

# Numerik 1

Prof. Schaedle

June 11, 2019

# I Numerische Integration

## 1 Einführung

### Problem 1.1.

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

### Beispiel 1.2.

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



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

2. Leibniz + Newton (1670):

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

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

3. Riemann (1850):

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

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

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

**Bemerkung 1.3** (Approximation von Integralen).

1. (linke) Rechtecksregel:

$$\int_{x_{j-1}}^{x_{j-1}+h} f(x)dx \approx hf(x_{j-1})$$

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

2. Mittelpunktsregel:

$$\int_{x_j}^{x_j+h} f(x)dx \approx f\left(\frac{x_j + x_j + h}{2}\right)h$$

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

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

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

**Definition 1.4** (Quadraturformel).

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

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

**Beispiel 1.5.**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5. "pulcherrima et utilissima regula" von Newton:

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

**Bemerkung 1.6** (Monte-Carlo Integration).

1. Eindimensionale Monte-Carlo Integration:

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

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

Nach dem Gesetz der großen Zahlen konvergiert dieser Ausdruck, falls

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

2. Mehrdimensionale Monte-Carlo Integration:

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

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

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

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

## 2 Ordnung von Quadraturformeln

**Definition 2.1.**

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

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

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

**Satz 2.2.**

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

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

für  $q = 1, \dots, p$ .

*Beweis.*

”  $\Rightarrow$  ”

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

$\Rightarrow$

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

”  $\Leftarrow$  ”

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

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

und

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

□

### Beispiel 2.3.

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

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

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

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

5. ”pulcherina et utilissima”: Übung

**Bemerkung 2.4.**

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

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

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

**Definition 2.5.**

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

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

**Beispiel 2.6** (Symmetrische QF).

Mittelpunktsregel, Trapezregel, Simpsonregel,...

**Satz 2.7.**

Die maximal erreichbare Ordnung einer symmetrischen QF ist gerade.

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

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

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

Wir zeigen QF ist exakt für  $f$ .

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

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

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

1. Für  $\tilde{g}$  ist die QF exakt

2.

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

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

Symmetrie  $\Rightarrow$

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

Definiere  $j := s + 1 - i$

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

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

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

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

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

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

□

**Satz 2.8.**

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

Es gilt

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



mit

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

*Beweis.* von 2.8

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

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

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

□

**Bemerkung** (zu Satz (2.8)).

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

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

### 3 Quadraturfehler

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

**Definition 3.1.**

Der Fehler bei der Approximation des Integrals durch die QF ist

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

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

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

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

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

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

### 3.2 (Fehlerabschätzung - 1. Versuch).

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

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

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

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

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

mit  $x_j = x_0 + jh$

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

### 3.3 (Rigorese Fehlerabschätzung).

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

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

wobei der Peanokern  $K_k(\tau)$  durch

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

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

*Beweis.* Taylorentwicklung mit Integralrestglied und Transformation

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

eingesetzt in (\*) und die Verwendung von

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

liefern

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

da

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

gilt. □

**Satz 2:** (Eigenschaften des Peanokerns)

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

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

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

*Beweis.* Eventuell Übungsaufgabe □

**Beispiel:** Mittelpunktsregel:

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

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

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

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

*Beweis.* Mit Satz 1 gilt

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

Zudem gilt

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

Damit folgt die Behauptung. □

### Beispiele

Für die Mittelpunktsregel (maximale Ordnung = 2) erhält man

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

Für die Trapezregel (maximale Ordnung = 2)

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

Für die Simpsonregel (maximale Ordnung = 4)

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

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

## 4 Quadratur mit hoher Ordnung

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

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

Fragen:

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

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

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

$g$  soll durch die QF exakt integriert werden.

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

$\deg(M) = s$

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

Dann gilt einerseits

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

und andererseits

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

da  $p \leq s$

Damit ist gezeigt:

**Satz 4.1.**

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

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

**Korollar 4.2.**

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

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

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

Setze  $h = M$ , dann ist

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

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

□

### 4.3 (Beispiele/Korollare).

1. Jede 3-stufige QF mit Ordnung  $\geq 4$  muss

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

erfüllen, dh.

