Numerik 1

Prof. Schaedle

May 29, 2019

I Numerische Integration

1 Einführung

Problem 1.1.

Gegeben $f:[a,b]\to\mathbb{N}$ 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):

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \lim_{|\Delta| \to \infty} \sum_{j=1}^{n} f(\xi_{j})(x_{j} - x_{j-1}),$$

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

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

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. $[a,b] \to [x_{j-1},x_j], t \mapsto x_{j-1} + t(x_j - x_{j-1}).$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (b-a)f(x_{i})$$

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

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

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

Achtung: Dieses gewöhnliche MC-Verfahren konvergiert sehr langsam. Verbesserungen sind z.B.: Importance sampling, Control variates, Antithetic variates und statified 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 $\leq p-1$.

$$\mathcal{P} := \left\{ \sum_{i=0}^n a_i X^i, a_i \in \mathbb{R}(\mathbb{C}) \right\},$$
 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, ..., p.

Beweis.

 $"\Rightarrow"$

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

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

" ~ "

Jedes Polynom von Grad p-1 lässt sich als Linearkombination von $1,t,t^2,...,t^{p-1}$. 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 vergebenen paarweise verschiedenen Knoten $c_1, ..., c_s$ lässt sich mit Satz (2.2) für p = s ein lineares Gleichungssystem für die Gewichte $b_1, ..., b_s$ aufstellen.

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

Falls die Vandermonde-Matrix V invertierbar ist, so lassen sich die Gewichte $b_1, ..., b_s$ 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, ..., 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 for 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 $deg(g) \le 2m - 2$ mit $c \ne 0$.

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 $c_1 < c_2 < ... < c_s$ $(c_i \in \mathbb{R}, i = 1, ...s)$ gegeben, so existieren eindeutig bestimmte Gewichte $b_1, ..., b_s$ derart, dass die QF $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ die maximale Ordnung $p \ge s$ 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 $c_i,...c_s$ definiere b_i wie angegeben. Die QF ist dann exakt für alle Polynome von Grad $\leq s-1$, da die $l_1,...,l_s$ 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 $c_1,...,c_s$. 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, ..., s

3 Quadraturfehler

Allgemeine Voraussetzung: $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ 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
$$h_{j+1} = x_{j+1} - x_j$$

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

$$= \sum_{j=0}^{n-1} h_{j+1} \int_0^1 g_j(\xi) d\xi - h_{j+1} \sum_{i=1}^s b_i g_j(c_i)$$

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

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

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

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 $f(x_0 + c_i h)$:

$$E(f, x_0, h) = \sum_{k \ge 0} \frac{h^{k+1}}{k!} \left(\int_0^1 t^k dt - \sum_{i=1}^s b_i c_i^k \right) f^{(k)}(x_0)$$

$$= \frac{h^{p+1}}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) f^{(p)}(x_0) + \underbrace{\mathcal{O}(h^{p+2})}_{Taylor restglied}$$

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 $h^{p+1}Cf^{(p)}(x_0)$ vernachlässigbar ist, so gilt:

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

 $mit x_j = x_0 + jh$

$$\approx Ch^p \sum_{j=0}^{n-1} h f^{(p)}(x_j)$$

$$\approx Ch^p \int_a^b f^{(p)}(x) dx$$

$$= Ch^p \left(f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a) \right)$$

3.3 (Rigorose Fehlerabschätzung).

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

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

wobei der Peanokern $K_k(\tau)$ durch

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

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

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

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 $k \ge 2$ und $\tau \ne c_i$ falls $k = 2$

2.
$$K_k(1) = 0$$
 für $k \ge 1$, falls $c_i \le 1$ für $i = 1, ..., s$

3.
$$K_k(0) = 0$$
 für $k \ge 2$, falls $c_i \le 1$ für $i = 1, ..., s$

- 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:

$$K_{1}(\tau) = \frac{(1-\tau)^{1}}{1!} - 1 \frac{(\frac{1}{2}-\tau)^{1}_{+}}{0!}$$

$$= 1 - \tau - \left(\frac{1}{2} - \tau\right)^{0}_{+}$$

$$= \begin{cases} 1 - \tau - 1 & \tau < \frac{1}{2} \\ 1 - \tau & \tau \ge \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$K_{2}(\tau) = \frac{(1-\tau)^{2}}{2!} - 1\frac{\left(\frac{1}{2} - \tau\right)^{1}_{+}}{1!}$$

$$= \frac{1}{2}(1-\tau)^{2} - \left(\frac{1}{2} - \tau\right)^{1}_{+}$$

$$= \begin{cases} \frac{\tau^{2}}{2} & \tau < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(1-\tau)^{2} & \tau \geq \frac{1}{2} \end{cases}$$

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)

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

Beweis. Mit Satz 1 gilt

$$|E(f, x_j, h_{j+1})| \le h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| |f^{(k)}(x_j + \tau h_{j+1})| d\tau$$

$$\le h_{j+1}^{k+1} \int_0^1 |K_k(\tau)| d\tau \max_{x \in [x_j, x_j + h_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|$$

Zudem gilt

$$|err| = \left| \sum_{j=0}^{n-1} E(f, x_j, h_{j+1}) \right|$$

$$\leq \sum_{j=0}^{n-1} |E(f, x_j, h_{j+1})|$$

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

Damit folgt die Behauptung.

Beispiele

Für die Mittelpunktsregel (maximale Ordnung = 2) erhält man

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

Für die Trapezregel (maximale Ordnung = 2)

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

Für die Simpsonregel (maximale Ordnung = 4)

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

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

4 Quadratur mit hoher Ordnung

Es seien Knoten $c_1 < ... < c_s$ gegeben. Aus §2 wissen wir: Es gibt Gewichte $b_1, ..., b_s$, sodass $p \ge s$. Fragen:

• Kann man c_j so wählen, dass p > s?

