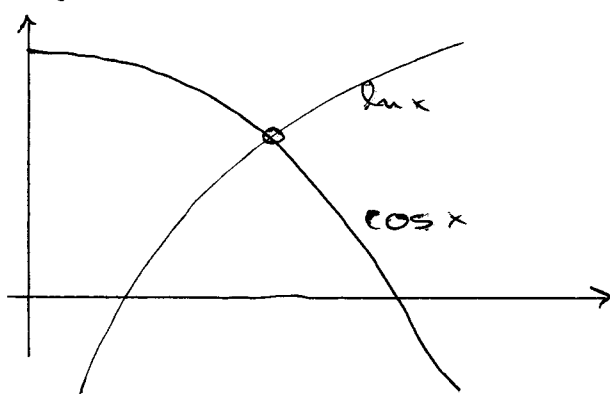


Funktionen und Nullstelle

- Problem :
- Numerische Lösung von $f(x) = 0$
 - 2 Funktionen: $g(x)$, $h(x)$. Wie ist $g(x) = h(x)$ zu lösen
 - Wie ist $x = l(x)$ zu lösen (~~"Fixpunktgl."~~)

Beispiel: $\cos x = \ln x$

graphisch:



Umformung: $f(x) = \cos x - \ln x$
 \Rightarrow äquivalent zu $f(x) = 0$

Umformung „Arccos anwenden“
 \Rightarrow äquivalent zu $x = \arccos(\ln x)$

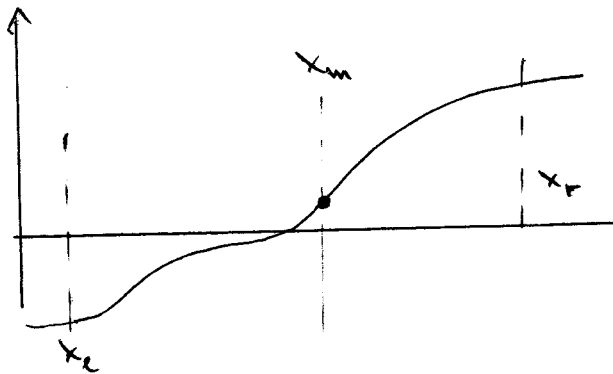
Algorithmus für Fixpunkt:

- Anfangswert, z.B. $x_0 = 1$ $l(x_0) = 1,5708$
- $x_1 = 1,5708$: $l(x_1) = 1,10226$
- ...
- Solange iterieren, bis Wert stabil. In diesen Fall etwa 50 Iterationen

Dieser Algorithmus ist nicht besonders effizient!

Algorithmen für $f(x)=0$

(1) Intervall-Halbierungsmethode (IHM)



Vor.: stetig, zwischen
Schranken muss Nullstelle
liegen

$$x_m = \frac{x_l + x_r}{2}$$

Intervall halbieren, mit dem korrekten Intervall
wiederholen

Vorteile: einfach, konvergiert immer (sicher) vorausgesetzt
Voraussetzungen sind erfüllt

Nachteile: - Anfangsintervallgrenze müssen gut gewählt werden,
sonst ist der Algorithmus sehr langsam
- ? Anfangswerte müssen bekannt sein

Analyse der Effizienz:

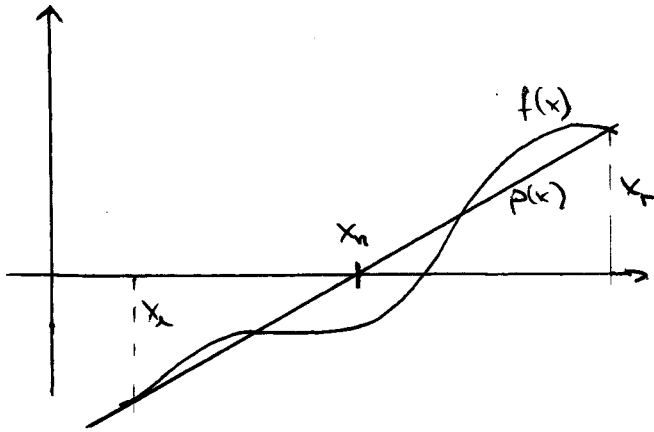
$2^{23} \approx 10 \Rightarrow$ IHM produziert etwa eine Dezimalstelle
pro 3 Iterationen

Fehler ist die Breite des Intervalls ($F_i = x_r^{(i)} - x_l^{(i)}$)

Der Fehler wird bei jedem Schritt halbiert $F_{i+1} = F_i / 2$

\Rightarrow Konvergenzrate ist linear (langsam!)

(2) Regula falsi



$$p(x) = c_1 x + c_2$$

$$p(x_r) = f(x_r)$$

$$p(x_e) = f(x_e)$$

$$p(x) = \frac{x - x_r}{x_e - x_r} f(x_e) + \frac{x - x_e}{x_r - x_e} f(x_r)$$

Ziel: $p(x_n) \stackrel{!}{=} 0$

$$\rightarrow x_n = \frac{x_r f(x_e) - x_e f(x_r)}{f(x_e) - f(x_r)}$$

Vorteil: kann im Vergleich zu IHM schneller konvergieren, muss aber nicht, wenn die Schranken zu weit sind, um eine lineare Näherung der Funktion zu recht-fertigen

Nachteil: ebenfalls zwei Anfangswerte benötigt

Für Fälle, in denen die Regula falsi nicht schnell genug konvergiert (Iterationen zählen) abbrechen und zu IHM zurückgehen

Urheber: Leonardo von Pisa (~1200)

(3) Newton - Raphson - Methode

Taylor - Reihe : $f(x) = f(x_0) + (x-x_0) f'(x_0) + \dots$

$$f(x) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (\text{Fixpunktverfahren})$$

↑ ↑
Näherungswert für die Nullstelle Anfangswert

$$x_{i+1} = L(x_i)$$

Vorteil : relativ schnell , nur ein Anfangswert

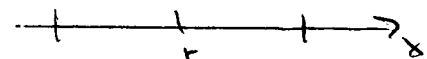
Nachteil : Ableitung muss bekannt sein
Konvergenz nicht garantiert

23.10.06

• Konvergenz :

$$\text{Fixpunkt } r = L(r)$$

$$|x_{i+1} - r| = |L(x_i) - L(r)|$$



Im Intervall um r .

$$|L(x) - L(x')| \leq C |x - x'| \quad , \quad \text{mit } |L'(x)| \leq C$$

$$\begin{aligned} |x_{i+1} - r| &\leq C |x_i - r| \\ &\leq C^{i+1} |x_0 - r| \end{aligned}$$

C ist das max. der Ableitung im Intervall

$$\lim_{i \rightarrow \infty} |x_{i+1} - r| = 0 \quad , \quad \text{wenn } C < 1$$

Konvergenz ist garantiert, wenn $|L'(x)| < 1$ in Intervall

Wenn das Verfahren konvergiert, dann ist die Konvergenz quadratisch (Schnell)

• Konvergenzgeschwindigkeit

Maß für den Fehler: $\varepsilon_i := r - x_i$

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Entwicklung:

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}(x - x_i)^2 f''(x_i)$$

$$f(x) \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow x = r \rightarrow f(x_i) = -\varepsilon_i f'(x_i) - \frac{1}{2} \varepsilon_i^2 f''(x_i)$$

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i - \frac{\varepsilon_i f'(x_i) + \frac{1}{2} \varepsilon_i^2 f''(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$= -\frac{1}{2} \varepsilon_i^2 \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)}$$

quadratische Konvergenz für $\varepsilon_i < 1$ (nahe genug an der Nullstelle). Genauer:

Wenn $\frac{f''}{f'}$ in der Nähe der Nullstelle fast konst. ist, dann ist der Fehler bei einer Iteration proportional zum Quadrat des Fehlers bei vorangegangener Iteration. Konvergenz ist quadratisch.

(4) Sekantenmethode

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

verwende diese Formel für das Newton-Raphson-Verfahren

$$\rightarrow x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

Es wird keine Ableitung mehr benötigt, ansonsten dieselben Vor- und Nachteile wie NR-Verfahren

Kombination zweier Verfahren

Kombination von Halbierungs- und Sekanten-Methode wird als überlegenes Verfahren angesehen

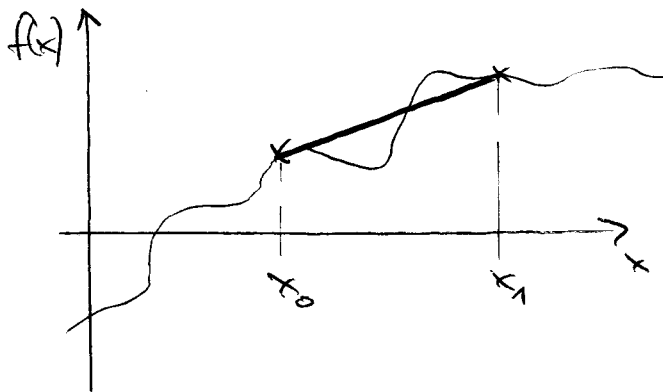
IHM : legt Schranke fest

Wenn Bedingungen für die Konvergenz der Sekanten-Methode gegeben sind:

S-Schritt : immer gemacht wenn der Wert innerhalb der Schranken liegt

Interpolation und approximative Darstellung von Funktionen

Lineare Interpolation



$$x_0 \leq x \leq x_1$$

Gerade Linie durch 2 Punkte : $p(x) = c_1 x + c_2$

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

$$p(x) = \sum_{k=0}^1 p_k^{(1)}(x) f(x_k) \quad ; \quad p_k^{(1)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^1 \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$$

Lagrangesches Interpolationspolynom

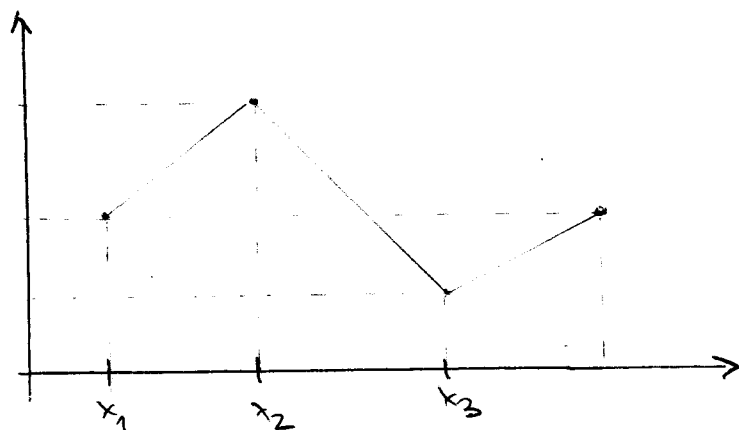
Verallgemeinerung der obigen Methode

Wenn $(n+1)$ Punkte bekannt \rightarrow Polynom der Ordnung n

$$p(x) = \sum_{k=0}^n p_k^{(n)}(x) f(x_k)$$

$$p_k^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$$

kubische Splines



lineare Interpolation:
nicht differenzierbar

⇒ kubische splines:
Näherungsfunktion die
stetige Ableitungen hat

$$x_i \leq x \leq x_{i+1} : p(x) = a_i (x - x_i)^3 + b_i (x - x_i)^2 + c_i (x - x_i) + d_i$$

$$f(x_i) \stackrel{!}{=} p(x_i) = d_i \quad (1) \quad h_i \equiv x_{i+1} - x_i$$

$$f(x_{i+1}) \stackrel{!}{=} p(x_{i+1}) = a_i h_i^3 + b_i h_i^2 + c_i h_i + d_i \quad (2)$$

$$p'(x) = 3a_i (x - x_i)^2 + 2b_i (x - x_i) + c_i$$

$$p''(x) = 6a_i (x - x_i) + 2b_i$$

Notation $p(x_i) = p_i$
 $p'(x_i) = p'_i$

$$p''_i = 2b_i$$

$$p''_{i+1} = 6a_i h_i + 2b_i \rightarrow a_i = \frac{1}{6} \frac{p''_{i+1} - p''_i}{h_i}$$

aus 2:

$$c_i = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{1}{6} (h_i p''_{i+1} + 2h_i p''_i)$$

$$\rightarrow p(x) = p_i + \left[\frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} (p''_{i+1} + 2p''_i) \right] (x - x_i) + \frac{1}{2} p''_i (x - x_i)^2 + \frac{1}{6} \frac{p''_{i+1} - p''_i}{h_i} (x - x_i)^3$$

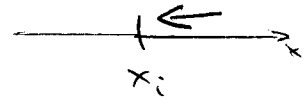
Ableitungen müssen eliminiert werden!

