Mitschrift Numerik 1

Prof. Schaedle

June 27, 2019

Inhaltsverzeichnis

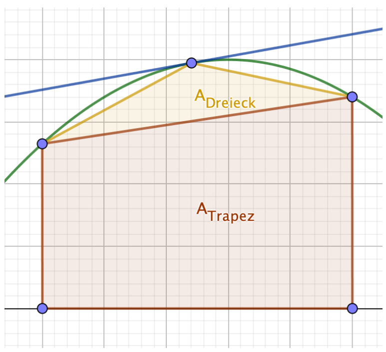
I Numerische Integration

1 Einführung

Problem 1.1.
Gegeben $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ 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):

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

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

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

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. Simpsonregel: $s = 3, b_1 = \frac{1}{6}, b_2 = \frac{2}{3}, b_3 = \frac{1}{6}, c_1 = 0, c_2 = \frac{1}{2}, c_3 = 1$
$$\int_0^1 g(t) \approx \frac{1}{6}\left(g(0) + 4g\left(\frac{1}{2}\right) + g(1)\right)$$
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

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

   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 $\leq p - 1$.

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

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 $q = 1, .., p$.

Beweis.

" $\Rightarrow$ "

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

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

" $\Leftarrow$ "

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

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

$\square$

Beispiel 2.3.

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

$$\begin{aligned} q = 4: &\quad \frac{1}{6} * 0^3 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{1}{6} * 1^3 = \frac{1}{4} \\ q = 5: &\quad \frac{1}{6} * 0^4 + \frac{4}{6} * \left(\frac{1}{2}\right)^4 + \frac{1}{6} * 1^4 = \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5} \end{aligned}$$

   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.

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

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 $deg(g) \leq 2m - 2$ 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 $2m$.

$\square$

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 $p \geq s$ 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 $c_i, ...c_s$ 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 $f(x_0 + c_i h)$:

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

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 $x_j = x_0 + jh$

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

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 $k \leq p$

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

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

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

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. $\square$

Satz 2: (Eigenschaften des Peanokerns)
Für eine QF der Ordnung p gilt für $k \le p$ $(k,p \in \mathbb{N})$

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:

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

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

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)

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

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 $c_1 < ... < c_s$ gegeben. Aus §2 wissen wir:
Es gibt Gewichte $b_1, ..., b_s$, sodass $p \geq s$.
<u>Fragen:</u>

- 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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= c_1 + c_2 + c_3\\
\sigma_2 &= c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3\\
\sigma_3 &= c_1c_2c_3
\end{aligned}$$

   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

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

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 $\{1, X, X^2, ..., X^s\}$

$\langle \cdot, \cdot \rangle : C([0,1]) \times C([0,1]) \to \mathbb{R}, (f, g) \mapsto \int_0^1 f(t)g(t)dt$ 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 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 $\omega : (a, b) \to \mathbb{R}$ 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 $p_0, p_1, ...$ 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 $p_0, ..., p_k$ 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. $0 = \langle p_{k+1}, p_k\rangle = \langle xp_k, p_k\rangle + \alpha_k\langle p_k, p_k\rangle + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \underbrace{\langle p_j, p_k\rangle}_{=0}$

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

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 $j \leq k-2$:

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

$\langle p_k, xp_j \rangle = 0$ 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, $i = 1, ..., s$ 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. 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 $\leq k-1$
$\Rightarrow r = deg(g) \geq k$
$\Rightarrow r = k$ $\square$

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 $\alpha,\beta > -1$
$L_k^{(\alpha)}$	$(0,\infty)$	$x^\alpha e^{-x}$	Laguere-Polynome
M_k	$(-\infty,\infty)$	e^{-x^2}	Harmitepolynome

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

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

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

gilt

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

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

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

gegeben. Es gilt

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

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

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

II) err $[x_j, x_{j+1}] \approx (\operatorname{diff}[x_j, x_{j+1}])^2$, 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

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

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

7 Gauß- und Lobatto Quadraturformeln

<u>Ziel:</u> 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).
<u>Idee:</u> 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:

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

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

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 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

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

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

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 $(x_0, y_0), ..., (x_n, y_n)$ 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 $p(x_2) = y_2$

$$\begin{aligned} y_2 &\overset{!}{=} y_0 + (\overset{-x_1+x_1}{\check{x_2}} - x_0)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a(x_2 - x_0)(x - x_1) \\ a(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) &= y_2 - y_0 - (x_2 - x_1)\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} - y_1 + y_0 \\ \Rightarrow a &= \frac{1}{x_2 - x_0}\left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}\right) \end{aligned}$$