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

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

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

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

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

Trick:

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

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

$$\sigma_3 = c_1c_2c_3$$

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

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



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

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

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

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

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

## 5 Orthogonalpolynome

Bedingung 2. in Satz (4.1)

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

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

Erinnerung:

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

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

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

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

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

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

**Satz 5.1.**

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

**Definition 5.2.**

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

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

definieren wir auf den Vektorraum

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

das gewichtete Skalarprodukt

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

für  $f, g \in V$ .

Zudem definiere:

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

**Satz 5.3.**

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

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

Diese Polynome lassen sich rekursiv berechnen durch

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

Wobei  $\beta$  und  $\gamma$  definiert sind durch:

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

*Beweis.* (vgl. Gram-Schmidt Orthogonalisierung LinA)

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

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

(damit ist 3. erfüllt)

Zur Bestimmung der  $\alpha_j$ :

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

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

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  $j \leq k-2$ :

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

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

Insgesamt haben wir

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

□

**Bemerkung.**

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

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

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

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

Klar ist:  $r \leq k$ .

Sei

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

Dann ist

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

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

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

$\Rightarrow r = k$

□

**Beispiel 5.5** (Orthogonale Polynome).

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

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

## 6 Ein adaptives Programm

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

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

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

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

gilt

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

Schwierigkeiten:

- Schätzung des Fehlers
- Wahl der Zerlegung des Intervalls

### 6.1 (Zerlegung des Intervalls).

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

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

und

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

berechnen.

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

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

dann bietet sich folgendes Verfahren zur Konstruktion einer Zerlegung an:

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

Falls

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

Gebe  $res[a, b]$  zurück.

Ansonsten:

2. Zerlege  $[a, b]$  in

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

und

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

und berechne

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

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

n = 2.

3. Falls

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

Gebe

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

zurück. Ansonsten:

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

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

und

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

und berechne:

$res I_l, resabs I_l, err I_l$  und

$res I_m, resabs I_m, err I_m$

$n = n + 1$

Gehe zu 3)

## 6.2 (Schätzung des Fehlers).

Ziel: Berechne Approximation an

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

ohne zusätzliche Funktionsauswertungen.

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

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

Eine Approximation des Fehlers für die eingebettete QF ist durch

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

gegeben. Es gilt

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

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

Drei Möglichkeiten den Fehler zu schätzen:

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

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

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

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

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

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



## 7 Gauß- und Lobatto Quadraturformeln

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

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

### Satz 7.1.

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

### Beispiel.

$s = 1$  Mittelpunktsregel

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

$s = 3$  (4.3) 2)

### 7.2 (Bezeichnung der Knoten der Gauß-QF).

Details: Siehe Homepage (Übungsaufgabe).

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

Zusammengefasst:

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

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

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

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

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

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

### 7.3 (Lobatto Quadraturformeln).

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

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

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

Da die Legendre-Polynome folgende Rekursion erfüllen

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

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

ist

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

und damit

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

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

Damit gilt:

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

## II Interpolation und Approximation

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

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

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

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

## 8 Newtonsche Interpolationsformel

### Beispiel 8.1.

n=1:

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

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

n=2:

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

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

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

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

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

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

**Definition 8.2** (dividierte Differenzen).

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

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

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

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

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

Schema:

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

**Bemerkung 8.3.**

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

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

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

**Satz 8.4** (Newtonsche Interpolationsformel).

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

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

*Beweis.* (Induktion)

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

**IS**  $n - 1 \rightarrow n$

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

ist das eindeutige interpolierende Polynom mit

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

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

Für den Ansatz

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

ergibt die Forderung  $p(x_n) = y_n$

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

Da  $a$  eindeutig ist, ist  $p$  eindeutig.

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

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

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

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

Setze Polynom

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

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

Das gilt, da:

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

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

Für  $i = 1, \dots, n - 1$ :

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

Andererseits:

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

Koeffizientenvergleich:

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

□

### 8.5 (Horner Schema).

Zur Auswertung des Interpolationspolynom  $p$  an der Stelle  $x$  verwendet man

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

Algorithmus:

```

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

```

### Beispiel 8.6.

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

Das Interpolationspolynom ist also

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

bzw. nach Horner Schema

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

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

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

## 9 Fehler bei der Polynominterpolation

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

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

### Satz 9.1.

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

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

*Beweis.* Siehe (9.4)

□

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

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

Wähle Stützstellen:

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

Es seien

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

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

→ Interpolationspolynom  $p$ :

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

$$p(56.5) = 1.75204845$$

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

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

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

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

Für  $x \in [55, 58]$  :

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

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

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

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

**Lemma 9.3.**

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

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

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

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

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

Wiederhole dies bis:

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

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

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



**Bemerkung.**

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

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

**9.4** (Beweis von (9.1)).

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

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

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

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

Fragen:

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

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

minimal? (Siehe Abschnitt 10)

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

**Satz 9.5** (Lagrange Interpolationsformel).

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

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

mit

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

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

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

### Bemerkung.

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

### Definition 9.6.

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

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

Damit gilt:

### Satz 9.7.

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

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

*Beweis.* klar  $\square$

### Beispiel 9.8.

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

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

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

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

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

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

**Satz 9.9.**

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

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

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

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

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

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

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

□

## 10 Tschebyscheff-Interpolation

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

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

**Definition 10.1.**

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

**Lemma 10.2.**

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

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

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

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

*Beweis.*

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

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

ii) folgt aus i) und iii)

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

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

□

### Beispiel 10.3.

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

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

### Lemma 10.4.

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

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

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

$$T_n(1) = 1$$

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

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

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

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

□

**Satz 10.5.**

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

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

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

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

**Satz 10.6.**

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

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

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

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

*Beweis.* ohne Beweis.  $\square$

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

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

**Lemma 10.7.**

Die Tschebyscheffpolynome sind orthogonal, bzgl. des Skalarprodukts

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

*Beweis.* Übungsaufgabe  $\square$

**Lemma 10.8.**

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

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

*Beweis.*

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

für  $h = \frac{\pi}{n+1}$

Damit ist

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

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

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

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

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

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

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

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

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

**Fall 3:**  $k \neq j$ :

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

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

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

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

□

**Bemerkung.**

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

i) bilinear

ii) symmetrisch

iii) positiv definit

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

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

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

**Satz 10.9.**

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

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

wobei

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

*Beweis.* Betrachte  $(p, T_k)$

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

□

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

**Satz 10.10** (Clenshaw Algorithmus).

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

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

gegeben. Setzt man

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



und definiert für  $x$

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

so gilt:

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

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

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

induktiv erhält man

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

□

**Bemerkung.**

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

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

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

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

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

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

**Satz 10.11.**

Für den Clenshaw-Algorithmus mit Fehlern  $\varepsilon_k$  in der Rekursion, d.h. für

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

□

**Bemerkung.**

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

**Beispiel 10.12.**

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

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

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

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

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

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

Für den Interpolationsfehler gilt:

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

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

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

Berechnet werden also  $c_0, \dots, c_{15}$  (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  $c_0, \dots, c_9$ .

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

## 11 Hermité-Interpolation

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

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

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

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

Newtonsche Interpolationsformel:

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

damit ist:

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

Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  definieren wir

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

und

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

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

Schema:

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

Eindeutigkeit:

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

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

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

Damit ist der folgende Satz bewiesen.

**Satz 11.1.**

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

**Satz 11.2** (vgl. Satz (9.1)).

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

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

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

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

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

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

□

## 12 Spline-Interpolation

Spline ist engl. für Holz- oder Metallfeder.

Theorie: stammt von Schoenberg aus dem Jahr 1946

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

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

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

Wir suchen also eine Funktion  $s$ , sodass für  $\varepsilon \in \mathbb{R}$  und  $h \in \mathcal{C}^1([a, b], \mathbb{R})$ ,  $h(x_i) = 0$  ( $i = 0, \dots, n$ ) und

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

Obige Ungleichung ist erfüllt, falls

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

Dabei gilt:

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

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

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

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

**Satz 12.1.**

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

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

Falls

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

so gilt:

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

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

**Bemerkung 12.2.**

Die Bedingung  $(*)$  kann erreicht werden durch

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

**12.3** (Konstruktion des Splines).

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

Hermite-Interpolation:

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



Dabei sind  $\tau$  unbekannte Steigungen.