Benutzen: Ableitung soll stetig sein!

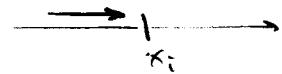
$$p'(x) = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} (p_{i+1}'' + 2 p_i'') + p_i'' (x - x_i) + \frac{1}{2} \frac{p_{i+1}'' - p_i''}{h_i} (x - x_i)^2 \quad (\square)$$

Betrachtung des Limes von rechts und links

$$p_i' = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} (p_{i+1}'' + 2 p_i'') \quad (*)$$



Ersetze $i \rightarrow (i-1)$ in $(*)$



$$x_{i-1} < x < x_i :$$

$$p'(x) = \frac{p_i - p_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{h_{i-1}}{6} (p_i'' + 2 p_{i-1}'') + p_{i-1}'' (x - x_{i-1}) + \frac{1}{2} \frac{p_i'' - p_{i-1}''}{h_{i-1}} (x - x_{i-1})^2$$

$$\rightarrow p_i' = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} + \frac{1}{3} h_{i-1} p_i'' + \frac{1}{6} h_{i-1} p_{i-1}'' \quad (**)$$

$$(*) \stackrel{!}{=} (**)$$

$$h_{i-1} p_{i-1}'' + 2 (h_i + h_{i-1}) p_i'' + h_i p_{i+1}'' = 6 \left(\frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{p_i - p_{i-1}}{h_{i-1}} \right) \quad i=2 \dots (n-1)$$

Insgesamt stehen $(n-2)$ Gleichungen für n unbekannte p_i''
 Es fehlen zwei Gleichungen, Lösung z. B. durch Spezifizierung von p_1' und p_n' (Ableitungen an den Rändern)

31.10.06

Behandlung an den Rändern

$$(*)_{i=1} : 2h_1 p_1'' + h_1 p_2'' = G \frac{p_2 - p_1}{h_1} - G \underline{p_1'}$$

$$(**)_{i=n} : h_{n-1} p_{n-1}'' + 2h_{n-1} p_n'' = -G \frac{p_n - p_{n-1}}{h_{n-1}} + G \underline{p_n'}$$

Dies sind grundsätzlich die beiden noch fehlenden Gleichungen, allerdings müssen p_1' und p_n' vorgegeben werden

Schreibweise in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \begin{matrix} \textcircled{2h_1} \xrightarrow{1} \\ \textcircled{h_1} \xrightarrow{0} \end{matrix} & \begin{matrix} \textcircled{h_1} \xrightarrow{0} \\ 2(h_1+h_2) \\ h_2 \end{matrix} & h_2 & & 0 \\ & & 2(h_2+h_3) & h_3 & \\ & & & \ddots & \\ 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & \begin{matrix} \textcircled{h_{n-1}} \xrightarrow{0} \\ \textcircled{2h_{n-1}} \xrightarrow{1} \end{matrix} & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_1' \\ p_2' \\ \vdots \\ p_n' \end{pmatrix}$$

$$= G \cdot \begin{pmatrix} \frac{p_2 - p_1}{h_1} - \underline{p_1'} \xrightarrow{0} \\ \frac{p_3 - p_2}{h_2} - \frac{p_2 - p_1}{h_1} \\ \vdots \\ \frac{p_n - p_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{p_{n-1} - p_{n-2}}{h_{n-2}} \\ \underline{-\frac{p_n - p_{n-1}}{h_{n-1}} + p_n'} \xrightarrow{0} \end{pmatrix}$$

Wenn die Ableitungen an den Enden nicht bekannt sind:

$$p_1'' = p_n'' = 0 \quad (\text{"natürliche Splines"})$$

→ Näherungsfunktion ist linear an den Grenzen des Intervalls

Führt zu markierten Änderungen in der Matrix

Die Matrixgleichung ist nun zu lösen:

Tridiagonale lineare Systeme

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \\ 0 & & \dots & & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix}$$

Als Gleichungen geschrieben:

$$b_1 x_1 + c_1 x_2 = r_1$$

$$a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = r_2$$

$$a_3 x_2 + b_3 x_3 + c_3 x_4 = r_3$$

...

Einfacher Fall für das Gauß-Jordan-Verfahren

nach einem Schritt:

$$\begin{aligned} b_1 x_1 + c_1 x_2 &= r_1 \\ \underbrace{\left(b_2 - \frac{a_2}{b_1} c_1 \right)}_{\beta_2} x_2 + c_2 x_3 &= \underbrace{r_2 - \frac{a_2}{b_1} r_1}_{e_2} \\ a_3 x_2 + b_3 x_3 + c_3 x_4 &= r_3 \end{aligned}$$

nach zweiten Schritt:

$$\begin{aligned} \beta_1 x_1 + c_1 x_2 &= e_1 \\ \beta_2 x_2 + c_2 x_3 &= e_2 \\ \left(b_3 - \frac{a_3}{\beta_2} c_2 \right) x_3 + c_3 x_4 &= \underbrace{r_3 - \frac{a_3}{\beta_2} e_2}_{= e_3} \end{aligned}$$

... usw.

Allgemein

$$\beta_j = b_j - \frac{a_j}{\beta_{j-1}} c_{j-1}$$

$$e_j = r_j - \frac{a_j}{\beta_{j-1}} e_{j-1} \quad j = 2 \dots n$$

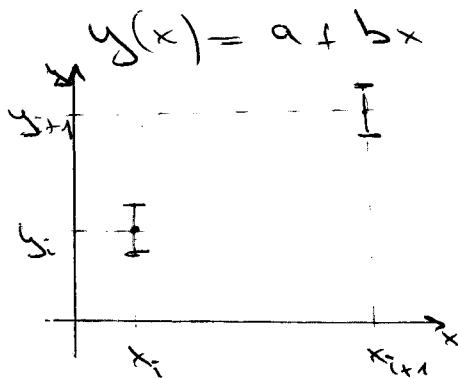
$$x_n = e_n / \beta_n$$

$$x_{n-1} = (e_{n-1} - c_{n-1} x_n) / \beta_{n-1}$$

$$x_{n-j} = (e_{n-j} - c_{n-j} x_{n-j+1}) / \beta_{n-j} \quad j = 1 \dots n-1$$

Least-Square-Fit

• linear Regression



$y \pm \sigma$, σ : Standardabweichung

minimiere: $\bar{\chi}^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - y(x_i)]^2$

$$\frac{\partial \bar{\chi}^2}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\chi}^2}{\partial b} = 0$$

$$\rightarrow -\sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i) = 0$$

$$, \quad \frac{\partial^2 \bar{\chi}^2}{\partial a^2} = \sum_{i=1}^n 2 > 0$$

$$- \sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i)x_i = 0$$

$$, \quad \frac{\partial^2 \bar{\chi}^2}{\partial b^2} = \sum_{i=1}^n 2x_i^2 > 0$$

$$an + b \sum_i x_i = \sum_i y_i$$

$$a \sum_i x_i + b \sum_i x_i^2 = \sum_i y_i x_i$$

wir definieren: $S = \sum_{i=1}^n 1 = n$

$$S_x = \sum_{i=1}^n x_i, \quad S_y = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$\rightarrow aS + bS_x = S_y$$

$$aS_x + bS_{xx} = S_{xy}$$

$$\rightarrow a = \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{S S_{xx} - S_x^2}$$

$$b = \frac{S S_{xy} - S_x S_y}{S S_{xx} - S_x^2}$$

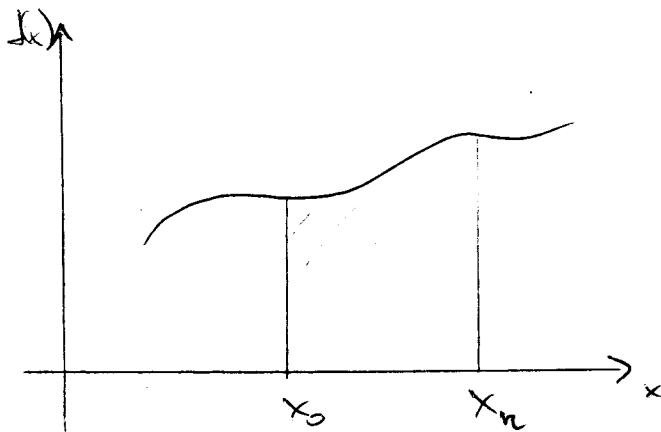
wenn σ nicht konstant ist:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i} \right]^2$$

$$\rightarrow S = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \quad S_x = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2} \quad S_y = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad \text{usw.}$$

Numerische Integration

2.14.06



$$I = \int_{x_0}^{x_n} dx f(x)$$

Strategie: Wähle $n+1$ Stützstellen, werte dort Funktion aus und lege ein Polynom n -ten Grades durch die Funktion (Lagrangesches Interpolationspolynom)
 $f_i = f(x_i)$

$$f(x) \rightarrow p(x) = \sum_k P_k^{(n)}(x) f_k$$

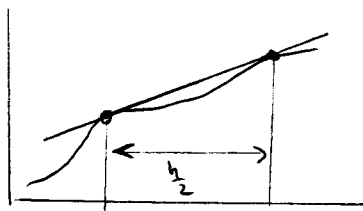
$$I = \int_{x_0}^{x_n} dx p(x) = \sum_{k=0}^n w_k f_k \quad w_k = \int_{x_0}^{x_n} dx P_k^{(n)}(x)$$

Wir nehmen äquidistante Stützstellen der Schrittweite h an.