Definition 8.2 (dividierte Differenzen)**.**
Für $(x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen x_j definieren wir

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

Schema:

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

Bemerkung 8.3.
Falls die x_i äquidistant, dh. $x_i = x_0 + ih$ so ist:

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

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, $i = 0, ..., n$, 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:

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

Beweis. (Induktion)

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

IS $n - 1 \to n$

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

ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

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

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

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

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 $(x_0, y_0), ..., (x_n, y_n)$.
Das gilt, da:

$$\begin{aligned} p(x_0) &= p_0(x_0) = y_0 \\ p(x_n) &= p_1(x_n) = y_n \end{aligned}$$

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:

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

Koeffizientenvergleich:

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

$\square$

8.5 (Hornerschema)**.**
Zur Auswertung des Interpolationspolynom p an der Stelle x verwendet man

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

<u>Algorithmus:</u>

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

Beispiel 8.6.

i	x_i	y_i	$\delta^1 y[x_0,x_1]$	$\delta^2 y[x_0,x_1,x_2]$	$\delta^3 y[x_0,..,x_3]$	$\delta^4 y[x_0,..,x_4]$
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:

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

9 Fehler bei der Polynominterpolation

Problem: $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ 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:
$x_0 = 55, \quad x_1 = 56, \quad x_2 = 57, \quad x_3 = 58$
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 $log_{10}(56.5)$

$\rightarrow$ Interpolationspolynom p:

$$\begin{aligned}
log_{10}(65.5) &= 1.752048448 \\
p(56.5) &= 1.75204845 \\
f'(x) &= \frac{1}{ln(10)x} \\
f''(x) &= -\frac{1}{ln(10)x^2} \\
f^{(3)}(x) &= \frac{2}{ln(10)x^3} \\
f^{(4)}(x) &= -\frac{6}{ln(10)x^4}
\end{aligned}$$

Für $x \in [55, 58]$:

$$\begin{aligned}
|f^{(4)}(x)| &\leq \frac{6}{55^4 ln(10)} \Rightarrow \\
|log_{10}(56.5) - p(56.5)| &\leq 1.5 * 0.5 * 0.5 * 1.5 * \frac{6}{55^4 ln(10)\frac{1}{4!}} \\
&\approx 6.7 * 10^{-9}
\end{aligned}$$

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. $\square$

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 $i \in \{0, ..., n\}$, 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

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

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 ($i = 0, ..., n$, 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:

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

Beweis. klar □

Beispiel 9.8.

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

$$\begin{aligned} \Lambda_{10} &\approx 40 \\ \Lambda_{20} &\approx 3 * 10^4 \\ \Lambda_{40} &\approx 10^{10} \\ \Lambda_n &\approx \frac{2^n}{ln(n) * e * n} \quad \text{für } n \to \infty \end{aligned}$$

  $\Rightarrow$ 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:

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

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 $x_0, ..., x_n$. 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

<u>Ziel:</u> 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) $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + r(x)$ mit $r_n \in \mathcal{P}_{n-1}$

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

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

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

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

Beweis.

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

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

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

$T_n(1) = 1$

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

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 $k = 0, ..., n-1$.
Nullstelle $\Rightarrow q - T_n$ hat n Nullstellen.
Andererseits ist $q - T_n \in \mathcal{P}_{n-1} \quad \Rightarrow q - T_n \equiv 0 \quad \Rightarrow q = T_n \quad ↯$ □

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 $x_k = cos\left(\frac{2k+1}{n+1}\frac{\pi}{2}\right), \quad k = 0, ..., n$ (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

$\Lambda_n \leq 3$ für $n \leq 20$

$\Lambda_n \leq 4$ für $n \leq 100$

$\Lambda_n \approx \frac{2}{\pi}log(n)$ 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 $\mathcal{P}_n$)

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

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: $\cos(x) = \mathrm{Re}(e^{ix})$

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

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

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

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

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

Fall 3: $k \neq j$:

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

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

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

$\square$

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

i) bilinear

ii) symmetrisch

iii) positiv definit
$(f, f) = \sum_{l=0}^{n} f(x_l)^2 \geq 0$
$(f, f) = 0 \overset{!}{\Rightarrow} f \equiv 0$
$\sum_{l=0}^{n} f(x_l)^2 = 0 \Rightarrow \forall l:\ f(x_l) = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0$, da $\deg(f) \leq n$

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

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

Beweis. Betrachte (p, T_k)

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

□

$p(x)$ 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 $c_0, ..., c_n$ 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

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

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

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

□

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

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

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:

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

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:

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

□

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 "=" $\underbrace{[1, b_1, b_2, ..., b_M]}_{\text{"Mantisse"}} * 2^N, \quad b_j \in \{0,1\}$
d.h. $x = 2^N(1 + b_1\frac{1}{2} + b_2\frac{1}{4} + ... + b_M\frac{1}{2^M}) = 2^N(1+t), \quad t \in (0,1)$
$\ln(x) = \ln(1+t) + N \underbrace{\ln(2)}_{\text{Konstante}}$
Das Problem $\ln(x)$ zu berechnen ist damit auf das Problem $\ln(1+t)$ für $t \in [0,1]$ zu berechnen reduziert worden.
Tschebyscheffinterpolation: $[-1,1] \to [0,1]$, $x \mapsto t = \frac{1+x}{2} \quad (\Leftrightarrow x = 2t-1)$
Für den Interpolationsfehler gilt:

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

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

Für n=15 ist $\frac{1}{4^n}\frac{1}{(n+1)^n} \leq 10^{-11}$
Berechnet werden also $c_0, ..., c_{15}$ (einmal für alle Zeiten):

$$\begin{aligned} c_0 &= 0.75290562... \\ c_1 &= 0.34... \\ c_2 &= -0.029... \\ c_3 &= 0.0036... \\ c_4 &= -0.00004 \\ |c_k| &\leq 10^{-9}, \quad \text{für } k > 10 \end{aligned}$$

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 $\left(\text{vgl. Taylor } \log(1+t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} t^k\right)$.

11 Hermité-Interpolation

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

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

<u>Idee:</u> Lasse $\varepsilon \to 0$ laufen im Newtonschema:

$$\begin{array}{lll} x_0 & y_0 & \\ & & \delta y[x_0, x_0+\varepsilon] = \frac{(y_0+\varepsilon y_0')-y_0}{(x_0+\varepsilon)-x_0} = y_0' \\ x_0+\varepsilon & y_0+\varepsilon y_0' & \\ & & \delta y[x_0+\varepsilon, x_1] \underset{\varepsilon\to 0}{\to} \delta y[x_0, x_1] \\ x_1 & y_1 & \\ & & \delta y[x_1, x_1+\varepsilon] = y_1' \\ x_1+\varepsilon & y_1+\varepsilon y_1' & \end{array}$$

Newtonsche Interpolationsformel:

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

damit ist:

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

Für $\varepsilon \to 0$ definieren wir

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

und

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

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

Schema:

$$\begin{array}{llllll}
x_0 & y_0 & & & & \\
 & & y_0' & & & \\
x_0 & y_0 & & \delta^2[x_0, x_0, x_1] & & \\
 & & \delta y[x_0, x_1] & & \delta^3[x_0, x_0, x_1, x_1] & \\
x_1 & y_1 & & \delta^2[x_0, x_1, x_1] & & \dots \\
 & & y_1' & & \dots & \\
x_1 & y_1 & & \delta^2[x_1, x_1, x_2] & & \dots \\
 & & \delta y[x_1, x_2] & & \dots & \\
x_2 & y_2 & & \dots & & \\
 & & y_2' & & & \\
x_2 & y_2 & & & &
\end{array}$$

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 $\deg\left(\prod_{i=0}^n (x - x_i)^2\right) = 2n + 2$
$\Rightarrow\ c = 0 \quad \Rightarrow\ q = p$

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 $p'(x_i) = y_i'$ $(i = 0, \ldots, n)$. 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 $k \to \infty$. $\Rightarrow$

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

□

12 Spline-Interpolation

Spline ist engl. für Holz- oder Metallfeder.
Theorie: stammt von Schoenenberg aus dem Jahr 1946
Idee: Suche 'glatte' Funktion s durch vorgegebene Punkte $(x_i, y_i)_{i=0}^n$

i) $s(x_i) = y_i$ $(i = 0, ..., n)$'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 $h \in \mathcal{C}^2([a,b], \mathbb{R})$, $h(x_i) = 0$ $(i = 0, \ldots, n)$ und

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

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

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

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

Satz 12.1.
Seien $f, s \in \mathcal{C}^2([a,b],\mathbb{R})$ zwei Funktionen, die in $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$ dieselben Werte annehmen, d.h.