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

<u>Ziel:</u> 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.

<u>Idee:</u> 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 $r, deg(r) \le s-1$ und $deg(h) \le m-1$ 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

$$\sum_{i=1}^{s} b_{i}g(c_{i}) = \sum_{i=1}^{s} b_{i} \underbrace{M(c_{i})}_{=0} h(c_{i}) + \sum_{i=1}^{s} b_{i}r(c_{i})$$
$$= 0 + \int_{0}^{1} r(t)dt,$$

 $da p \leq s$

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

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

 $\mbox{\ensuremath{\not|}} \mbox{ zu } \int_0^1 M(t)^2 dt > 0, \, \mathrm{da} \ M(t) \equiv 0$

- 4.3 (Beispiele/Korollare).
 - 1. Jede 3-stufige QF mit Ordnung ≥ 4 muss

$$\int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3)dt = 0$$

$$\Leftrightarrow \int_0^1 t^3 + t^2(-c_1 - c_2 - c_3) + t(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3dt$$

$$= \frac{1}{4} + \frac{1}{3}(-c_1 - c_2 - c_3) + \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_2c_3 + c_1c_3) - c_1c_2c_3 = 0$$

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 $h(t)=1,t,t^2$

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

$$h(t) = 1 \quad \Rightarrow \quad c_1 c_2 c_3 - \frac{1}{2} (c_1 c_2 + c_2 c_3 + c_1 c_3) + \frac{1}{3} (c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{4}$$

$$h(t) = t \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2} c_1 c_2 c_3 - \frac{1}{3} (c_1 c_2 + c_2 c_3 + c_1 c_3) + \frac{1}{4} (c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{5}$$

$$h(t) = t^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{3} c_1 c_2 c_3 - \frac{1}{4} (c_1 c_2 + c_2 c_3 + c_1 c_3) + \frac{1}{5} (c_1 + c_2 + c_3) = \frac{1}{6}$$

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

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

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

$$\sigma_2 = c_1c_2c_3$$

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

$$M(t) = (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) = t^3 - \sigma_1 t^2 + \sigma_2 t - \sigma_3$$

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

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

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

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

 $\underline{\text{Ziel:}}$ 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 $\{1, X, X^2, ..., X^s\}$

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : C([0,1]) \times C([0,1]) \to \mathbb{R}, (f,g) \mapsto \int_0^1 f(t)g(t)dt$$
 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 fsteht 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 $\omega:(a,b)\to\mathbb{R}$ 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

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

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

Diese Polynome lassen sich rekursiv berechnen durch

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

Wobei β und γ definiert sind durch:

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

Beweis. (vgl. Gram-Schmidt Orthogonalisierung LinA) Sei $p_0,...,p_k$ 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_i :

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

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

2.

$$0 = \langle p_{k+1}, p_{k-1} \rangle = \langle x p_k, p_{k-1} \rangle + 0 + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle + 0$$
$$= \langle p_k, x p_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle$$

Aufgrund von 3. \Rightarrow

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

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

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

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

3. Für $j \le k - 2$:

$$0 = \langle p_{k+1}, p_j \rangle = \langle x p_k, p_j \rangle + \alpha_j \langle p_j, p_j \rangle$$
$$= \underbrace{\langle p_k, x p_j \rangle}_{=0} + \alpha_j \underbrace{\langle p_j, p_j \rangle}_{\neq 0}$$

 $\langle p_k, xp_j \rangle = 0$ gilt, da $deg(xp_j) \le k + 1$ 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, ..., 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 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. Seie $x_1, ..., x_r$ 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 $\leq k-1$ $\Rightarrow r = deg(g) \ge k$ $\Rightarrow r = k$

Beispiel 5.5 (Orthogonale Polynome).

Bezeichnung (a,b)

Legendrepolynome

Name

w(x)

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

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 Interval [a, b] eine Approximation an $\int_a^b f(x)dx$ berechnet, sodass der Fehler \leq Tol ist (für viele Funktionen).

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

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

gilt

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

Schwierigkeiten:

- a) Schätzung des Fehlers
- b) 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

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

Gebe res[a, b] zurück.

Ansonsten:

2. Zerlege [a, b] in

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

und

$$I_1 = \left\lceil \frac{b-a}{2}, b \right\rceil$$

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

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

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 + 1Gehe 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.

<u>Idee:</u> 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 $\hat{p} \le s - 1$ (wäre $\hat{p} \ge s$, so wäre nach (2.8) $\hat{b}_i = b_i$).

Eine Approximation des Fehlers für die eingebettete QF ist durch

$$\operatorname{diff}\left[x_{j}, x_{j+1}\right] = h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_{i} f(x_{j} + c_{i} h_{j+1}) - h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} \hat{b}_{i} f(x_{j} + c_{i} h_{j+1})$$
$$= h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} (b_{i} - \hat{b}_{i}) f(x_{j} + c_{i} h_{j+1})$$

gegeben. Es gilt

$$\operatorname{diff}\left[x_{j}, x_{j+1}\right] = h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} b_{i} f(x_{j} + c_{i} h_{j+1}) - \int_{x_{j}}^{x_{j+1}} f(x) dx$$

$$- \left(h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} \hat{b}_{i} f(x_{j} + c_{i} h_{j+1}) - \int_{x_{j}}^{x_{j+1}} f(x) dx\right)$$

$$= \operatorname{Fehler} \operatorname{der} \operatorname{QF}\left(b_{i}, c_{i}\right)_{i=1}^{s} - \operatorname{Fehler} \operatorname{der} \operatorname{QF}\left(\hat{b}_{i}, c_{i}\right)_{i=1}^{s}$$

$$= C_{1} h_{j+1}^{p+1} + C_{2} h_{j+1}^{\hat{p}+1}$$

Falls h_{j+1} klein ist, ist $C_1 h_{j+1}^{p+1} << C_2 h_{j+1}^{\hat{p}+1}$. Drei Möglichkeiten den Fehler zu schätzen:

- I) err $[x_j, x_{j+1}] \approx \text{diff } [x_j, x_{j+1}]$. Sehr pessimistisch
- II) 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

$$(\hat{b}_i, c_i)$$
 der Ordnung 6
zu (b_i, c_i) der Ordnung 30 = 2s, s = 15
und (\hat{b}_i, c_i) der Ordnung 14
diff = $h_{j+1} \sum_{i=1}^{s} (b_i - \hat{b}_i) f(x_j + c_i h_{j+1}) \approx C_3 h^7$

err
$$[x_j, x_{j+1}] = \text{diff } [x_j, x_{j+1}] \left(\frac{\text{diff}}{\hat{\text{diff}}}\right)^2$$

$$= C_2 \frac{C_2^2}{C_3^2} h_{j+1}^{15} \left(\frac{h_{j+1}^{15}}{h_{j+1}^7}\right)^2 = C h_{j+1}^{31}$$

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 (Ubungsaufgabe).

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, \ldots, 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:

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

$$\Phi_n(\lambda) = \begin{bmatrix} P_0 & \dots & P_{n-1} \end{bmatrix}^T$$

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 Integranten 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

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

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

ist

$$P_s(1) = 1$$
 und $P_s(-1) = (-1)^s$

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 $(x_0, y_0), ..., (x_n, y_n)$ berechne Polynom p vom Grad $\leq n$ mit

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

Problemstellung B $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ gegeben. Finde einfach auszuwertende Funktion $p:[a,b] \to \mathbb{R}$, 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 $p(x_2) = y_2$

$$y_{2} \stackrel{!}{=} y_{0} + (x_{2}^{-x_{1}+x_{1}} x_{0}) \frac{y_{1} - y_{0}}{x_{1} - x_{0}} + a(x_{2} - x_{0})(x - x_{1})$$

$$a(x_{2} - x_{0})(x_{2} - x_{1}) = y_{2} - y_{0} - (x_{2} - x_{1}) \frac{y_{1} - y_{0}}{x_{1} - x_{0}} - y_{1} + y_{0}$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{x_{2} - x_{0}} \left(\frac{y_{2} - y_{1}}{x_{2} - x_{1}} - \frac{y_{1} - y_{0}}{x_{1} - x_{0}} \right)$$

Definition 8.2 (dividiente Differenzen).

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

$$\begin{split} y[x_j] &:= y_j \quad \left(=\delta^0 y[x_j]\right) \\ \delta y[x_j, x_{j+1}] &:= \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} = \frac{\delta^0 y[x_{j+1}] - \delta^0 y[x_j]}{x_{j+1} - x_j} \\ \delta^2 y[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] &:= \frac{\delta y[x_{j+1}, x_{j+2}] - \delta y[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j} \\ \delta^k y[x_j, x_{j+1}, ..., x_{j+k}] &:= \frac{1}{x_{j+k} - x_j} \left(\delta^{k-1} y[x_{j+1}, ..., x_{j+k}] - \delta^{k-1} y[x_j, ..., x_{j+k-1}]\right) \end{split}$$

Schema:

Bemerkung 8.3.

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

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

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

Satz 8.4 (Newtonsche Interpolationsformel).

Zu paarweise verschiedenen reellen x_i , i = 0, ..., n, existiert ein eindeutiges Polynom $p \in \mathcal{P}_n$ durch die Punkte (x_i, y_i) , i = 0, ..., n (d.h. $p(x_i) = y_i$ für i = 1, ..., n). Es lässt sich berechnen durch:

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

Beweis. (Induktion)

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

IS $n-1 \rightarrow n$

 $p_0(x) = y[x_0] + (x - x_0)\delta y[x_1, x_0] + ... + (x - x_0)...(x - x_{n-2})\delta^{n-1}y[x_0, ..., x_{n-1}]$ ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

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

zu $(x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_{n-1}, y_{n-1}).$ Für den Ansatz

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

ergibt die Forderung $p(x_n) = y_n$

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

Da a eindeutig ist, ist p eindeutig.

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

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

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

= $x^{n-1}\delta^{n-1} y[x_1, \dots, x_n] + r$

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

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 $deg(p) \le n durch (x_0, y_0), ..., (x_n, y_n).$

Das gilt, da:

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

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

Für i = 1, ..., 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:

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

Koeffizientenvergleich:

$$a = -\frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_0, ..., x_{n-1}] + \frac{1}{x_n - x_0} \delta^{n-1} y[x_1, ..., x_n]$$

= $\delta^n y[x_0, ..., x_n]$

8.5 (Hornerschema).

Zur Auswertung des Interpolationspolynom p an der Stelle x verwendet man

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

Algorithmus:

Beispiel 8.6.