$$x_k = x_0 + kh \quad \leadsto \quad h = \frac{x_n - x_0}{n} \quad , \quad h < 1$$

Beispiele:

$$n=1$$



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

$$\leadsto w_0 = \int_0^x dx \frac{x-x_1}{x_0-x_1} = \frac{h}{2}$$

$$w_1 = \int_0^x dx \frac{x-x_0}{x_1-x_0} = \frac{h}{2}$$

$$\int_{x_0}^{x_1} dx f(x) = \frac{h}{2} (f_0 + f_1) + O(h^3)$$

$\uparrow \int_{x_0}^{x_1} dx x^2 \sim h^3$

Trapez-
regel

$$\boxed{n=2} \quad p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f_2$$

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_2} dx \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{h}{3} = w_2$$

$$w_1 = \int_{x_0}^{x_2} dx \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{4}{3}h$$

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} dx f(x) = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) + O(h^5)}$$

Simpson'sche
Eindrittel-Regel

$$O(h^5): \int_{x_0}^{x_2} dx x^3 = \frac{1}{4} [(x_0 + 2h)^4 - x_0^4] - \cancel{\frac{1}{3} x_0^4}$$

$$= \frac{h}{3} [x_0^3 + 4(x_0+h)^3 + (x_0+2h)^3]$$

Für $f(x) = x^3$ ist die Formel "zufällig" immer
noch richtig!

$$\boxed{n=3}$$

$$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \dots$$

$$\downarrow$$

$$w_0 = \frac{3}{8}h$$

$$\downarrow$$

$$w_1 = \frac{9}{8}h$$

$$\rightarrow \boxed{\int_{x_0}^{x_3} dx f(x) = \frac{3}{8}h (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) + O(h^5)}$$

Simpson'sche Dreieckregel

Kein besseres Ergebnis als bei der Eindrittel-Regel

$n=4$ | Boolesche Regel

... höhere Ordnungen

⇒ "Newton-Cotes-Formeln"

Die einfache Trapezregel und die Simpsonsche Regel werden als Bausteine benutzt indem das Integrationsintervall in N gleiche Teile zerlegt werden und wiederholt die Regel angewendet werden

~~Regel~~

$$\begin{aligned} \bullet \int_{x_0}^{x_N} dx f(x) &= \frac{h}{2} (f_0 + f_1) + \frac{h}{2} (f_1 + f_2) \\ &\quad + \dots + \dots \\ &\quad + \frac{h}{2} (f_{n-1} + f_n) \\ &= h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + f_2 + \dots + \frac{1}{2} f_n \right) \\ &\quad (\text{Trapezregel}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet \int_{x_0}^{x_{2N}} dx f(x) &= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) + \frac{h}{3} (f_2 + 4f_3 + f_4) + \dots \\ &= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{2N-2} \\ &\quad + 4f_{2N-1} + f_{2N}) \\ &\quad (\text{Simpsonsche Regel}) \end{aligned}$$

Betrachtung des Fehlers:

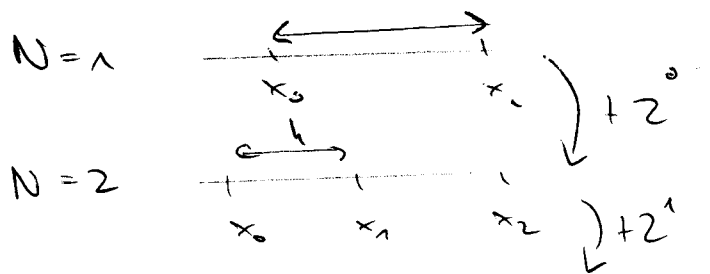
- Trapezregel: jeder Schritt hat einen Fehler $O(h^3) \sim O(N^3)$
→ Gesamtfehler: $O(N^2)$

- Simpsonsche Regel: jeder Schritt hat einen Fehler $O(h^5)$
→ Gesamtfehler: $O(N^{-4})$

Durch wiederholtes Halbieren der Teilintervalle kann eine gewünschte Genauigkeit erreicht werden.

Halbierung

- Trapezregel ..



...
solange sich die Genauigkeit erhöht

- Simpsonsche Regel: $N=1$ } $+2^1$
 $N=2$ }
 $N=4$ } $+2^2$

...
um 1 verschoben

Gaußsche Integralformeln / Quadraturformeln

7.11.06

- konvergieren schneller mit der Zahl der Funktionsaufträge
- wichtiger Bestandteil: orthogonale Polynome

Wir betrachten das Intervall $[-1, 1]$ ^{Variable} ~~transf.~~ $\rightarrow [a, b]$
orthogonale Polynome auf $[-1, 1]$: Legendre-Polynome
entstanden durch orthogonalisierung der Potenzen x^0, x^1, x^2, \dots
auf dem Intervall $[-1, 1]$

Orthogonalitätsrelation: $\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}$

$$P_0 = 1 \quad P_1 = x \quad P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad P_n = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

Wir wollen, dass

$$\int_{-1}^1 dx f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f_i \quad ; \quad f_i = f(x_i) \quad (0)$$

soll bei dieser Methode exakt gelten für ein Polynom
von Grad $(2n-1)$ (ist exakt bestimmt da n Stützstellen x_i
und n Gewichte $w_i \Rightarrow 2n$ Koeffizienten)

$f(x)$: Polynom von Grad $(2n-1)$ (Polynomdivision)

$$f(x) = q^{(2n-1)}(x) P_n(x) + r^{(n-1)}(x)$$

Beispiel: $f(x) = 3x^3 - 6x - 2$, $2n-1 = 3 \rightarrow n=2$

$$P_1(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$\Rightarrow f(x) = \underbrace{2x}_{q^{(1)}} P_2(x) + \underbrace{-5x - 2}_{r^{(1)}}$$

Einsetzen:

$$\int_{-1}^1 dx f(x) = \int_{-1}^1 dx q^{(n-1)}(x) P_n(x) + \int_{-1}^1 dx r^{(n-1)}(x)$$

$\{P_n\}$ bilden ein vollständiges System:

$$q^{(n-1)}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} q_i P_i(x) \quad \begin{array}{l} \uparrow \text{konst} \\ \text{Entwicklung in} \\ \text{Legendrepolynomen} \end{array}$$

$$\int_{-1}^1 dx q^{(n-1)}(x) P_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} q_i \int_{-1}^1 dx P_i(x) P_n(x)$$

$$\stackrel{*}{=} 0$$

* orthogonal.

$$\Rightarrow \int_{-1}^1 dx q^{(n-1)}(x) P_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i q^{(n-1)}(x_i) P_n(x_i) = 0$$

→ ~~vor~~

$f(x)$ zwar von Grad $(2n-1)$, sonst beliebig

$$\rightarrow q^{(n-1)} \quad \text{---} \quad (n-1) \quad \text{---} \quad \dots \quad \text{---}$$

$$\Rightarrow P_n(x_i) \stackrel{!}{\neq} 0 \quad ; \quad i = 0 \dots n-1$$

es müsse die Nullstellen des Legendrepolynoms bestimmt werden

Wir wählen also als Stützstellen die Nullstelle von $P_n(x)$

Kontrolle:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 dx f(x) &= 0 + \int_{-1}^1 dx r^{(n-1)}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i r(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} f_i \quad \checkmark\end{aligned}$$

Zur Erinnerung: Lagrangesches Interpolationspolynom

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n-1} P_k^{(n-1)}(x) f(x_k) \quad ; \quad P_k^{(n-1)}(x) = \frac{1}{\prod_{j=0, j \neq k}^{n-1} (x_k - x_j)} \prod_{j=0, j \neq k}^{n-1} (x - x_j)$$

$$P_k^{(n-1)}(x_i) = \delta_{ki}$$

(□) anwenden:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 dx P_k^{(n-1)}(x) &= \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i P_k^{(n-1)}(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i \delta_{ki} = \omega_k\end{aligned}$$

$$\int_{-1}^1 dx P_k^{(n-1)}(x) = \omega_k$$

damit sind nun auch die Gewichte bekannt

Beispiel: $n=2$ Funktionsaufgabe:

$$\int_{-1}^1 dx f(x) = \sum_{i=0}^1 \omega_i f_i \quad ; \quad x_i: \text{ Nullstelle von } P_2(x)$$

$$x_0, x_1 = \pm \sqrt{\frac{1}{3}}$$

$$\omega_0 = \int_{-1}^1 dx P_0^{(2)}(x) = \int_{-1}^1 dx \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = 1$$

$$\omega_1 = \omega_0 = 1$$

$$\Rightarrow \int_{-1}^1 dx f(x) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Konvergenz: Fehler: $\int_a^b dx x^n \sim h^{2n+1}$ ($h = \text{Intervallbreite} < 1$)

N Abschnitte mit $h = \frac{b-a}{N}$

Gesamtfehler $\sim O(N^{-2n})$

$n=10$ kein Problem

\Rightarrow sehr schnelle Konvergenz

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

Betrachte führende Term

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{2n} = \frac{(2n)!}{n!} x^n$$

$$\frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(x) = (x-x_0)(x-x_1) \dots (x-x_{n-1}) = \pi(x)$$

$$\rightarrow \pi(x) = \prod_{i=0}^{n-1} (x-x_i), \quad \pi'(x_k) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n-1} (x_k - x_i)$$

$$P_k^{(n+1)}(x) = \frac{\pi(x)}{\pi'(x)(x-x_k)}$$

$$\text{Rekursion: } (2i+1)x P_i(x) = (i+1) P_{i+1}(x) + i P_{i-1}(x)$$

Rekursion: $(2i+1) \times P_i(x) P_i(t) = (i+1) P_{i+1}(x) P_i(t) + i P_{i-1}(x) P_i(t)$

$(t \leftrightarrow x)$

~~$$(2i+1) \times P_i(t) P_i(x) + i P_{i-1}(t) P_i(x)$$~~

~~$$(2i+1) (t-x) P_i(x)$$~~

...

$$\Rightarrow I = - \frac{2}{n+1} \frac{1}{P_{n+1}(x_k)}$$

Nachmal Rekursionsrelation mit $x = x_k$ verwenden

$$\Rightarrow w_k = \int_{-1}^1 dx \frac{P_n(x)}{P_n'(x_k)(x-x_k)} = \frac{2}{n} \frac{1}{P_n'(x_k) P_{n-1}(x_k)}$$

eine, zweite, äquivalente Formel, unter Verwendung der Rekursionsrelation

$$(1-x^2) P_n'(x) = -n x P_n(x) + n P_{n-1}(x)$$

$$x = x_k : (1-x_k^2) P_n'(x_k) = 0 + n \cdot P_{n-1}(x_k)$$

ist:

$$w_k = \frac{2}{(1-x_k^2) [P_n'(x_k)]^2}$$

Große Einschränkung: nur im Intervall $[-1, 1]$

Allgemeiner:

$$\int_a^b dx \, w(x) f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f_i$$

↑ positive Gewichtsfunktion

$\{\phi_n\}$ bilden vollst. System auf $[a, b]$

Orthogonalitätsrelation

$$\int_a^b dx \, w(x) \phi_m(x) \phi_n(x) = c_n \delta_{mn}$$

... selbe Herleitung wie für die Hermite polynome...