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

Falls

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

so gilt:

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

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

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

Für beliebige $\tau_0, ..., \tau_n$ erhalten wir $s : [a, b] \to \mathbb{R}$ mit

i) $s\big|_{[x_{i-1}, x_i]} \in \mathcal{P}_3$

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:

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

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

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

Satz 12.4.
Sei A wie in (12.3) und $A\tau = b$, dann gilt

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

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:

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

□

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:
$a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$,
$h_i = x_i - x_{i-1}$,
$h := \max_i |h_i|$

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 $x \in [a,b]$

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

Beweis. Siehe (13.3) □

Lemma 13.2.
Unter den Vorraussetzungen von (13.1) gilt für $s'(x_i) = \tau_i$:

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

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 $f'(x_{i-1})$. $\Rightarrow$

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

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

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

$\square$

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:

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

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)

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

Ingesamt gilt also:

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

□

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

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

<u>Ohne Beweis:</u> 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:

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

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

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

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

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

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 ($p \in \mathcal{P}_n$).
$\forall x \in [a,b]\ \exists \xi, \xi' \in [a,b]$:

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

Beweisskizze. (vgl. 9.1)
Sei x̄ 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. □

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

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

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-ste Zeile). Dann ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

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

Dabei ist
$a_{1j}^{(1)} = a_{1j}$ für $j = 1, ..., n$,
$b_1^{(1)} = b_1$,
$(a_{i1}^{(1)} = 0)$
$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j}$,
$b_i^{(1)} = b_i - l_{i1}b_1$ für $i = 2, ..., n$, $j = 1, ..., n$.

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

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

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 ($r_{ii} \neq 0$)

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

Dabei ist
$x_n = \frac{c_n}{x_{nn}}$
$x_i = \frac{1}{r_{ii}}(c_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij}x_j)$ 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. $P = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{smallmatrix}\right)\Big)$.

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

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

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. $L_i^{-1} = I_n + V_i$.
Damit folgt $L = L_1^{-1} L_2^{-1} ... L_{n-1}^{-1} = (I_n + V_1)(I_n + V_2)...(I_n + V_{n-1}) = I_n + V_1 + V_2 + ... + V_{n-1} + \underbrace{V_1 V_2 + ...}_{=0} = L$
Das schließende L ist dabei das L aus (15.2). $\square$

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

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

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

Beispiele

$$\begin{aligned} &\text{Dezimalsystem } (B = 10) \Rightarrow && \text{eps} = 5 * 10^{-e} \\ &\text{Binärsystem } (B = 2) \quad\; \Rightarrow && \text{eps} = 2^{-e} \end{aligned}$$

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 Gleitkommaartihmetik (Mantissenlänge 3, Basis 10)

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

und damit erhält man für

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

$$\begin{aligned} l_{21} &= \frac{a_{21}}{a_{11}} = 10^4 = 0.100 * 10^5 \\ a_{22}^{(1)} &= 0.100 * 10^1 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5 \\ b_2^{(1)} &= 0.200 * 101 - 0.100 * 10^5 = -0.100 * 10^5 \end{aligned}$$

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

b) Wähle Pivot $a_{21} = 1$:

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

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

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 $x_1 = (b_1 - \underbrace{a_{12} x_2}_{b_1}) : a_{11} \approx 0$

<u>Ausweg:</u> 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

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

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

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

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:

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

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 $\begin{pmatrix} x_1 \\ \hline \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} \neq 0$ gilt:

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

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 $i = 2, ..., n$.
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

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

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:

$$l_{11}^2 = a_{11} > 0 \quad \Rightarrow \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$
$$l_{11} l_{i1} = a_{i1} \quad \Rightarrow \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}}$$

allgemein gilt:

$$a_{kk} = l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + ... + l_{kk-1}^2 + l_{kk}^2$$
$$l_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 \right)^{1/2}$$

und für $i > k$:

$$a_{ik} = l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + ... + l_{ik-1}l_{kk-1} + l_{ik}l_{kk}$$
$$l_{ik} = \frac{\left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}l_{kj} \right)}{l_{kk}}$$

Choleski-Verfahren:

for $k = 1, ..., n$ **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) $\forall x \in \mathbb{R}^n : \ \|x\| \geq 0$

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 $x = (x_1, ..., x_n)^T$

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 $1 \leq p < \infty$

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

Definition 18.3.
Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, d.h. $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 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.
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

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

und

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

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 $\lambda_{\max}$ 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 $f : X \to Y$, 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 $f : X \to Y$ ein Problem. Die **absolute Kondition** von f in $x \in X$ ist

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

Lemma 19.4.
Sei $f : (\mathbb{R}, \|\cdot\|) \to (\mathbb{R}, \|\cdot\|)$ differenzierbar, so gilt

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

Beweis. Übungsaufgabe. □

Definition 19.5 (Relative Kondition)**.**
Seien X, Y normierte Räume, $f : X \to Y$ ein Problem. Die **relative Kondition** von f in $x \in X$ ist

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

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

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

Beispiel 19.6.
Kondition der Addition:

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

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.