Delapter o.o.						
i	x_i	y_i	$\delta^1 y[x_0, x_1]$	$\delta^2 y[x_0, x_1, x_2]$	$\delta^3 y[x_0,,x_3]$	$\delta^4 y[x_0,,x_4]$
0	-1	0				
		_	$\frac{1-0}{0-(-1)} = 1$	0_1 1		
1	0	1		$\frac{0-1}{2-(-1)} = -\frac{1}{3}$	0 1	
			0		$\frac{\frac{2}{3} - (-\frac{1}{3})}{3 - (-1)} = \frac{1}{4}$	0.1
2	2	1		$\frac{2-0}{3-0} = \frac{2}{3}$		$\frac{-\frac{2}{5} - \frac{1}{4}}{5 - (-1)} = -\frac{13}{120}$
			$\frac{3-1}{3-2} = 2$	0 0 0	$\frac{-\frac{4}{3} - \frac{2}{3}}{5 - 0} = -\frac{2}{5}$	0 (1) 120
3	3	3		$\frac{-2-2}{5-2} = -\frac{4}{3}$	3-0 3	
			$\frac{-1-3}{5-3} = -2$			
$\parallel 4$	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:

$$-\frac{13}{120} * (-2) = \frac{26}{120}$$

$$\left(\frac{1}{4} + \frac{26}{120}\right)(-1) = -\frac{56}{120} = -\frac{7}{15}$$

$$\left(-\frac{7}{15} - \frac{1}{3}\right)1 = -\frac{12}{15} = -\frac{4}{5}$$

$$\left(-\frac{4}{5} + 1\right)2 = \frac{2}{5} = p(1)$$

9 Fehler bei der Polynominterpolation

<u>Problem:</u> $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ werde interpoliert in Stützstellen $x_0,...,x_n \in [a,b]$ durch $p \in \mathcal{P}_n$ mit $p(x_i) = f(x_i)$ für i = 0,...,n. Wie groß ist der Fehler f(x) - p(x)?

Satz 9.1.

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

$$x_0 = 55$$
, $x_1 = 56$, $x_2 = 57$, $x_3 = 58$
Es seien

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

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

 \rightarrow Interpolationspolynom p:

$$log_{10}(65.5) = 1.752048448$$

$$p(56.5) = 1.752048445$$

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

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

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

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

Für $x \in [55, 58]$:

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

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

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

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, ..., n) $y_i := f(x_i)$. Dann existiert $\xi \in (\min_i(x_i), \max_i(x_i))$, sodass

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

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, ..., n.

n-maliges anwenden des Mittelwertsatzes liefert paarweise verschiedene ξ_i , (i = 0, ..., 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 $\eta_0, ..., \eta_{n-2}$ mit $d''(\eta_i) = 0$ für i = 0, ..., n-2.

Wiederhole dies bis:

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

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

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

Bemerkung.

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

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

9.4 (Beweis von (9.1)). Sei $\bar{x} \in [a, b]$ beliebig.

- **1. Fall** $\bar{x} = x_i$ für ein $i \in \{0, ..., n\}$, so ist wegen $p(x_i) f(x_i) = 0$ nichts zu zeigen.
- **2. Fall** $\bar{x} \neq x_i$ für alle $i \in \{0, ..., n\}$. 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

$$\bar{p}(x) = p(x) + \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \delta^{n+1} y[x_0, ..., x_n, \bar{x}]$$

$$\underset{(9.3)}{=} p(x) + \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

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

Fragen:

• Für welche Wahl der Stützstellen x_i (i = 0, ..., 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

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

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

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, ..., 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:

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

Beweis. klar

Beispiel 9.8.

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

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

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

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

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

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

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

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 $x_0, ..., x_n$. 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 $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ in "guten" Stützstellen. Ohne Einschränkungen sei [a,b]=[-1,1]

Definition 10.1.

 $T_n(x) = \cos(n * \arccos(x))$ 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)
$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + r(x) \text{ mit } r_n \in \mathcal{P}_{n-1}$$

iii)
$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

iv)
$$\forall x \in [-1, 1] : |T_n(x)| \le 1$$

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

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

Beweis.

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

iii) $cos((n+1)\phi) + cos((n-1)\phi)$ $= cos(n\phi)cos(\phi) - sin(n\phi)sin(\phi) + cos(n\phi)cos(-\phi) - sin(n\phi)sin(-\phi)$ $= 2\cos(n\phi)\cos(\phi)$

- ii) folgt aus i) und iii)
- iv) klar, da $cos: [-1,1] \to \mathbb{R}$
- v) + vi) ebenfalls klar, da $T_n(cos(\frac{k\pi}{n})) = cos(n\frac{k\pi}{n}) = cos(k\pi) = (-1)^k$ analog: $T_n(cos(\frac{(2k+1)\pi}{2n})) = cos(n\frac{(2k+1)\pi}{2n}) = 0$

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 $\left[\cos(\frac{2\pi}{n}), \cos(\frac{\pi}{n})\right]$ und allgemein in $\left[\cos(\frac{(k+1)\pi}{n}),\cos(\frac{k\pi}{n})\right]$ für k=0,...,n-1. Nullstelle $\Rightarrow q-T_n$ hat n Nullstellen.

Andererseits ist
$$q - T_n \in \mathcal{P}_{n-1} \implies q - T_n \equiv 0 \implies q = T_n \quad \not$$

Satz 10.5.

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

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

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

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

Satz 10.6.

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

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

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

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

Beweis. ohne Beweis.

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

Lemma 10.8.

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

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

Beweis.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Fall 3: $k \neq j$:

Fall 1: k + j ist gerade $\Rightarrow k - j$ ist gerade $\Rightarrow \frac{1}{2} \text{Re} (0 + 0) = 0$

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

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\operatorname{Re}\left(e^{i(k+j)\frac{h}{2}}\frac{-2}{e^{i(k+j)h}-1} + e^{i(k-j)\frac{h}{2}}\frac{-2}{e^{i(k-j)h}-1}\right)$$

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

$$= 0$$

Bemerkung.