Ansatz:

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

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

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

Bestimme  $\tau_0, \dots, \tau_n$  so, dass  $s \in \mathcal{C}^2([a, b])$ , d.h.  $s''_i(x_i) = s''_{i+1}(x_i)$  für  $i = 1, \dots, n-1$ . Das sind  $(n-1)$  Bedingungen. (#)

Beim eingespannten Spline sind  $\tau_0$  und  $\tau_n$  bekannt und die  $\tau_1, \dots, \tau_{n-1}$  sind die Unbekannten.

Mit

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

gilt wegen

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

und

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

folgendes:

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

Ebenso zeigt man:

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

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

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

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

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

**Satz 12.4.**

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

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

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

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

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

□

**Korollar 12.5.**

Die Matrix A aus (12.4) ist invertierbar.

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

□

**Korollar 12.6.**

Der eingespannte Spline existiert und ist eindeutig.

*Beweis.* Folgt aus (12.5)

□

## 13 Fehler bei der Splineinterpolation

Vorraussetzungen für diesen Abschnitt:

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

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

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

**Satz 13.1.**

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

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

*Beweis.* Siehe (13.3)

□

**Lemma 13.2.**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

□

### 13.3 (Beweis von (13.1)).

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

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

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

Weiter gilt:

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

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

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

Ingesamt gilt also:

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

□

### Bemerkung.

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

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

Nun gilt:

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

wobei  $l_i(x)$  ein kubischer Spline mit

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

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

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

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

mit der Spline Lebesguekonstante

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

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

## 14 Numerische Differentiation

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$p(x) = b_0$

Nach dem Hornerschema.

Berechne nun die Ableitungen:

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



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

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

---

```

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

```

**Satz 14.1.**

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

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

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

*Beweisskizze.* (vgl. 9.1)

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

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

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

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

Newtonschema und Newtoninterpolationspolynome liefert das Ergebnis.  $\square$

### III Lineare Gleichungssysteme und lineare Ausgleichsrechnung

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

## 15 Gaußelimination

### Beispiel 15.1.

- a) Splineinterpolation  $A\tau = b$ ,  $A$  tridiagonal und symmetrisch.
- b) Computertomographie  
 $\Delta I$ : gemessener Intensitätsunterschied zwischen Quelle und Detektor  
 $\Delta I = \int_{[a,b]} \alpha(x) dx$   
Dabei ist  $\alpha(x)$  der Absorptionskoeffizient  
Annahme:  $\alpha$  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

$\alpha_j$ : Absorption im  $j$ -ten Voxel

$\Delta I_i$ : Intensitätsunterschied entlang vom Strahl  $i$

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

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

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

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

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

Dabei ist

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

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

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

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

Damit entsteht eine Folge

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

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

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

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

Dabei ist

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

**Satz 15.3.**

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

$$PA = LR,$$

wobei

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

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

und  $P$  eine Permutationsmatrix ist.

*Beweis.* Nehme an, dass die notwendige Zeilenvertauschungen bereits durchgeführt wurden, d.h. ersetze  $A$  durch  $PA$  (Zeilen und Spalten von  $P$  bestehen aus

kanonischen Einheitsvektoren z.B.  $P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ )

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

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

Damit ist

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

Setzt man

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

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

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

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

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

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

**Bemerkung.**

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

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

**15.4** (Vorwärts- und Rückwärts-Substitution).

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

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

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

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

und anschließend:

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

**15.5** (Aufwand).

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

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

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

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

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

$\vdots$

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

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

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

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

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

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

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

Durch den Computer kommen folgende Einschränkungen hinzu:

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

### Definition

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

- $\sigma$  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  $(\sigma, m, e)$  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  $[e_{\min}, e_{\max}] = [-128, 127]$ . Der Wert lässt sich berechnen aus

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

Dabei ist  $m$  binär dargestellt.

### Definition

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

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

wobei  $m$  eine Zahl mit  $l$  Stellen ist.

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

## Beispiele

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

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

## 16 Wahl des Pivotelements

### Beispiel 16.1.

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

exakte Lösung:

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

bei dreistelliger dezimaler Gleitkommaarithmetik (Mantissenlänge 3, Basis 10)

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

und damit erhält man für

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

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

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



b) Wähle Pivot  $a_{21} = 1$ :

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

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

### Erläuterung:

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

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

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

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

Spaltenpivotsuche:

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

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

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

Damit erreicht man

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

## 17 Cholesky-Zerlegung für symmetrische positiv definite Matrizen

### Definition 17.1.

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

$a_{ij} = a_{ji}$ , d.h.  $A = A^T$ .