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

□

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 $|\varepsilon_j| < eps$.
Es gilt $\operatorname{cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty = 2 * 10^8$. 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 $\frac{1}{1+\varepsilon} = 1 - \varepsilon + \varepsilon^2 - \varepsilon^3 + \varepsilon^4 - ...$ folgt

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

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

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

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

Lemma 20.3.
Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbar. Dann gilt:

i) $\operatorname{cond}(A) \ge 1$

ii) $\forall \alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\} : \operatorname{cond}(\alpha A) = \operatorname{cond}(A)$

iii) $\operatorname{cond}(A) = \frac{\max_{\|y\|=1} \|Ay\|}{\min_{\|x\|=1} \|A^{-1}x\|}$

Beweis. Übungsaufgabe. □

Beispiel 20.4.

1) Matrizen mit kleiner Konditionszahl:

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

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

- Splineinterpolationsmatrix ($h_i = h$)

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

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

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

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 $n \in \{1, ..., 10\}$ 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 $\tilde{f}_k$
$\tilde{f} = \tilde{f}_n \circ \tilde{f}_{n-1} \circ ... \circ \tilde{f}_1, \quad \tilde{f}_k \in \{+, -, *, /, fl, \sqrt{\cdot}, ...\}$

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 $x = 10^4$.

$$\begin{array}{lllllll}
 & & \nearrow & fl(x) & \searrow & & \\
1) & x & & & & fl(x(x-1)) \rightarrow fl(\frac{1}{x(x-1)}) & \\
 & & \searrow & fl(x-1) & \nearrow & &
\end{array}$$

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

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

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

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:

$$\begin{array}{lllll}
 & \overset{\cdot}{\nearrow} & x_1x_2 & \searrow & \\
(x_1, x_2, x_3, x_4) & & & + & x_1x_2 + x_3x_4 \\
 & \underset{\cdot}{\searrow} & x_1x_2 & \nearrow &
\end{array}$$

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

$$\begin{aligned}
\tilde{x}_1 &= x_1(1+\varepsilon_1)(1+\eta_1)(1+\eta_3)\\
\tilde{x}_2 &= x_2(1+\varepsilon_2)(1+\eta_1)(1+\eta_3)\\
\tilde{x}_3 &= x_3(1+\varepsilon_3)(1+\eta_2)(1+\eta_3)\\
\tilde{x}_4 &= x_4(1+\varepsilon_4)(1+\eta_2)(1+\eta_3)
\end{aligned}$$

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 $i,j\in\{1,...,n\}$. 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 $\mu_{ijk}\leq|\hat{a}_{ij}^{(k-1)}||\eta_{ijk}|+|\hat{l}_{ik}||\hat{a}_{kj}^{(k-1)}||\varepsilon_{ijk}|+\mathcal{O}(eps^2)$. $\quad(**)$
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. □

Bemerkung.
Aus dem Satz (21.6) kann man entnehmen, dass die Gaußelimination im Sinne der Rückwärtsanalysis 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

$$R = \underbrace{\left[\begin{array}{c} \tilde{R} \\ \hline 0 \end{array} \right]}_{n} \begin{array}{l} \}n \\ \}m-n \end{array}$$

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) $m > n \to$ 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) $Q^T Q \overset{i)}{=} (I - 2vv^T)(I - 2vv^T) = I - 4vv^T + tv \underbrace{(v^T v)}_{=1} v^T = I$

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

   Da Q_1 orthogonal ist, gilt $\|a_1\|_2{}^2 = \|Q_1 a_1\|_2{}^2 = |\alpha_1|^2$
   $\Rightarrow \quad \alpha_1 = \pm \|a_1\|_2$ (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

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

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

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

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 $\tilde{Q}_2 b_1 = \alpha_2 e_1$ ($e_1 \in \mathbb{R}^{m-1}$).

Für $Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{Q}_2 & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$ ist dann $Q_2 A^{(1)} = \left[\begin{array}{cc|c} \alpha_1 & * & * \\ 0 & \alpha_2 & \\ \hline \vdots & 0 & \\ & \vdots & C \\ 0 & 0 & \end{array}\right]$

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

$$R = \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \alpha_n \\ & & \\ & 0 & \end{bmatrix}}_{n} \begin{matrix} \left.\vphantom{\begin{matrix} a \\ b \\ c \end{matrix}}\right\} & n \\ \left.\vphantom{\begin{matrix} a \\ b \end{matrix}}\right\} & m-n \end{matrix}$$

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 $m >> n\ \rightarrow\ 2m(n + (n-1) + \cdots + 1) \approx mn^2)$