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

- i) bilinear
- ii) symmetrisch
- iii) positiv definit $(f, f) = \sum_{l=0}^{n} f(x_l)^2 \ge 0$ $(f, f) = 0 \stackrel{!}{\Rightarrow} f \equiv 0$ $\sum_{l=0}^{n} f(x_l)^2 = 0 \Rightarrow \forall l : f(x_l) = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0, \text{ da deg}(f) \le n$

Satz 10.9.

Sei p das Interpolationspolynom zur Funktion f in den Tschebyscheffknoten x_0, \ldots, 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

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

Beweis. Betrachte (p, T_k)

$$(p, T_k) = \frac{1}{2}(T_0, T_k) + \sum_{l=1}^n c_l(T_l, T_k)$$

$$= \begin{cases} c_k(T_k, T_k) & \text{für } k \neq 0 \\ \frac{1}{2}c_0(T_0, T_0) & \text{für } k = 0 \end{cases}$$

$$\stackrel{(10.8)}{=} \frac{n+1}{2} c_k$$

$$= \frac{n+1}{2} \sum_{l=0}^n f(x_l) T_k(x_l)$$

$$= \frac{n+1}{2} \sum_{l=0}^n f(x_l) \cos \left(\cos \left(\frac{2l+1}{n+1} \frac{\pi}{2} \right) \right)$$

$$= \frac{2l+1}{n+1} \frac{\pi}{2}$$

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

Satz 10.10 (Clenshaw Algorithmus).

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

$$d_k = c_k + 2xd_{k+1} - d_{k+2}$$
, für $k = n, n - 1, ..., 1, 0$

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

$$p(x) = \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n} c_l T_l(x)$$

$$= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-3} c_l T_l(x) + c_{n-2} T_{n-2}(x) + c_{n-1} T_{n-1}(x) + c_n T_n(x)$$

$$= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-3} c_l T_l(x) + (c_{n-2} - \underbrace{c_n}_{=d_n}) T_{n-2}(x) + \underbrace{(c_{n-1} + 2xc_n)}_{=d_{n-1}} T_{n-1}(x)$$

$$= \frac{1}{2}c_0 + \sum_{l=1}^{n-4} c_l T_l(x) + (c_{n-3} - d_{n-1}) T_{n-3}(x) + \underbrace{(c_{n-2} - d_n + 2xd_{n-1})}_{=d_{n-2}} T_{n-2}(x)$$

induktiv erhält man

$$= (\frac{1}{2}c_0 - d_2)\underbrace{T_0(x)}_{=1} + \underbrace{(c_1 - d_3 + 2xd_2)}_{=d_1}\underbrace{T_1(x)}_{=x}$$

$$= \frac{1}{2}(\underbrace{c_0 - 2d_1x - d_2}_{=d_0} - d_2)$$

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

Bemerkung.

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

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

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

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 Clanshaw-Algorithmus mit Fehlern ε_k in der Rekursion, d.h. für

$$\tilde{d}_{n+1} = \tilde{d}_{n+2} = 0$$

$$\tilde{d}_k = c_k + 2x\tilde{d}_{k+1} - \tilde{d}_{k+2} + \varepsilon_k, \quad k = n, n-1, ..., 0$$

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:

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

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:

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

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 $|T_j(x)| \le 1$ 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.

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

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

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

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

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

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

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

$$\Leftrightarrow |\ln(1 + \frac{1+x}{2}) - p(x)| = \frac{1}{4^n} \frac{1}{(n+1)^n}$$

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

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

$$c_0 = 0.75290562...$$

$$c_1 = 0.34...$$

$$c_2 = -0.029...$$

$$c_3 = 0.0036...$$

$$c_4 = -0.00004$$

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

Beobachtung: c_k werden schnell klein.

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

man nur $c_0, ..., c_9$.

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

$$p(x_i) = y_i$$
 und
 $p'(x_i) = y'_i$, für $i = 0, ..., n$.

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

$$x_{0} y_{0} \delta y[x_{0}, x_{0} + \varepsilon] = \frac{(y_{0} + \varepsilon y_{0}') - y_{0}}{(x_{0} + \varepsilon) - x_{0}} = y_{0}'$$

$$x_{0} + \varepsilon y_{0} + \varepsilon y_{0}' \delta y[x_{0} + \varepsilon, x_{1}] \xrightarrow{\varepsilon \to 0} \delta y[x_{0}, x_{1}]$$

$$x_{1} y_{1} \delta y[x_{1}, x_{1} + \varepsilon] = y_{1}'$$

$$x_{1} + \varepsilon y_{1} + \varepsilon y_{1}'$$

Newtonsche Interpolationsformel:

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

damit ist:

$$p_{\varepsilon}(x_i) = y_i$$

$$p_{\varepsilon}(x_i + \varepsilon) = y_i + \varepsilon y_i'$$

$$\Rightarrow y_i' = \frac{p_{\varepsilon}(x_i + \varepsilon) - p_{\varepsilon}(x_i)}{\varepsilon} \underset{MWS}{=} p_{\varepsilon}'(\xi_i), \quad \text{für } \xi_i \in [x_i, x_i + \varepsilon]$$

Für $\varepsilon \to 0$ definieren wir

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

und

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

 $f \ddot{\mathrm{u}} \mathrm{r} \ \xi_{i,\varepsilon} \in [x_i, x_i + \varepsilon]$

Schema:

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, ..., n). p kann mit Hilfe des Newtonschen Differenzenschemas mit doppelten eingeschriebenen Nullstellen (Knoten) berechnet werden.