→ Stützstellen x_i : Nullstellen von $\phi_n(x)$

$$\text{Gewichte: } w_i = \int_a^b dx \, w(x) P_i^{(n-1)}(x)$$

meist genutzte Quadraturformeln

$$1) \, w(x) = e^{-x}, \quad I = \int_0^\infty dx \, e^{-x} f(x)$$

relev. Polynome: Laguerre - Polynome $L_n(x)$

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n), \quad L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x$$
$$L_2 = \frac{1}{2} (x^2 - 4x + 2)$$

$$\text{Orthogonalitätsrelation: } \int_0^\infty dx \, e^{-x} L_n(x) L_m(x) = \delta_{nm}$$

$$\text{Rekursionsrelation: } (n+1) L_{n+1}(x) = (2n+1-x) L_n(x) - n L_{n-1}(x)$$

$$w_k = \frac{(n!)^2}{x_k [L'_n(x_k)]^2}$$

$$2) \quad w(x) = e^{-x^2}$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-x^2} f(x)$$

relevante Polynome: Hermite - Polynome $H_n(x)$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) \quad H_0 = 1, H_1 = 2x,$$

$$H_2 = 4x^2 - 2$$

Orthogonalitätsrelation:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} \, 2^n n! \, \delta_{nm}$$

Rekursionsrelation:

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x)$$

$$3) \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$I = \int_{-1}^1 dx \, \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)$$

relevante Polynome: Chebyshev - Polynome $T_n(x)$

$$T_n(x) = \cos \left(\underbrace{n \arccos x}_{\equiv \theta} \right), \quad T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta)$$

$$T_0 = 1 \quad T_1 = x \quad T_2 = 2x^2 - 1$$

$$\text{Orthogonalitätsrelation: } \int_{-1}^1 dx \, \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_m(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \delta_{nm} \\ \pi, m=n=0 \end{cases}$$

$$\text{Rekursionsrelation: } T_{n+1}(x) = 2x T_n(x) - T_{n-1}(x)$$

Approximation von Ableitungen

14.11.06

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

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (\square)$$

$$\leadsto f'(x) = \frac{1}{h} \left[f(x+h) - f(x) - \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \right] \quad (*)$$

$$= \frac{1}{h} \left[f(x+h) - f(x) \right] + O(h)$$

\uparrow aufsteigende Differenz

ebenso: $h \rightarrow -h$

$$\leadsto f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (\square\square)$$

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[f(x) - f(x-h) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \right] \quad (**)$$

$$= \frac{1}{h} \left[f(x) - f(x-h) \right] + O(h)$$

\uparrow absteigende Differenz

$(*) + (**):$

$$2f'(x) = \frac{1}{h} \left[f(x+h) - f(x) + f(x) - f(x-h) \right] + O(h^2)$$

$$\leadsto f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

3-Punkte-Formel

- generell: Symmetrische Ausdrücke sind genauer als unsymmetrische

$$f'' : (\square) + (\square\square)$$

$$\approx f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x)$$

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

- Fehler weiter reduzieren durch mehr Funktionsaufrufe:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(x) + \dots \quad (+)$$

Schrittweite verdoppeln

$$f'(x) = \frac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h} - \frac{4h^2}{6} f'''(x) \quad (++)$$

↑ Fehler viermal so groß

$$(+) - \frac{1}{4} (++):$$

$$\frac{3}{4} f'(x) = \frac{8f(x+h) - 8f(x-h) - f(x+2h) + f(x-2h)}{16} + O(h^4)$$

→ 5-Punkte-Formel

ebenso:

$$f''(x) = \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2} + O(h^4)$$

Lineare Gleichungen

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b}, \quad A = \begin{pmatrix} \diagup & & 0 \\ & \diagup & \\ 0 & & \diagup \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \text{Gaußelimination} \rightarrow \begin{pmatrix} \diagup & & 0 \\ & \diagup & \\ 0 & & \diagup \end{pmatrix}$$

- Lösung durch Rücksubstitution
- Gaußelimination kann generell angewendet werden zur Lösung von Gleichungssystemen

$A \cdot \vec{x} = \vec{b}$ wird schrittweise in ein oberes Dreieckssystem $R \cdot \vec{x} = \vec{c}$ umgeformt. Lösung erhält man durch Rücksubstitution. Zur Verfügung steht:

- Gleichungen vertauschen
- Vielfache einer Gl. zu einer anderen addieren

Angepunkt hier: "Vielfache".

Beispiel:

$$\begin{array}{l} 1. \text{ Gl.: } a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ i. \text{ Gl.: } a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n = b_i \end{array} \quad \left| \begin{array}{l} * \frac{a_{i1}}{a_{11}} \\ * \frac{a_{i2}}{a_{11}} \end{array} \right.$$

Um die Rechenungehrigkeit zu minimieren, muss betragsmäßig größtes Element anstatt von a_{11} benutzt werden.

→ Pivotelement: $|a_{i1}| \max_{1 \leq i \leq n} |a_{i1}|$

Diesen Schritt nennt man Pivotsuche.

Der gesamte Prozess heißt Teil/Spaltenpivotierung

Gaußelimination wie ohne Pivotierung!

Beispiel:

$$\left. \begin{array}{l} 10^{-5} x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{array} \right\} x_1 \approx x_2 \approx 1$$

angenommen der Computer arbeitet mit einer Genauigkeit von 4 Dezimalstellen.

ohne Pivotierung: $\text{II} - 10^5 \text{I}$:

$$(1 - 10^5) x_2 = 2 - 10^5 \xrightarrow{\text{PC}} -10^5 x_2 = -10^5 \\ \Rightarrow x_2 = 1 \quad \checkmark$$

$$10^{-5} x_1 + 1 = 1 \xrightarrow{\text{PC}} x_1 = 0 \quad \times$$

mit Pivotierung: $(\text{I} \leftrightarrow \text{II})$: $x_2 + x_1 = 2$
 $10^{-5} x_1 + x_2 = 1$

$$(1 - 10^{-5}) x_2 = 1 - 2 \cdot 10^{-5}$$

$$\Rightarrow x_2 = 1 \quad \checkmark$$

$$x_1 + 1 = 2$$

$$\Rightarrow x_1 = 1 \quad \checkmark$$

→ Funktioniert aber auch nicht immer, da nur Teilpivotierung!

Implizite Pivotierung:

1. Schritt: Größter Eintrag der i-ten Zeile bestimmen

$$|a_{in}| = \max_{1 \leq j \leq n} |a_{ij}|$$

und dividieren alle Einträge a_{ij} durch $|a_{in}|$

16.11.06

Gauß-Jordan - Elimination

Beispiel:

$$\begin{array}{rcrcrcrcrl} x & + & y & + & z & = & 6 \\ 2x & - & y & + & z & = & 3 \\ 3x & + & 2y & - & z & = & 4 \end{array}$$

~ erweiterte Matrix

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & -1 & 4 \end{array} \right)$$

$$\xrightarrow{\frac{1}{3}r_1} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2/3 & -1/3 & 4/3 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 6 \end{array} \right) \xrightarrow[r_3 - r_1]{r_2 - 2r_1} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2/3 & -1/3 & 4/3 \\ 0 & -7/3 & 5/3 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 4/3 & 14/3 \end{array} \right)$$

$$\xrightarrow{-\frac{3}{7}r_2} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2/3 & -1/3 & 4/3 \\ 0 & 1 & -5/7 & -1/7 \\ 0 & 1/3 & 4/3 & 14/3 \end{array} \right) \xrightarrow[r_3 - \frac{1}{3}r_2]{r_1 - \frac{2}{3}r_2} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1/7 & 10/7 \\ 0 & 1 & -5/7 & -1/7 \\ 0 & 0 & 11/7 & 37/7 \end{array} \right)$$

$$\xrightarrow[r_2 + \frac{5}{7}r_3]{r_1 - \frac{1}{7}r_3} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array} \right) \Rightarrow x_1 = 1; x_2 = 2; x_3 = 3$$

Inverse Matrix:

$$A \cdot R = I, \quad R = A^{-1}$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{erw}} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2}r_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 - r_1]{r_2 - r_1} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{2}{3}r_2 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 - \frac{1}{2}r_2]{r_1 - \frac{1}{2}r_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{matrix} r_1 - \frac{1}{3}r_3 \\ r_2 - \frac{1}{3}r_3 \end{matrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

Pseudocode für $A \cdot \vec{x} = \vec{b}$

for Spalte $j=1$ to n

begin

suche betragsgrößtes Element

vertausche j -te und k -te Zeile

if $p_k = 0$

stop

else

begin

dividiere j -te Zeile durch p_k

for zeile $i' = 1$ to n , $i' \neq j$
 eliminiere alle Einträge a_{ij}
 end

end

LU-Zerlegung

$$A = L \cdot U \quad \text{mit} \quad U = \left(\nabla \right) \quad \text{und} \quad \left(\triangle \right) = L$$

mit 1 auf Diag.

"teile und herrsche"

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b} \rightsquigarrow L \cdot \underbrace{U \cdot \vec{x}}_{\vec{y}} = \vec{b} \rightsquigarrow L \cdot \underset{(i)}{\vec{y}} = \vec{b} \quad ; \quad U \cdot \underset{(ii)}{\vec{x}} = \vec{y}$$

(i) Lösen durch Vorwärtssubstitution nach \vec{y}

(ii) Lösen durch Rückwärtssubstitution nach \vec{x}

Vorteil: Zerlegung kann ohne \vec{b} durchgeführt werden.