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 rang$(A) = n$ (dann ist $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n \neq 0$, da rang(A) = rang(R))
Falls 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 $\|a_1\|_2, ..., \|a_n\|_2$ 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.
$\Rightarrow \ |\alpha_1| \geq |\alpha_2| \geq ... \geq |\alpha_n| > 0$. Falls rang(A) $= k < n$ erhält man $\alpha_{k+1} = 0$ und

$$\left[\begin{array}{ccc|c} \alpha_1 & & R_1 & \\ & \ddots & & R_2 \\ 0 & & \alpha_k & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right]$$

$AP = QR$ (numerische Rangentscheidung)
falls $\frac{|\alpha_{k+1}|}{|\alpha_1|} < 100eps$ setze Rang$(A) = k$.

23 Lineare Ausgleichsrechnung

Problem 23.1.
Zu gegebenen Messdaten (t_j, y_j) $j = 1, ..., m$ suche $y = f(t)$

$$f(t) = \sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i(t),$$

sodass $y_j \approx f(t_j)$ für $j = 1, ..., m$.
Hierbei sind die $\varphi_1, ..., \varphi_n$ gegebene Funktionen und $x_1, ..., x_n$ unbekannte Parameter, wobei $m >> n$.
Genauer: $\sum_{j=1}^{m}(y_j - f(t_j))^2$ soll minimal werden.

23.2 (Matrix-Vektor Formulierung)**.**

Es sei

$$A = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

$$b = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

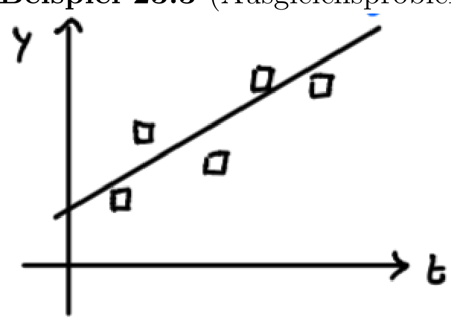
Setze

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

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:

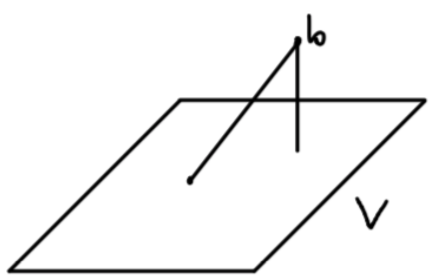
$$Ax = b \quad \Leftrightarrow$$
$$\begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_m & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

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

$\Leftrightarrow y^T A^T Ax - y^T A^T b = 0$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$
$\Leftrightarrow A^T Ax - A^T b = 0$ $\square$

Eigenschaften 23.5.

- $A^T A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv semidefinit $[\forall x \in \mathbb{R}^n : {\|Ax\|_2}^2 = x^T A^T Ax \geq 0]$
- $A^T A$ ist positiv definit $\Leftrightarrow$ Rang$(A) = n$ $[x^T A^T Ax = {\|Ax\|_2}^2 = 0 \Leftrightarrow Ax = 0 \overset{\text{falls Rang}(A)=n}{\Leftrightarrow} x = 0]$

Algorithmus 23.6.

1. Algorithmus

Berechne $A^T A$ ($\frac{1}{2}mn^2$ Operationen)
und $A^T b$ (mn Operationen)
Löse $A^T Ax = A^T b$ 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 ${\|Ax - b\|_2}^2 = {\|QRx - b\|_2}^2 = {\|Rx - Q^T b\|_2}^2 = {\|\tilde{R}x - c\|_2}^2 + {\|d\|_2}^2$ mit $R = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix}$ 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 $Q^T b = Q_n Q_{n-1} ... Q_1 b$ ($2nm$ 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 $A^T A x = A^T b$ $\mathrm{cond}_2(A^T A) = \mathrm{cond}_2(A)^2 \geq \mathrm{cond}_2(A) = \frac{\max_y \|Ay\|}{\min_z \|Az\|}$ Der abschließende Bruch funktioniert auch für nicht inv. Matrizen.

