h/2f(t_0, Y_2) \\ Y_4' &= f(t_0 + h, Y_4) & Y_4 &= y_0 + hf(t_0, Y_3) \end{aligned}$$