Dies ist der arbeitsintensive Schritt. ($\frac{1}{3}n^3$)

Die Lösungen zu finden geht dann mit geringem Aufwand ($\sim n^2$)

Behauptung: LU-Zerlegung ist in der Gauß-Elimination enthalten - ja, fast

$$\begin{pmatrix} 3 & 6 & 9 \\ 2 & 5 & 2 \\ -3 & -4 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{1}{3}r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ -3 & -4 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{r_2 - 2r_1 \\ r_3 - 3r_1}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xRightarrow{\text{Gauß}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow A = m_1 \cdot m_2 \cdot P \cdot m_3 \cdot m_4 \cdot m_5 \cdot U$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & -3 \\ -3 & 2 & 0 \end{pmatrix}}_{P \cdot L} U$$

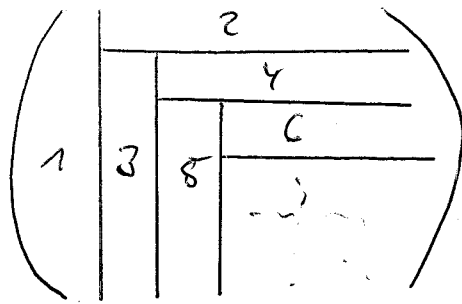
$$\rightarrow P \cdot A = L \cdot U \quad (\text{bis auf Permutation der Zeilen})$$

Crowd:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & \dots & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ l_{m1} & \dots & \dots & l_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ \vdots & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & \dots & & 1 \end{pmatrix}$$

- erste Spalte: $a_{i1} = l_{i1} \Rightarrow l_{i1} = a_{i1}, i=1, \dots, n$
- erste Zeile: $a_{1j} = l_{11} u_{1j} \Rightarrow u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}}, j=2, \dots, n$
- zweite Spalte: $a_{i2} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{bekannt}}}{l_{i1}} \underset{\uparrow}{u_{12}} + l_{i2}$

schematisch:



• j-te Spalte: $l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}$, $j = j, j+1, \dots, n$

• i-te Zeile: $u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii}$, $j = i+1, \dots, n$

21.11.06

(i) lässt sich leicht lösen:

$$l_{11} y_1 = b_1$$

$$l_{21} y_1 + l_{22} y_2 = b_2$$

\vdots

$$l_{n1} y_1 + \dots + l_{nn} y_n = b_n$$

$$y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k) / l_{ii}, \quad i = 2, \dots, n$$

$$y_n = b_n / l_{nn}$$

\vec{y} gefunden: (ii) lösen durch Rücksubstitution:

$$x_{n-i} = y_{n-i} - \sum_{k=n-i+1}^n u_{n-i,k} x_k, \quad i = 1, \dots, n-1$$

$$x_n = y_n$$

LU - Zerlegung: Cont:

$$\vec{A} = \vec{L} \cdot \vec{U} \quad \vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$$

$$\rightarrow \vec{L} \cdot \underbrace{\vec{U} \cdot \vec{x}}_{:= \vec{y}} = \vec{b}$$

$$\rightarrow \boxed{\vec{L} \cdot \vec{y} = \vec{b}} \quad \boxed{\vec{U} \cdot \vec{x} = \vec{y}} \quad \begin{matrix} (i) \\ (ii) \end{matrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots \\ a_{21} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \dots \\ 0 & 1 & u_{23} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

j. Spalte : $l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \quad ; \quad i=j, j=1, \dots, n$
 $l_{ii} = a_{ii}$

i. Zeile : $u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii} \quad ; \quad j=i+1, \dots, n$
 $u_{ij} = a_{ij} / l_{ii}$

$$\begin{pmatrix} 1 & \begin{array}{c|c} 2 & \\ \hline 4 & \\ \hline 3 & \dots \end{array} \end{pmatrix}$$

(i) lässt sich leicht lösen:

$$l_{11} y_1 = b_1 \rightarrow y_1 = b_1 / l_{11}$$

$$l_{21} y_1 + l_{22} y_2 = b_2$$

:

$$l_{n1} y_1 + l_{n2} y_2 + \dots + l_{nn} y_n = b_n$$

Vorwärts-
substitution

✓

$$y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k) / l_{ii}$$

; $i = 2 \dots n$

$$y_1 = b_1 / l_{11}$$

\vec{y} gefunden: (ii) lösen durch Rücksubstitution

$$x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n = y_1$$

$$x_2 + \dots + a_{2n} x_n = y_2$$

$$\vdots$$

$$\widetilde{x_n} = y_n$$

↑

$$x_{n-i} = y_{n-i} - \sum_{k=n-i+1}^n a_{n-i,k} x_k$$

$i = 1 \dots n-1$

$$x_n = y_n$$

Inverse Matrix:

nehme $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots$ mit $b_{ij} = \delta_{ij}$; $i, j = 1 \dots n$

Determinante : $\det(A) = \det(L) \cdot \det(U)$
 $= \prod_{i=1}^n l_{ii} \cdot 1$

Effizienz:

- Gauß-Elimination

i) Umformung von $A \rightarrow U$

$U: \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{pmatrix}$ $n-1$ Einträge (1. Zeile)
 $n-1$ Koeff. geändert (1. Spalte) usw.

arithmetische Operationen : Mult., Div.

Aufwand : $(n-1)^2 + (n-2)^2 + \dots + 1$
 $= \sum_{i=2}^n (i-1)^2 = \sum_{i=1}^{n-1} i^2 = \frac{1}{6} (n-1)n(2n-1)$
 $\sim \frac{1}{3} n^3$

ii) Rücksubstitution

$$\begin{array}{rcll} x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n & = & b_1' & n-1 \text{ a. Ops.} \\ & & & \\ x_{n-1} + a_{n-1,n} x_n & = & b_{n-1}' & 1 \text{ a. Ops} \\ & & & \\ x_n & = & b_n' & \end{array}$$

Aufwand : $\sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{(n-1)n}{2} \sim \frac{n^2}{2}$

Gesamtaufwand $\frac{1}{3} n^3 + m \frac{n^2}{2} \sim O(n^3)$
für m rechte Seiten

- LU-Zerlegung

(i) Zerlegung wie bei Gauß: $O(n^3)$

(ii) Rück- und Vorwärtssubst. $\therefore O(n^2)$

für einzelne Lösungen

• Determinante: kein zusätzlicher Aufwand
zu Zerlegung

verg. mit "klassischen" Verfahren:
 $O(n!)$

\Rightarrow LU-Zerlegung ist hier sehr hilfreich

Überbestimmte Systeme

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

, A : $m \times n$ -Matrix, $m > n$

\vec{b} : in Komponenten

\vec{x} : in Komponenten

In der Regel: keine eindeutige exakte Lösung

• Lösung nach der Methode der kleinsten Quadrate

- definiere Abweichung: $\vec{r} := \vec{b} - A\vec{x}$

- minimiere Summe der quadratischen Abweichungen:

$$\vec{r}^2 = \sum_{i=1}^m [b_i - (A\vec{x})_i] [b_i - (A\vec{x})_i]$$

$$= \sum_{i=1}^m \left(b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right) \left(b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right)$$

$$\frac{\partial \vec{r}^2}{\partial x_k} = 0$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^m \left[-A_{ik} (b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j) + (b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j) (-A_{ik}) \right] \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightarrow -2 \sum_{i=1}^m A_{ik} (b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightarrow \boxed{\underbrace{A^T \cdot A}_{=: A'} \cdot \vec{x} = \underbrace{A^T \cdot \vec{b}}_{\vec{b}'}} \quad \text{ist von der Form}$$

$$\uparrow \text{"Normalengleichungen"} \quad A' \cdot \vec{x} = \vec{b}'$$

$$A = m \times n, \quad A^T = n \times m \quad \rightarrow \quad A^T \cdot A = n \times n$$

Jetzt kann Gauß/Gauß-Jordan/LU-Zerlegung angewendet werden

Beispiel:

$$x_1 - x_2 = 2$$

$$x_1 + x_2 = 4$$

$$2x_1 + x_2 = 8$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad A^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad A^T \cdot A = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}, \quad A^T \cdot \vec{b} = \begin{pmatrix} 22 \\ 10 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} 6x_1 + 2x_2 = 22 \\ 2x_1 + 3x_2 = 10 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} x_1 = 23/7 \\ x_2 = 8/7 \end{array}$$

Beispiel: $x = a_i$, $i = 1, \dots, m$

$$F^2 = \sum_{i=1}^m (x - a_i)^2, \quad \frac{\partial F^2}{\partial x} = 0 \rightarrow 2 \sum_{i=1}^m (x - a_i) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightarrow mx = \sum_{i=1}^m a_i$$

$$\rightarrow \boxed{x = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m a_i} \quad \text{Mittelwert}$$

23.11.06

Standardabweichung: $\sigma = \sqrt{\frac{F^2}{m}}$
(mittlere quadr. Abweichung)

Iterative Verfahren für lineare Gleichungssysteme

a) Jacobi: $A \vec{x} = \vec{b}$, $A: n \times n$ - Matrix
definiere $A = D + E$, D : Diagonalmatrix
 $D_{ij} = a_{ij} \delta_{ij}$

$$(D + E) \cdot \vec{x} = \vec{b}$$

$$D \cdot \vec{x} = \vec{b} - E \vec{x}$$

$$\boxed{\vec{x} = D^{-1} \cdot (\vec{b} - E \vec{x})}$$

Fixpunktgleichung

Komponentenschreibweise:

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}$$

Bei der Berechnung von $x_i^{(k+1)}$ wird nicht die aktuellste Information benutzt: obwohl $x_{i'}^{(k+1)}$ mit $i' < i$ schon bekannt werden noch immer die alten Werte $x_{i'}^{(k)}$ verwendet

b) Gauß-Seidel:

Jacobi kann so korrigiert werden, dass das letztgenannte Problem nicht mehr auftritt

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}$$

Das Verfahren ist etwa doppelt so schnell wie Jacobi

Konvergenz des Jacobi-Verfahrens:

definieren $\vec{e}^{(k)} = \vec{x} - \vec{x}^{(k)}$
 \uparrow
exakte Lsg

$$\begin{aligned} \vec{e}^{(k+1)} &= \vec{x} - D^{-1} (\vec{b} - E \vec{x}^{(k)}) \\ &= D^{-1} \cdot E \vec{x}^{(k)} + \underbrace{\vec{x} - D^{-1} \vec{b}}_{= -D^{-1} E \vec{x}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\vec{e}^{(k+1)} = -D^{-1} E \cdot \vec{e}^{(k)}}$$

mit Cauchy-Schwarz ($\|\vec{a} \cdot \vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\|$)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \|\vec{e}^{(k+1)}\| &\leq \|D^{-1} E\| \|\vec{e}^{(k)}\| \\ &< \|D^{-1} E\|^k \|\vec{e}^{(0)}\|, \text{ wenn } \|D^{-1} E\| < 1 \\ &\quad \text{Konvergenz} \end{aligned}$$

mögliche Definition für die Norm einer Matrix

$$\|A\|_{\infty} = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \text{ Zeilensummennorm: } \|\vec{v}\| = \max_i |v_i|$$

In unserem Fall ist die Konvergenzbedingung

$$\|D^{-1} E\|_{\infty} < 1 \quad \Rightarrow \quad \max_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1$$

$$\rightarrow \boxed{|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1 \dots n}$$

starkdiagonal-
dominante Matrizen

Zu jeder Zeit muss die Summe der Beträge der nicht-diagonalelemente kleiner sein als der Betrag des Diagonalelements.