Alg. 2: Lösung von $\tilde{R}x = c$, $\mathrm{cond}_2(\tilde{R}) = \mathrm{cond}_2(R) = \mathrm{cond}_2(A)$

IV Nichtlineare Gleichungssysteme

Problemstellung:
Zu einer Funktion $f : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, U offen, suche $x \in U$ mit $f(x) = 0$, d.h. $\begin{cases} f_1(x_1, ..., x_n) = 0 \\ f_2(x_1, ..., x_n) = 0 \\ \quad\vdots \\ f_n(x_1, ..., x_n) = 0 \end{cases}$.
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 $\Phi : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 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, $\Phi : \Omega \to \Omega$ 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

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq L\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \quad \text{und} \quad \text{(a priori Schranke)}$$

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{L^k}{1-L}\|x^{(1)} - x^{(k)}\| \quad \text{für ein } L < 1 \quad \text{(a posteriori Schranke)}$$

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:

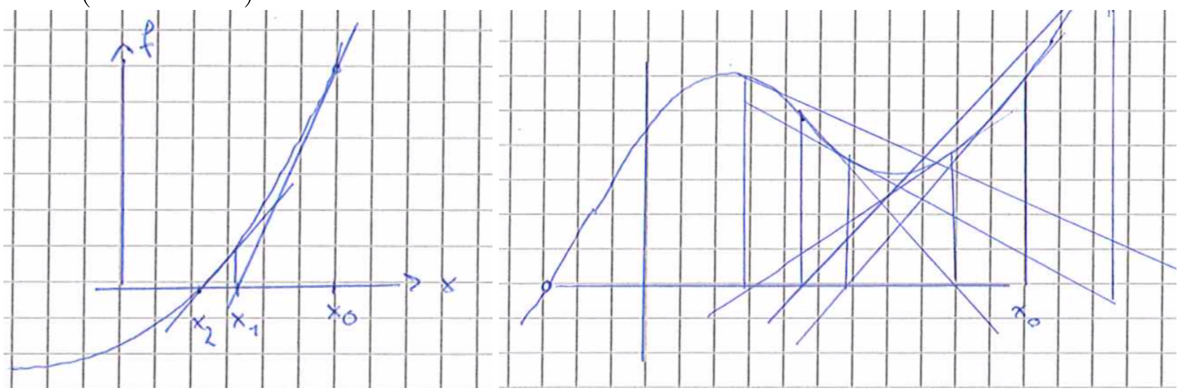
$x = \frac{1}{2}\tan(x) \;\Rightarrow\; \Phi_1(x) = \frac{1}{2}\tan(x)$

$x = \arctan(2x) \;\Rightarrow\; \Phi_2(x) = \arctan(2x)$

$$\begin{pmatrix} 2x - \tan(x) - x = -x \\ x = \tan(x) - x \end{pmatrix}$$

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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. 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

$$x_1 = x_0 - f'(x_0)^{-1} f(x_0)$$

<u>Gewöhnliches Newtonverfahren:</u>

x_0 ist gegeben
for $k = 0, 1, \ldots$ **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.

$$\begin{aligned}
0 &= f(x^*) = f(x_k - e_k) \\
&\overset{\text{Taylor}}{=} f(x_k) - f'(x)_k e_k + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\
&= -f''(x_k)(x_{k+1} + x^* - x^* - x_k) - f'(x_k)e_k + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\
&= -f'(x_k)(e_{k+1}) + \frac{1}{2} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\
\Rightarrow e_{k+1} &= \frac{1}{2} f'(x_k)^{-1} f''(x_k)[e_k, e_k] + \mathcal{O}(\|e_k\|^3) \\
\Rightarrow \|e_{k+1}\| &\leq \frac{1}{2} C\|e_k\|^2
\end{aligned}$$

□

Definition 24.4.
Eine Folge $(x_k)_k$ konvergiert mit Ordnung p für $p \geq 1$ gegen x^* falls ein $C \geq 0$ exisitert 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 $(x_k)_k$:

- $(x_k)_k \subset B_\rho(x_o)$
- $x_k \to x^*$ für $k \to \infty$ 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 $k = 0, 1, 2, ...$ **do**
  Löse $f'(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$ mit LR-Zerlegung
  $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
  if $\|\Delta_k\| \leq$ TOL or $k \geq k_{\max}$ **then**
    x_{k+1} ist die Lösung
    Warnung, falls $k \geq k_{\max}$
  end if
end for

$\|f(x_k)\| \leq$ 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 <u>affin invariant</u>. Deswegen sollte sich auch das Abbruchkriterium nicht ändern.
$\|f(x)\| \mapsto \|af(x)\|$ statt $\|x_k\| \leq$ TOL oft $\|x_k\| \leq \frac{\text{TOL}}{1 - \frac{\|\Delta_k\|}{\|\Delta_{k-1}\|}}$

24.7 (Vereinfachtes Newtonverfahren)**.**

Algorithmus:

$A \approx f'(x_0)$ $(LR = A)$
for $k = 0, 1, ...$ **do**
  Löse $A\Delta x_k = -f(x_k)$ (mit LR von A)
  $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
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.