Satz 11.2 (vgl. Satz (9.1)).

Sei $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ (2n+2)-mal stetig differenzierbar $(f \in \mathcal{C}^{2n+2}([a,b],\mathbb{R}))$, seien $x_0,...,x_n$ 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 $\varepsilon \to 0$ 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 $\xi_{\varepsilon_k} \to \xi$ für $k \to \infty$. \Rightarrow

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

12 Spline-Interpolation

Spline ist engl. für Holz- oder Metallfeder.

Theorie: stammt von Schoenenberg aus dem Jahr 1946

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

- i) $s(x_i) = y_i \ (i = 0, ..., n)$ '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 $h \in \mathcal{C}^1([a,b],\mathbb{R})$, $h(x_i) = 0$ (i =, ..., n) und

$$\begin{split} \int_a^b (s''(x))^2 dx &\overset{!}{\leq} \int_a^b \left((s(x) + \varepsilon h(x))'' \right)^2 dx \\ &= \int_a^b (s''(x) + \varepsilon h''(x))^2 dx \\ &= \int_a^b (s''(x))^2 dx + 2\varepsilon \int_a^b s''(x)h''(x) dx + \underbrace{\varepsilon^2 \int_a^b (h''(x))^2 dx}_{>0} \end{split}$$

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:

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

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

$$\int_{a}^{b} s'''(x)h'(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} h'(x)dx$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} \left(\underbrace{h(x_{i})}_{=0} - \underbrace{h(x_{i-1})}_{=0}\right)$$
$$= 0$$

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

Satz 12.1.

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

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

Falls

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

so gilt:

$$\int_{a}^{b} (s''(x))^{2} dx \le \int_{a}^{b} (f''(x))^{2} dx$$

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

Hermite-Interpolation:

$$s_i(x_i) = y_i$$

 $s_i(x_{i-1}) = y_{i-1}$
 $s'_i(x_i) = \tau_i$
 $s'_i(x_{i-1}) = \tau_{i-1}$

Dabei sind τ unbekannte Steigungen.

Ansatz:

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

Für beliebige $\tau_0, ..., \tau_n$ erhalten wir $s: [a, b] \to \mathbb{R}$ 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 $\tau_0, ..., \tau_n$ so, dass $s \in \mathcal{C}^2([a, b])$, d.h. $s''_i(x_i) = s''_{i+1}(x_i)$ für i = 1, ..., n-1. Das sind (n-1) Bedingungen. (#)

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

Mit

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

gilt wegen

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

und

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

folgendes:

$$s_i''(x_i) = \frac{1}{h_i^2} \left((\tau_i - \delta y[x_{i-1}, x_i]) 4h_i + (\tau_{i-1} - \delta y[x_{i-1}, x_i]) 2h_i \right)$$
$$= \frac{2}{h_i} \left(2\tau_i - 3\delta y[x_{i-1}, x_i] + \tau_{i-1} \right)$$

Ebenso zeigt man:

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

Die Bedingung (#) $s_i''(x_i) = s_{i+1}''(x_i)$ i = 1, ..., 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 $\tau_1, ..., \tau_{n-1}$

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

Satz 12.4.

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

$$\max_{i} |\tau_i| \le \frac{h}{2} \max_{i} |b_i|,$$

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

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

$$2\left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}}\right)\tau_j = -\frac{\tau_{j-1}}{h_j} - \frac{\tau_{j+1}}{h_{j+1}} + b_j$$

$$\Rightarrow 2\left|\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}}\right| \le \left|\frac{\tau_{j-1}}{h_j}\right| + \left|\frac{\tau_{j+1}}{h_{j+1}}\right| + |b_j|$$

$$\le \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}}\right)|\tau_j| + \max_i |b_i|$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}}\right)|\tau_j| \le \max_i |b_i|$$

$$\Rightarrow \max_i |\tau_i| = |\tau_j| \le \frac{h}{2} \max_i |b_i|$$

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, ..., n. Dann gilt für $x \in [a,b]$

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

Beweis. Siehe (13.3)

Lemma 13.2.

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

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

Beweis (für den äquidistanten Fall). Für i=1,...,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

$$f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i)$$

$$+ \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + h^4 \int_0^1 \frac{(1-t)^3}{3!}f^{(4)}(x_i + th)dt$$

$$f'(x_{i+1}) = f'(x_i) + hf''(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i)$$

$$+ h^3 \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2!}f^{(4)}(x_i + th)dt$$

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

$$\delta_{j} = \frac{1}{h} (f'(x_{i}) - hf''(x_{i}) + \frac{h^{2}}{2} f''(x_{i}) + R'_{i-} + 4f'(x_{i}) + f'(x_{i}) + hf''(x_{i}) + \frac{h^{2}}{2} f'''(x_{i}) + R'_{i+})$$

$$- \frac{3}{h^{2}} (f(x_{i}) + hf'(x_{i}) + \frac{h^{2}}{2} f''(x_{i}) + \frac{h^{3}}{3!} f'''(x_{i}) + R_{i+}$$

$$- f(x_{i}) + hf'(x_{i}) - \frac{h^{2}}{2} f''(x_{i}) + \frac{h^{3}}{3!} f'''(x_{i}) + R_{i-})$$

$$= h^{2} \int_{0}^{1} \left(\frac{(1-t)^{2}}{2!} - 3\frac{(1-t)^{3}}{3!} \right) f^{(4)}(x+th) dt$$

$$+ h^{2} \int_{0}^{1} \left(\frac{(1-t)^{2}}{2!} - 3\frac{(1-t)^{3}}{3!} \right) f^{(4)}(x-th) dt$$

$$= h^{2} \left(f^{(4)}(\xi_{i}) + f^{(4)}(\eta_{i}) \right) \int_{0}^{1} \frac{(1-t)^{2}}{2} - \frac{(1-t)^{3}}{2} dt$$

$$= \frac{h^{2}}{24} \left(f^{(4)}(\xi_{i}) + f^{(4)}(\eta_{i}) \right), \quad \xi_{i} \in [x_{i-1}, x_{i}], \ \eta_{i} \in [x_{i}, x_{i+1}]$$

$$\Rightarrow |\delta_{i}| \leq \frac{h^{2}}{12} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