Eine Matrix  $A$  ist positiv definit, falls

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

**Satz 17.2.**

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

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

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

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

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

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

Nun ist

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

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

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

Also ist  $C^{(1)}$  insbesondere spd., da für  $\begin{pmatrix} \frac{x_1}{a_{11}} \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{pmatrix} \neq 0$  gilt:

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

Weiter ist:

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

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

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

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

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

Zeige nun noch ii):

Es gilt

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

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

Außerdem gilt

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

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

Allgemein gilt also

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

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

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

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

**Bemerkung.**

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

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

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

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

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

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

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

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

Nun folgt:

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

allgemein gilt:

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

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

und für  $i > k$ :

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

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

Choleski-Verfahren:

```

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

```

Nun stellen sich folgende zwei Fragen:

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

## 18 Matrixnormen

### Definition 18.1.

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

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

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

**Beispiel 18.2.**

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

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

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

**Definition 18.3.**

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

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

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

**Bemerkung 18.4.**

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

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

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

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

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

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

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

**Satz 18.5.**

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

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

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

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

*Beweis.*

i) + iii) Übungsaufgabe

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

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

und

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

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

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

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

Damit ist

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

$\Rightarrow \|A\|_2 \leq \sqrt{\lambda_{\max}}$  für den größten Eigenwert  $\lambda_{\max}$  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  $f : X \rightarrow Y$ , wobei  $X$  die Eingaben und  $Y$  die Ausgaben enthält.

### Beispiel 19.2.

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

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

### Definition 19.3 (Absolute Kondition).

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

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

### Lemma 19.4.

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

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

*Beweis.* Übungsaufgabe. □

### Definition 19.5 (Relative Kondition).

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

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

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

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



**Beispiel 19.6.**

Kondition der Addition:

$$f : (\mathbb{R}^2, \|\cdot\|_1) \rightarrow (\mathbb{R}, |\cdot|), (a, b) \mapsto a + b$$

$$\kappa_{\text{abs}}(f, (a, b)) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{|\alpha| + |\beta| \leq \delta, z=(\alpha, \beta)} \frac{|a + \alpha + b + \beta - a - b|}{|\alpha| + |\beta|} = 1$$

$$\kappa_{\text{rel}}(f, (a, b)) = \dots = \frac{|a| + |b|}{|a + b|}$$

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

**Definition 19.7.**

Ein Problem heißt **gut konditioniert**, falls  $\kappa_{\text{rel}}$  klein ist ( $< 10^3$ ) und **schlecht konditioniert**, falls  $\kappa_{\text{rel}}$  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  $\tilde{b}_i(1 + \varepsilon_i)$  zur Verfügung. Also  $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ .

**Satz 20.1.**

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

Falls

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

so gilt für die Lösung des LGS:

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

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

*Beweis.*

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

□

**Bemerkung 20.2.**

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

**Beispiel:** Betrachte folgendes Gleichungssystem:

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

Sei des Weiteren  $|\varepsilon_j| < eps$ .

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

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

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

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

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

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

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

**Lemma 20.3.**

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

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

*Beweis.* Übungsaufgabe. □

**Beispiel 20.4.**

1) Matrizen mit kleiner Konditionszahl:

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

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

- Splineinterpolationsmatrix ( $h_i = h$ )

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

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

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

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

2) Matrizen mit großer Konditionszahl:

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

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

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

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

## 21 Stabilität von Verfahren

### Definition 21.1.

Ein Verfahren zur Auswertung eines Problems  $f$  ist die Hintereinander-

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

**Definition 21.2.**

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

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

für eine nicht zu große Konstante  $C$ .

**Beispiel 21.3.**

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

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

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

**Definition 21.4.**

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

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

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

**Beispiel 21.5.**

Zur Berechnung von  $x_1x_2 + x_3x_4$  verwendet man:

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

und erhält unter Berücksichtigung von Rundungsfehlern

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

Das ist das exakte Ergebnis für

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

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

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

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

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

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

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

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

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

für Maschinengenauigkeit  $eps$ .

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

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

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

Nach Definition von  $\hat{A}$  ist

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

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

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

Für  $i \leq j$  erhält man

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

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