Die Konvergenz ist für solche "starkdiagonaldominante Matrizen" garantiert, aber auch ansonsten kann das Verfahren noch konvergieren (abhängig von Startwert)

Betrachtung nochmal ohne Verwendung von Cauchy-Schwarz:

$$\begin{aligned} \vec{e}^{(k+1)} &= -D^{-1} E \vec{e}^{(k)} \\ e_i^{(k+1)} &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{a_{ij}}{a_{ii}} e_j^{(k)}, \quad i = 1 \dots n \end{aligned}$$

Der Betrag:

$$\begin{aligned} |e_i^{(k+1)}| &\leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| |e_j^{(k)}| \\ &\leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \|\vec{e}^{(k)}\|_{\infty} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \|\vec{e}^{(k+1)}\|_{\infty} \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \|\vec{e}^{(k)}\|_{\infty}$$

$$\|\vec{e}^{(k+1)}\|_{\infty} \leq \max_i \underbrace{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|}_{\equiv \|D^{-1} \cdot E\|_{\infty}} \|\vec{e}^{(k)}\|_{\infty}$$

Selbes Ergebnis

1) Dreiecksungleichung $|a+b| \leq |a| + |b|$

28.11.06

Fehlerfortpflanzung: Gauß / Gauß-Jordan / LU-Zerlegung

$$A \vec{x} = \vec{b} \quad (1)$$

$$A \vec{x}_j = \vec{b} + \vec{j}$$

↑ Eingabefehler

$$A (\vec{x}_j - \vec{x}) = \vec{j} \quad (1')$$

$$\rightarrow \vec{x}_j - \vec{x} = A^{-1} \cdot \vec{j}$$

$$\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_{\infty} \leq \|A^{-1}\|_{\infty} \|\vec{j}\|_{\infty} \quad (\text{Zeilensummenorm})$$

aus (1):

$$\|\vec{b}\|_{\infty} \leq \|A\|_{\infty} \|\vec{x}\|_{\infty}$$

$$\|\vec{x}\|_{\infty} \geq \frac{\|\vec{b}\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}} \quad (3)$$

aus (2), (3):

$$\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_{\infty}}{\|\vec{x}\|_{\infty}} \leq \underbrace{\|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty}}_{\substack{\text{"conditioning"} \\ \text{factor}}} \frac{\|\vec{j}\|_{\infty}}{\|\vec{b}\|_{\infty}} \quad , \quad \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_{\infty}}{\|\vec{x}\|_{\infty}} \leq c(A) \frac{\|\vec{j}\|_{\infty}}{\|\vec{b}\|_{\infty}}$$

$= c(A)$

Ein Gleichungssystem ist schlecht konditioniert, wenn eine kleine Änderung auf der rechten Seite eine große Änderung der Lösung nach sich zieht.

Bestimmung einer unteren Schranke

aus (1):

$$\|\vec{x}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|\vec{b}\|_\infty$$

aus (1'):

$$\|\vec{j}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty$$

$$\Rightarrow \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \geq \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{C(A) \|\vec{b}\|_\infty}$$

Insgesamt gilt:

$$\frac{1}{C(A)} \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{\|\vec{b}\|_\infty} \leq \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \leq C(A) \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{\|\vec{b}\|_\infty}$$

Wenn $C(A)$ groß ist, ist die Matrix bzw. das Gleichungssystem schlecht konditioniert

Angenommen, Fehler ist nicht auf der rechten Seite, sondern bei der Matrix:

$$(A + F) \cdot \vec{x}_j = \vec{b}$$

$$\rightarrow A(\vec{x}_j - \vec{x}) = -F \cdot \vec{x}_j$$

$$\rightarrow \|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|F\|_\infty \|\vec{x}_j\|_\infty$$

$$\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}_j\|_\infty} \leq C(A) \frac{\|F\|_\infty}{\|A\|_\infty}$$

$$\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \leq \frac{C(A) \|F\|_\infty / \|A\|_\infty}{1 - C(A) \|F\|_\infty / \|A\|_\infty}$$

Eigenwertproblem

$$\begin{array}{ccc} A \cdot \vec{x} & = & \lambda \vec{x} \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{Eigen-} & & \text{Eigenwert} \\ \text{vektor} & & \end{array}$$

A : $n \times n$ - Matrix

$$\rightarrow (A - \lambda I) \cdot \vec{x} = 0$$

nichttriviale Lösung, wenn $\det(A - \lambda I) = 0$

charakteristisches Polynom $f^{(n)}(\lambda)$ n -ten Grades

$f^{(n)}(\lambda)$: charakteristisches Polynom: hat genau n Nullstellen

$\rightarrow n \times n$ - Matrix hat genau n Eigenwerte

- n klein: normale Verfahren anwenden
- n groß: Rechenverfahren zu unständig und zu anfällig gegenüber Rundungsfehlern

Angenommen, $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \dots \geq |\lambda_n|$

\uparrow
dominanter
Eigenwert

Eigenvektoren: $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$

beliebiger Vektor \vec{x} : $\vec{x} = c_1 \vec{x}_1 + c_2 \vec{x}_2 + \dots + c_n \vec{x}_n \equiv \vec{x}^{(0)}$
(Entwicklung)

Wir betrachten $A \cdot \vec{x}^{(0)} \equiv \vec{x}^{(1)} = c_1 \lambda_1 \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2 \vec{x}_2 + \dots$
nach k Iterationen:

$$A^k \cdot \vec{x}^{(0)} = c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2^k \vec{x}_2 + \dots \equiv \vec{x}^{(k)}$$

Benutzen, dass λ_1 dominanter Eigenwert ist, λ_1 ausklammern:

$$\rightarrow A^k \vec{x}^{(0)} = \lambda_1^k \left[c_1 \vec{x}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \vec{x}_2 + \dots c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \vec{x}_n \right]$$

$$\xrightarrow{k \text{ groß}} \lambda_1^k c_1 \vec{x}_1 + \checkmark, \text{ wenn } c_1 \neq 0$$

$$\frac{(A^{k+1} \cdot \vec{x})_i}{(A^k \cdot \vec{x})_i} = \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} = \frac{\lambda_1^{k+1} c_1 x_{1,i}}{\lambda_1^k c_1 x_{1,i}} = \lambda_1$$

"Potenzmethode (von Mises)"

Rayleigh - Quotient :

$$r^k \equiv \frac{\vec{x}^{(k)} \cdot A \cdot \vec{x}^{(k)}}{\vec{x}^{(k)} \cdot \vec{x}^{(k)}} = \lambda_1$$

Berücksichtigung
aller Komponenten!

übrige Eigenwerte:

- betragskleinster Eigenwert : durch Anwenden der
Potenzmethode auf A^{-1}

- andere Eigenwerte:

Setze $\mu \neq \lambda_i$ für $i = 1 \dots n$.

betrachte $(A - \mu I)^{-1}$, besitzt Eigenwerte

$\frac{1}{\lambda_i - \mu}$, Eigenvektoren \vec{x}_i

Wenn gilt: $|\lambda_j - \mu| < |\lambda_i - \mu|$ (μ in der Nähe von λ_j)

so ist $\frac{1}{\lambda_j - \mu}$ der dominante Eigenwert von $(A - \mu I)^{-1}$

\Rightarrow Potenzmethode kann wieder angewandt werden, um
 λ_j zu erhalten

Wenn μ schon eine gute Näherung für λ_j ist ~~das~~
konvergiert das Verfahren schnell.

Welchen Startwert sollte man für μ verwenden?

\Rightarrow Kreissatz von Gerschgorin (Lokalisierung
von Eigenwerten)

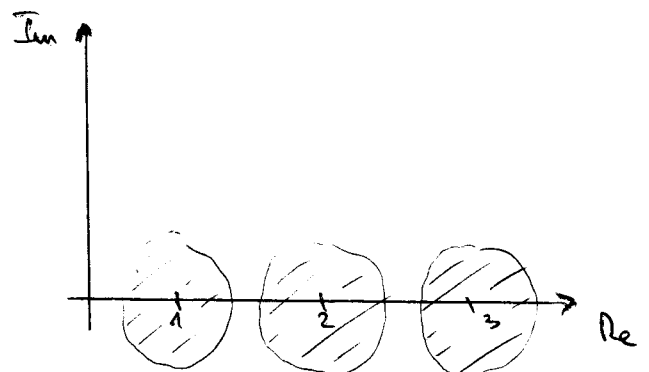
Kreissatz von Gerschgorin

" Jeder Eigenwert liegt in einem der Kreise um a_{ii}
mit dem Radius

$$R_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0,1 & -0,2 \\ 0 & 2 & 0,4 \\ -0,2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$



$$|\lambda_1 - 1| \leq 0,3 \quad |\lambda_3 - 3| \leq 0,2 \quad |\lambda_2 - 2| \leq 0,4$$

30.11.06

Beweis:

$$\text{Sei } A\vec{x} = \lambda\vec{x} \quad , \quad |\vec{x}| := \max_j |x_j| \quad (= \|\vec{x}\|_\infty, \text{Zeilen-Summennorm})$$

$$\rightarrow (a_{ii} - \lambda)x_i = - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j$$

$$\begin{aligned} \rightarrow |a_{ii} - \lambda| &\leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \left| \frac{x_j}{x_i} \right| \\ &\leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \end{aligned}$$

□

oft: in jedem Schritt: $|\vec{x}^{(k)}| \stackrel{!}{=} 1$

Weitere Konvergenz beim Gauß-Seidel-Verfahren

Zusätzlich zu dem oben genannten Fall, konvergiert das Verfahren ebenfalls, wenn A symmetrisch und positiv definit ist ($\lambda_i > 0$; $i = 1 \dots n$)

Ausgleichsproblem

Ziel: Anpassung einer Funktion an eine Messreihe:
Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate
(Gauß) für ein Polynom vom Grad m

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$$

Summe der Quadrate der Fehler:

$$\bar{\chi}^2 = \sum_{i=0}^{n-1} [y_i - p(x_i)]^2 \quad \text{Messungen: } (x_i, y_i)$$

$\bar{\chi}^2$ soll durch geeignete Wahl der Koeffizienten minimiert werden

$$\frac{\partial \bar{\chi}^2}{\partial a_k} \stackrel{!}{=} 0 \quad \rightarrow \quad -2 \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k [y_i - p(x_i)] \stackrel{!}{=} 0; \quad k = 0 \dots m$$

$$s_k \equiv \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k$$

$$t_k \equiv \sum_{i=0}^{n-1} y_i x_i^k$$

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 + \dots + s_m a_m = t_0$$

$$s_1 a_0 + s_2 a_1 + \dots + s_{m+1} a_m = t_1$$

⋮

$$s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \dots + s_{2m} a_m = t_m$$

$$A \cdot \vec{a} = \vec{t} \quad ; \quad A = \begin{pmatrix} s_0 & s_1 & \dots & s_m \\ s_1 & s_2 & \dots & s_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_m & s_{m+1} & \dots & s_{2m} \end{pmatrix}$$

Achtung: Für große m ist das System schlecht konditioniert (numerisch instabil)

angenommen x_i : äquidistant in $[0, 1]$

$(n-1)$ Intervalle

$$\rightarrow \frac{1}{n-1} \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k \underset{\substack{\uparrow \\ m \\ \text{groß}}}{\approx} \int_0^1 dx x^k = \frac{1}{k+1}$$

$$\rightarrow A = (n-1) \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots & \frac{1}{m+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots & \vdots \\ \frac{1}{m+1} & \frac{1}{m+2} & \dots & \dots & \frac{1}{2m+1} \end{pmatrix} \quad \left. \begin{array}{l} \text{Hilbertmatrix} \\ H_{ij} = \frac{1}{i+j-1} \end{array} \right\}$$

Hilbert-Matrizen: äußerst kleine Determinante für große m

4×4 -Matrix ($m=3$) $\det A = 1.65 \cdot 10^{-7}$!