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

$$\max_{i} |e_{i}| \le \frac{h}{2} \max_{i} |\delta_{i}| \le \frac{h^{3}}{24} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

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 $\xi \in [x_{i-1}, x_i]$:

$$|f(x) - p_i(x)| = |(x - x_i)^2 (x - x_{i-1})^2| \left| \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \right|$$

$$\leq \frac{h^4}{16 * 24} |f^{(4)}(\xi)| = \frac{h^4}{384} |f^{(4)}(\xi)|$$

Weiter gilt:

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

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)

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

$$= \frac{h^4}{96} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

Ingesamt gilt also:

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

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

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

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

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

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

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

$$\Rightarrow \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi)$$

Allerdings ist ein Grenzübergang $h \to 0$ 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 $\varepsilon <$ eps (Maschinengenauigkeit) 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:

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

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

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

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

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

 $b_n = \delta^n y[x_0, ..., x_n]$ für k = n - 1, ..., 0.

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

 $p(x) = b_0$

Nach dem Hornerschema.

Berechne nun die Ableitungen:

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

Algorithmus zur Berechnung von p'(x):

$$c_n = b_n$$

for $k = n - 1, ..., 1$ 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 $x_0,...,x_n \in [a,b]$ paarweise verschieden $(p \in \mathcal{P}_n)$.

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

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

Beweisskizze. (vgl. 9.1)

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

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

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

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

Newtonschema und Newtoninterpolationspolynome liefert das Ergebnis. \Box

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: $L_j(t) = \omega(\phi_j)s_j + \omega^{\perp}(\phi_j)t$

$$\omega(\phi_j) = (\cos(\phi_j), \sin(\phi_j))$$

$$\omega^{\perp}(\phi_j) = (-\sin(\phi_j), \cos(\phi_j))$$

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

M ist dabei die Anzahl der Voxel.

 $l_{ij}\colon$ Länge des i-ten Strahl im j-ten Voxel

 α_i : Absorption im j-ten Voxel

 ΔI_i : Intensitätsunterschied entlang vom Strahl i

15.2 (Herleitung des Verfahrens (Wdh. LA)).

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

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\vdots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n$$

Ohne Einschränkungen sei $a_{11} \neq 0$. Da A invertierbar ist, ist mindestens ein Element aus $\{a_{i1}, i=1,...,n\}$ ungleich 0. Man kann also Zeilen/Gleichungen so vertauschen, dass $a_{11} \neq 0$. Für i=2,3,...,n multipliziere die 1-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:

$$a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}$$

$$0 + a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}$$

$$\vdots$$

$$0 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}$$
Dabei ist
$$a_{1j}^{(1)} = a_{1j} \text{ für } j = 1, \dots, n,$$

$$b_1^{(1)} = b_1,$$

$$(a_{i1}^{(1)} = 0)$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j},$$

$$b_i^{(1)} = b_i - l_{i1}b_1 \text{ für } i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n.$$

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 $a_{22}^{(1)} \neq 0$

$$l_{i2} := \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \quad i = 3, ..., n$$

$$b_2^{(2)} = b_2^{(1)}, \quad a_{2j}^{(2)} = a_{2j}^{(1)}, \quad j = 2, ..., n$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i2}b_2^{(1)}, \quad i = 3, ..., n$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i2}a_{2j}^{(1)}, \quad i = 3, ..., n, j = 2, ..., n$$

Damit entsteht eine Folge $(A, b), (A^{(1)}, b^{(1)}), (A^{(2)}, b^{(2)}), ..., (A^{(n-1)}, b^{(n-1)}) =: (R, c)$

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

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

$$r_{11}x_1 + r_{12}x_2 + \dots + r_{1n}x_n = c_1$$

 $r_{22}x_2 + \dots + r_{2n}x_n = c_2$
 \vdots
 $r_{nn}x_n = c_n$

Dabei ist

$$x_n = \frac{c_n}{x_{nn}}$$

 $x_i = \frac{1}{r_{ii}} (c_i - \sum_{j=i+1}^n r_{ij} x_j)$ für $i = n - 1, ..., 1$

Satz 15.3.

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

$$PA = LR$$
.

wobei

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

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

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.
$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
)

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

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

Damit ist

$$A^{(1)} = L_1 A, \quad a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - l_{i1} a_{1j}$$

$$A^{(k)} = L_k A^{(k-1)}, \quad k = 2, ..., n-1$$

$$R = A^{(n-1)} = L_{n-1} L_{n-2} ... L_1 A$$

$$\Rightarrow A = \underbrace{L_1^{-1} ... L_{n-2}^{-1} L_{n-1}^{-1}}_{=L} R$$

Setzt man

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

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

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

d.h.
$$L_i^{-1} = I_n + V_i$$
.
Damit folgt $L = L_1^{-1}L_2^{-1}...L_{n-1}^{-1} = (I_n + V_1)(I_n + V_2)...(I_n + V_{n-1}) = I_n + V_1 + V_2 + ... + V_{n-1} + \underbrace{V_1V_2 + ...}_{=0} = L$

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

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 $i = 2, ..., n$ 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 $A \to A^{(1)}$ 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.