$$\begin{aligned}
0 = f(x^*) = f(x_k - e_k) &\overset{\text{Taylor}}{=} f(x_0) - f'(x_k)e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2) \\
f(x_k) = -A(x_{k+1} - x^* + x^* - x_k) &= -A(e_{k+1} - e_k) \\
0 &= -A(e_{k+1} - e_k) - f'(x_k)e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2) \\
\Rightarrow Ae_{k+1} &= (A - f'(x_k))e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2)
\end{aligned}$$

□

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 $y : [t_0, T] \to \mathbb{R}^d$ 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.
$f : \mathcal{U} \to \mathbb{R}^d$, $\mathcal{U} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ 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

$$
\begin{aligned}
A &\xrightarrow{k_1} B \\
B + C &\xrightarrow{k_2} A + C \\
B + B &\xrightarrow{k_3} B + C
\end{aligned}
$$

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

$$y^{(k)} = f(t, y, y', ..., y^{(k-1)})$$

kann in ein System erster Ordnung umgeschrieben werden:
Mit der Setzung

$$
\begin{aligned}
y_1 &= y & y_1' &= y_2 \\
y_2 &= y' & y_2' &= y_3 \\
&\vdots & &\vdots \\
y_{k-1} &= y^{(k-2)} & y_{k-1}' &= y_k \\
y_k &= y^{(k-1)} & y_k' &= f(t, y_1, ..., y_k)
\end{aligned}
$$

erhält man für $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}$ das System $Y' = F(t, Y)$, wenn man F durch

$F(t, Y) = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_k \\ f(t, y_1) \end{bmatrix}$ 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 Vorraussetzungen)**.**
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
- $f : U \to \mathbb{R}^d$ stetig und erfülle folgende lokale Libschit-Bedingung:

  $\exists L\, \forall K \subset U$ 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 Vorraussetzungen gilt: Es gibt ein offenes Intervall I mit $t_0 \in I$, sodass genau eine Lösung $y : I \to \mathbb{R}^d$ exisitert, 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 Vorraussetzungen 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 Vorraussetzungen erfülle für $\langle\cdot,\cdot\rangle$ ein Skalarprodukt auf $\mathbb{C}^d$ und $\|\cdot\|$ die induzierte Norm die rechte Seite $f : [t_0, T] \to \mathbb{C}^d$ f 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 $\phi(t) \leq e^{2l(t-t_0)}\varphi(t_0)$ $\square$

Bemerkung 26.6.

i) Fehler in den Anfangsdaten können maximal mit dem Faktor $e^{l(t-t_0)}$ verstärkt werden.

ii) Da f lokal Libschitz-stetig ist, ist die Vorraussetzung des Satzes mit $l = L$ erfüllt. Für das bestmögliche (kleinste) l kann aber $l << L$ 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

$$y(t) = e^{(t-t_0)\lambda} y_0$$

$l = \Re\lambda$, $L = |\lambda|$

- $\Re\lambda < 0$: 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 Iterationsvorschrit (explizites Eulerverfahren):
$t_n = t_0 + nh$
$y_i = y_{i-1} + hf(t_{i-1}, y_{i-1})$ 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.
Allgemein Iterationsvorschrift (implizites Eulerverfahren):
$t_n = t_0 + nh$
$y_i = y_{i-1} + hf(t_i, y_i)$ 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 $f : I \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ stetig differenzierbar und (global) Lipschit-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 $y : I \to \mathbb{R}^d$ 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 Vorraussetzungen 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

$$\lim_{h\to 0} \max_{n\in\mathbb{N}} \|y_n - y(t_n)\| = 0,$$

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:

2) Fehlerfortpflanzung

3) Fehlerakkumulation

1) Abschätzung für den lokalen Fehler
Fehler nach einem Schritt des Verfahrens mit Startwert auf der exakten Lösung:

$$\underbrace{y(t_{n+1})}_{\substack{\text{exakte Lsg.}\\ \text{bei } t_{n+1}}} - \underbrace{(y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)))}_{\substack{\text{expl. Eulerverfahren mit}\\ \text{Startwert } y(t_n)}} = y(t_{n+1}) - y(t_n) - hy'(t_n)$$

$$\overset{\substack{\text{Taylorentwicklung}\\ \text{von } y(t_{n+1}) \text{ im } t_n}}{=} h^2 \int_0^1 (1-\theta) y''(t_n + \theta h) d\theta$$

$\Rightarrow \|y(t_{n+1}) - (y(t_n) + hf(t_n, y(t_n)))\| \leq Ch^2$

für $C = \frac{1}{2} \max_{t\in I} \|y''(t)\|$.

2) Fehlerfortpflanzung

3) Fehlerakkumulation

$\square$