Wenn m groß ist: Singulärwertzerlegung (SVD)

Allgemein: lineare kleinste Quadrate

$$p(x) = \sum_{j=0}^m a_j X_j(x)$$

↑
Basisfunktionen können
höchst- nichtlinear sein

minimiere:

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{y_i - p(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \stackrel{!}{=} 0, \quad k = 0 \dots m$$

$$\rightarrow \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i) [y_i - p(x_i)] \stackrel{!}{=} 0$$

Matrix - Notation:

$$A \cdot \vec{a} = \vec{b} \quad \text{zu lösen z.B. mit Gauß-Jordan}$$

$$b_k = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i) y_i$$

$$A_{ij} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_i(x_i) X_j(x_i)}{\sigma_i^2}$$

Fehleranalyse

betrachte Gaußsche Normalverteilung

$$p(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_y} e^{-(y-\bar{y})^2 / 2\sigma_y^2}$$

\bar{y} Erwartungswert von y :

$$\langle y \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dy \, y P(y) = \bar{y}$$

σ_y^2 : Varianz

$$\begin{aligned} \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle &= \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \, y^2 P(y) - \bar{y}^2 \\ &= \sigma_y^2 \end{aligned}$$

Betrachte Messreihe: bei festen x_i : $y_{i,j}$, $j=0 \dots l-1$
wenn die Fehler statistisch verteilt sind, so ist
die Verteilung der Messwerte eine Normalverteilung

Für Normalverteilung $\int_{\bar{y}-\sigma_y}^{\bar{y}+\sigma_y} dy P(y) = 0,6826 = 68,3\%$
(1 σ - Intervall)

2 σ - Intervall : 95,4%

Schätzwert für den Mittelwert $\bar{y}_i = \frac{1}{l} \sum_{j=0}^{l-1} y_{i,j}$ *

Schätzwert für die Standardabweichung $\sigma_y = \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^{l-1} (y_{i,j} - \bar{y}_i)^2}{l-1}}$
 $l-1$ ist die Zahl der Freiheitsgrade:
 l - (Beziehung *)

5.12.06

$$f = f(y_0 \dots y_{n-1})$$

$$\begin{aligned} \langle f(y_0 \dots y_{n-1}) \rangle &= \frac{1}{l} \sum_{j=0}^{l-1} f(y_{0,j}, y_{1,j}, \dots, y_{n-1,j}) \\ &= f(\bar{y}_0 \dots \bar{y}_{n-1}) \end{aligned}$$

Definition der Varianz

$$\sigma_f^2 = \langle (f(y_0 \dots y_{n-1}) - \langle f(y_0 \dots y_{n-1}) \rangle)^2 \rangle$$

$$= \left\langle \left(\sum_{i=0}^{n-1} \frac{\partial f}{\partial y_i} \Big|_{\bar{y}} (y_i - \bar{y}_i) \right)^2 \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\partial f}{\partial y_j} \Big|_{\bar{y}} \frac{\partial f}{\partial y_i} \Big|_{\bar{y}} (y_j - \bar{y}_j) (y_i - \bar{y}_i) \right\rangle$$

$$= \sum_{i,j=0}^{n-1} \frac{\partial f}{\partial y_j} \Big|_{\bar{y}} \frac{\partial f}{\partial y_i} \Big|_{\bar{y}} \underbrace{\langle (y_j - \bar{y}_j) (y_i - \bar{y}_i) \rangle}_{\delta_{ij} \sigma_{y_i}^2}$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1} \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} \Big|_{\bar{y}} \right)^2$$

Gaußsche Fehlerfortpflanzung

Weiterführung: lineare kleinste Quadrate

$$p(x) = \sum_{j=0}^m a_j X_j(x)$$

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{y_i - p(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad \text{Soll minimal sein}$$

→ Matrix-Notation

$$A \cdot \vec{a} = \vec{b} \quad , \quad b_k = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{y_i}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$A_{kj} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_k(x_i) X_j(x_i)}{\sigma_i^2} \quad , \quad k, j = 0 \dots m$$

(s.o.)

explizit:

$$a_j = \sum_{k=0}^m (A^{-1})_{jk} b_k$$

$$= \sum_{k=0}^m \sum_{i=0}^{n-1} (A^{-1})_{jk} \frac{y_i}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$\rightarrow \frac{\partial a_j}{\partial y_i} = \sum_{k=0}^m (A^{-1})_{jk} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{aj}^2 &= \sum_{i=0}^{n-1} \cancel{\sigma_i^2} \sum_{k=0}^m (A^{-1})_{jk} \frac{1}{\cancel{\sigma_i^2}} X_k(x_i) \cdot \sum_{k'=0}^m (A^{-1})_{jk'} \frac{1}{\sigma_i^2} X_{k'}(x_i) \\
&= \sum_{k,k'=0}^m (A^{-1})_{jk} (A^{-1})_{jk'} \underbrace{\sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_k(x_i) X_{k'}(x_i)}{\sigma_i^2}}_{= A_{kk'}} \\
&= \sum_{k'=0}^m (A^{-1})_{jk'} \delta_{jk'}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\sigma_{aj}^2 = (A^{-1})_{jj}}$$

Singulärwertzerlegung (SVD)

$$A = U \cdot \Sigma \cdot V^T$$

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

$$U \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

$$V \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_p)$$

$$p = \min\{m, n\}$$

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \dots \geq \sigma_p \geq 0$$

σ_i : Singuläre Werte

$$U, V \text{ orthogonal: } U U^T = U^T U = 1$$

$$V V^T = V^T V = 1$$

Spaltenvektoren von U und V : Singuläre Vektoren

Vorteil bei der Lösung $A \vec{x} = \vec{b}$ nach der Methode der kleinsten Quadrate:

Setze $\vec{r} = \vec{b} - A \vec{x}$, \vec{r} soll minimiert werden

$$\begin{aligned}
F^2 &= (A\vec{x} - \vec{b})^2 = (A\vec{x} - \vec{b})^T (A\vec{x} - \vec{b}) \\
&= (A \cdot V V^T \vec{x} - \vec{b})^T \cdot U U^T \cdot (A V V^T \vec{x} - \vec{b}) \\
&= (U^T A V V^T \vec{x} - U^T \vec{b})^T \cdot (U^T A \cdot V V^T \vec{x} - U^T \vec{b}) \\
&= \left(\underbrace{\Sigma \cdot V^T \cdot \vec{x}}_{\equiv \vec{z}} - \underbrace{U^T \vec{b}}_{\equiv \vec{d}} \right)^T \cdot \left(\Sigma \cdot V^T \vec{x} - U^T \vec{b} \right) \\
&= (\Sigma \cdot \vec{z} - \vec{d})^2
\end{aligned}$$

F^2 wird minimiert durch $z_i = \frac{d_i}{\sigma_i} \quad ; \quad \sigma_i \neq 0$
 z_i beliebig $;\quad \sigma_i = 0$

und $F_{\min}^2 = \sum_i d_i^2$ für alle i mit $\sigma_i = 0$ oder $i > n$

Lösung des eigentlichen Problems

$$\vec{x} = V \cdot \vec{z}$$

• Maß für die Konditionierung einer Matrix

$$C_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$$

$$\|M\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |m_{ij}|$$

$$C_E(A) = \|A\|_E \|A^{-1}\|_E$$

Euklidische Norm

$$= \sigma_{\max} / \sigma_{\min}$$

$$\|M\|_E = \max_{|\vec{x}|=1} |M \cdot \vec{x}|$$

Algorithmus zur Zerlegung in $\sigma_i, \vec{u}_i, \vec{v}_i$

i) finde Eigenwerte der Matrix $A^T \cdot A$, und ordne sie,
 sodass $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$

$$\rightarrow \boxed{\Sigma_{ii} = \sqrt{\lambda_i}}$$

ii) finde Eigenvektoren \vec{v}_i

$$\rightarrow V = \vec{v}_1 \uparrow \text{bringt} \vec{v}_2 \vec{v}_3 \dots \vec{v}_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

iii) finde $\vec{u}_i = \frac{1}{\sigma_i} A \vec{v}_i$ für $\sigma_i \neq 0$ und $j \leq n$

iv) finde Rest mit Hilfe von Gram-Schmidt:

$$\rightarrow U = \vec{u}_1 \vec{u}_2 \dots \vec{u}_m \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

7.12.06

Orthogonale Polynome

P_k : orthogonales Polynom auf dem Intervall $[a, b]$
mit Koeffizienten 1 des führenden Terms

$$\langle P_i, P_j \rangle = \delta_{ij}$$

Skalarprodukt: $\langle f, g \rangle = \int_a^b dx \, w(x) f(x) g(x)$
 \uparrow pos. definite Gewichtsfunction

Behauptung: Polynome können mit Hilfe einer Drei-Terme-Rekursion konstruiert werden

$$P_k(x) = (x + a_k) P_{k-1}(x) + b_k P_{k-2}(x) \quad (\square)$$

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

Beweis: nehme an $P_0 \dots P_{k-1}$ schon konstruiert

$$P_k - x P_{k-1} = \sum_{j=0}^{k-1} d_j P_j$$

$$d_j = \frac{\langle P_k - x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle} \quad ; \quad j = 0 \dots k-1$$

$$= \frac{\langle x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

$$= - \frac{\langle P_{k-1}, x P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

$$d_0 = d_1 = \dots = d_{k-2} = 0$$

$$d_{k-2} = - \frac{\langle x P_{k-1}, P_{k-2} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle} \stackrel{(\square)}{=} b_k \frac{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle} = b_k$$

$$d_{k-1} = - \frac{\langle P_{k-1}, x P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle} \stackrel{(\square)}{=} \frac{1}{a_k} \frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle} = a_k$$

$$\Rightarrow P_k - x P_{k-1} = \sum_{j=k-2}^{k-1} d_j P_j = b_k P_{k-2} + a_k P_{k-1}$$

$\Rightarrow \square$

q.e.d.