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

:

:
$$A \to L, R: \sum_{j=1}^{n} j^{2} \approx \frac{1}{3} n^{3} \ (\in \mathcal{O}(n^{3})), \ da \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n} (\frac{j}{n})^{2}}_{\approx \int_{0}^{1} x^{2} = \frac{1}{3}} n^{3}$$

Die Lösung von Lc = Pb kostet ebenso wie die Lösung von Rx = c $1 + 2 + ... + (n - 1) \approx \frac{1}{2}n^2$ 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 $\to m$ wird gerundet.
- \bullet 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

- \bullet σ das Vorzeichen
- \bullet 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 $[e_{\min},e_{\max}]=[-128,127]$.

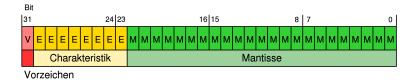


Figure 1: From https://de.wikipedia.org/wiki/IEEE_754

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+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.

$$10^{-4}x_1 + x_2 = 1$$
$$x_1 + x_2 = 2$$

exakte Lösung:

$$x_1 = \frac{1}{0.9999} = 1.0001\overline{0001}$$
$$x_2 = \frac{0.9998}{0.9999} = 0.9998\overline{9998}$$

bei dreistelliger dezimaler Gleitkommaartihmetik (Mantissenlänge 3, Basis 10)

$$0.100 * 10^{-3}x_1 + 0.100 * 10^{1}x_2 = 0.199 * 10^{1}$$
$$0.100 * 10^{1}x_1 + 0.100 * 10^{1}x_2 = 0.200 * 10^{1}$$

und damit erhält man für

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

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = 10^4 = 0.100 * 10^5$$

$$a_{22}^{(1)} = 0.100 * 10^1 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5$$

$$b_2^{(1)} = 0.200 * 101 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5$$

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

b) Wähle Pivot $a_{21} = 1$:

$$x_1 + x_2 = 2$$
$$10^{-4}x_1 + x_2 = 1$$

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

Erläuterung:

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

$$a_{22}^{(1)} = a_{22} - l_{21}a_{12} \approx l_{21}a_{12}$$

$$b_{2}^{(1)} = b_{2} - l_{21}b_{1} \approx l_{21}b_{1}$$

$$x_{2} = \frac{b_{2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \approx \frac{b_{1}}{a_{21}}$$

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

<u>Ausweg:</u> Zeilentausch, sodass $|a_{21}| \le |a_{11}|$. Dann ist $|l_{21}| \le 1$. 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

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

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 $\forall i,j=1,...,n:$ $a_{ij}=a_{ji},$ 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 symmtrisch 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

$$D = \begin{bmatrix} r_1 & 0 \\ \ddots & \\ 0 & r_{nn} \end{bmatrix}, \text{ wobei } \forall i = 1, ..., n : r_{ii} > 0$$

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

$$\begin{bmatrix} a_{11} & z^T \\ \hline z & C \end{bmatrix}$$

wobei $z = (a_{21}, ..., a_{n1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$ 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:

$$0 < \begin{pmatrix} \frac{x_1}{\vdots} \\ y \\ \vdots \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} \frac{x_1}{\vdots} \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x_1}{\vdots} \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \frac{a_{11} | z^T}{z | C} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{x_1}{\vdots} \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} = a_{11}x_1^2 + \underbrace{y^T z x_1 + x_1 z^T y}_{=2x_1 y^T z} + y^T C y$$

Weiter ist:

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

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

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

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, ..., 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, ..., n. Allgemein gilt also

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

wobe
i $r_{ii} = a_{ii}^{(i-1)} > 0$ und $r_{ij} = l_{ij} \ast r_{jj} = r_{jj} \ast l_{ij},$ 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:

$$l_{11}^2 = a_{11} > 0 \implies l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

 $l_{11}l_{i1} = a_{i1} \implies l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}}$

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:

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

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

<u>Choleski-Verfahren:</u>

for
$$k = 1, ..., n$$
 do $l_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2\right)^{1/2}$ for $i = k+1, ..., n$ do $l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} l_{kj}\right) / l_{kk}$ 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 $\|\cdot\|: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, x \mapsto \|x\|$ ist eine Norm auf dem \mathbb{R} - Vektorraum \mathbb{R}^n , falls gilt:

- $i) \ \forall x \in \mathbb{R}^n: \ \|x\| \ge 0$
- 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)
$$||x + y|| \le ||x|| + ||y||$$

Beispiel 18.2.

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

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

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

Definition 18.3.

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

$$||A||_{a\to b} := \sup_{x\notin\mathcal{O}_n, x\in\mathbb{R}^n} \frac{||Ax||_a}{||x||_b}$$

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

Bemerkung 18.4.

Es gilt für die in (18.3) definierte Matrixnorm

- i) $\forall x \in \mathbb{R}^n : ||Ax|| \le ||A|| ||x||$ ||A|| ist die kleinste Zahl mit dieser Eigenschaft
- ii) $\|A\| \geq 0.$ $\|A\| = 0 \Rightarrow \ A = 0$
- iii) $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$
- iv) $||A + B|| \le ||A|| + ||B||$. Damit ist $|| \cdot ||$ tatsächlich eine Norm.
- v) ||I|| = 1 falls m = n, $|| \cdot ||_{\mathbb{R}^m} = || \cdot ||_{\mathbb{R}^n}$
- vi) $||AB|| \le ||A|| \, ||B||$ (Submultiplikativität)