Rekursion braucht 2 Startwerte $P_0, P_1(x)$

Lösungen hängen linear von diesen Startwerten ab

\rightarrow Lösungen bilden einen 2-dimensionalen Raum

Eine Drei-Terme-Rekursion liefert \geq unabhängige Lösungen

Stabilität:

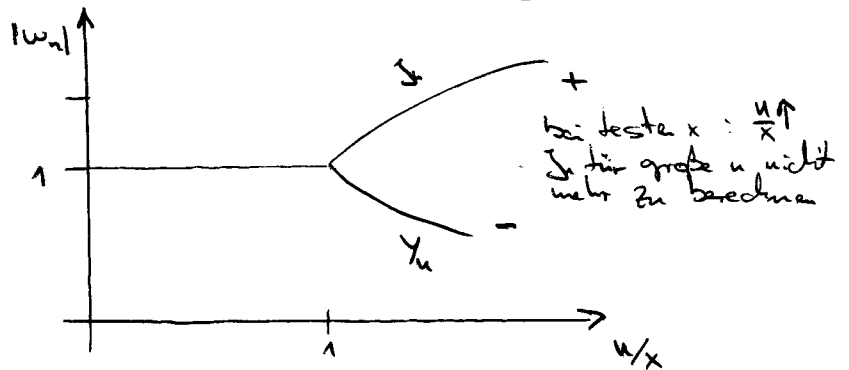
Bessel: Setze $z_n = w^n$ ein

$$w^2 - 2 \frac{u}{x} w + 1 = 0$$

$$\rightarrow w_{\pm} = \frac{u}{x} \pm \sqrt{\left(\frac{u}{x}\right)^2 - 1}$$

2 Lösungen

Stabilität bei
Vorwärtsiteration wenn
 $|w| \leq 1$



Chebyshev: $z_n = w^n$:

$$w^2 - 2xw + 1 = 0 \rightarrow w_{\pm} = x \pm \sqrt{x^2 - 1} ; -1 \leq x \leq 1$$

$$|w_{\pm}| = 1$$

\rightarrow beide Lösungen stabil

Legendre: Im Limes $n \rightarrow \infty \approx$ Chebyshev

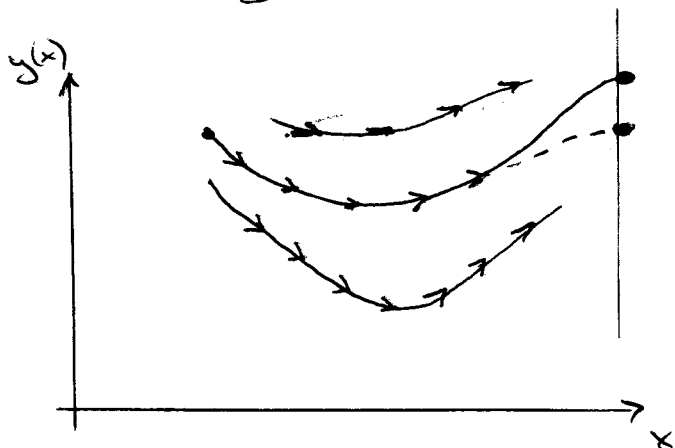
\rightarrow beide Lösungen stabil

gewöhnliche Differentialgleichungen

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad ; \quad y(x_0) = y_0$$

Anfangswert

Strömungsdiagramm



Rundungsfehler führen zur Abweichung von der Flusslinie

Beispiel: $\frac{dy}{dx} = \frac{1}{4}xy - 1$

$$\Rightarrow y(x) - y_0 = \int_{x_0}^x dx' f(x', y(x'))$$

$$x = x_0 + h \quad , \quad h = \text{Schrittweite}$$

$$y(x_0 + h) = y_0 + h f(x_0, y(x_0)) + o(h^2)$$

$\underbrace{\quad}_{:= f}$ Tangenten-
steigung im
Ausgangspunkt

↳ "einfaches Eulersches Verfahren"

Polynom: $y_{n+1} = y_n + h f_n \quad ; \quad f_n = f(x_n, y_n)$

Einschrittverfahren: Näherung y_{n+1} am neuen Punkt

$x_{n+1} = x_n + h$ wird allein aus der Näherung y_n an
den Stellen x_n und Schrittweite h berechnet

$$y(x_0+h) = y(x_0) + h \frac{f_0 + f(x_0+h, y(x_0+h))}{2} + o(h^3)$$

Polygonzug: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1}) + o(h^3)$ (□)

Näherung rekurs: $y(x_0+h) = y_0 + h f_0$

$$\rightarrow \boxed{y(x_0+h) = y(x_0) + \frac{h}{2} [f_0 + f(x_0+h, y_0 + h f_0)]}$$

verbessertes Eulersches Verfahren

□ ist Pendant zu Trapezregel.

geg. Simpson'sche Regel: $\int_a^b dx f(x) = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) + o(h^5)$

hier:

$$\boxed{y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3} (f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2}) + o(h^5)}$$

Runge-Kutta-Verfahren

$$y_{n+1} = y(x_{n+1}) \stackrel{\text{(Taylor)}}{=} y_n + h f_n + \frac{h^2}{2} \left(\underbrace{f_{n,x_n}}_{\frac{\partial f_n}{\partial x_n}} + f_n \underbrace{f_{n,y_n}}_{\frac{\partial f_n}{\partial y_n}} \right) + o(h^3)$$

$f_n = f(x_n, y_n)$

$$\stackrel{!}{=} y_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 \quad (2. \text{ Ordnung})$$

$$k_1 \equiv h f_n = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 \equiv h f(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1)$$

$$k_2 \stackrel{\text{Taylor}}{\approx} h f_n + a_2 h^2 f_{n,x_n} + h b_{21} k_1 f_{n,y_n}$$

Vergleich: $h f_n + \frac{h^2}{2} (f_{n,x_n} + f_n f_{n,y_n}) \stackrel{!}{=} h (c_1 + c_2) \overset{f_n}{\overset{!}{\uparrow}} + h^2 c_2 \cdot (a_2 f_{n,x_n} + b_{21} f_n f_{n,y_n})$

$$c_1 + c_2 = 1, \quad a_2 = b_{21} \overset{!}{=} 1, \quad c_2 a_2 = \frac{1}{2}$$

$$i) \quad c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_2 = b_{21} = 1 :$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) + O(h^3)$$

(verb. Eulersches Verfahren)

$$k_1 = h f_n$$

$$k_2 = h f(x_n + h, y_n + k_1)$$

$$ii) \quad c_1 = 0, \quad c_2 = 1, \quad a_2 = b_2 = \frac{1}{2} :$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2$$

$$k_1 = h f_n$$

$$k_2 = h f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

Beliebteste Integrationsmethode :

Runge-Kutta-Verfahren vierte Ordnung

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5)$$

$$k_1 = h f_n$$

$$k_2 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})$$

$$k_3 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})$$

$$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3)$$

14.12.06

Vereinfachung: $f = f(x)$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} [f(x_n) + 4f(x_n + \frac{h}{2}) + f(x_n + h)]$$

$$\stackrel{h=2h}{=} y_n + \frac{h}{3} [f(x_n) + 4f(x_n + h) + f(x_n + 2h)]$$

(Simpsonsche $\frac{1}{3}$ -Regel)

Schrittweitensteuerung, Adaptive Schrittweite

Schrittweite vergrößern oder verkleinern, wo es angebracht ist:

Verwende Schrittweite h und $\frac{h}{2}$ und vergleiche die beiden Ergebnisse miteinander - ist der Unterschied klein, dann wird vermutlich auch der Fehler klein sein.

→ Ist Fehler größer als zulässig: halbiere Schrittweite

→ Ist Fehler klein (unter vorgegebenen Wert): verdopple Schrittweite

19.12.06

Fourier - Transformation

Entwicklung nach orthogonalen Funktionen

Betrachte: vollständiger Satz von Funktion $\psi_n(x)$
auf dem Intervall $[a: b]$

Orthogonal:
$$\int_a^b dx \psi_n(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}$$

beliebige Funktion lässt sich in eine Reihe nach ψ_n entwickeln:

$$f(x) = \sum_n a_n \psi_n(x)$$

$$\begin{aligned} \int_a^b dx \psi_n^* f(x) &= \sum_m a_m \underbrace{\int_a^b dx \psi_n^* \psi_m}_{=\delta_{nm}} \\ &= a_n \end{aligned}$$

Vollständigkeitsrelation:
$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x-x')$$

Fourierentwicklung

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \cdot e^{i \cdot 2\pi n x / L}$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx f(x) e^{-i \cdot 2\pi n x / L}$$

$$c_0 = \frac{a_0}{2}$$

$$c_n = \frac{1}{2} (a_n - i b_n)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2\pi n}{L} \rightarrow k$$

$$\frac{2\pi \overset{=1}{\Delta n}}{L} = \Delta k$$

$$\sum_n \Delta n \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk$$

$$\Rightarrow f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f(k) \cdot e^{+ikx}$$

komplexe Darstellung

$$f(t) = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n e^{-i\omega_n t}$$

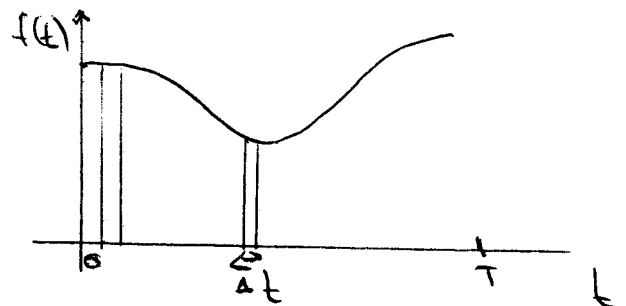
$$c_n = \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) e^{i\omega_n t}$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{i\omega_n t}$$

$$f_n \equiv f(t_n) = f(n \cdot \Delta t)$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{i\omega_n (m \Delta t)}$$

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{T}, \text{ Intervall } [0, T]$$



$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{-i\omega_n t} \quad ; \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{T}$$

$$c_n = \sum_{m=0}^{N-1} f_m \cdot e^{i2\pi n m / N}$$

diskrete Fouriertransformierte
(DFT)

N bekannte Größen : f_m , $m = 0 \dots (N-1)$

können Transformierte nur für N Frequenzen berechnen

Betrachte:

$$\sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{-i2\pi n m / N} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m'=0}^{N-1} f_{m'} \cdot e^{-i2\pi n (m-m') / N}$$

$$= N \cdot \delta_{mm'} \quad (\square)$$

$$= N \cdot f_m$$

$$\rightarrow f_m = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{-i2\pi n m / N}$$

Beweis von (\square) :

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{-i2\pi n (m-m') / N} = \sum_{n=0}^{N-1} r^n, \quad r = e^{-i2\pi (m-m') / N}$$

$$= \begin{cases} N & , \quad m = m' \\ 1 + r + r^2 + \dots + r^{N-1} & = \frac{1-r^N}{1-r} \\ & = \frac{1-1}{1-r} \\ & = 0 \end{cases}$$

$$= 0 \quad ; \quad m \neq m'$$

Aufwand : $\underset{\substack{\uparrow \\ c_n}}{N} \times \underset{\substack{\uparrow \\ n=0,1,\dots,N-1}}{N} = N^2 \text{ Operationen}$

nicht durchführbar für große N !

Fast - Fourier - Transform

$$C_n = \sum_{m=0}^{N-1} f_m e^{i2\pi nm/N}$$

$$= \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} \cdot e^{i2\pi n(2m)/N} + \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m+1} e^{i2\pi n(2m+1)/N}$$

\uparrow DFT mit halb
so vielen Punkten

\uparrow mit geradem N
idem.

$$(1) \quad C_n = \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^n \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n ; \quad \omega = e^{i2\pi/N}$$

$$(2) \quad C_{n+N/2} = \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^{n+N/2} \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^{n+N/2}$$

jetzt: $n=0, 1, \dots, N/2-1$

$$(\omega^{2m})^{n+N/2} = (\omega^{2m})^n \cdot \underbrace{\omega^{2m \cdot N/2}}_{=1} = (\omega^{2m})^n$$

$$\omega^{n+N/2} = \omega^n \cdot \omega^{N/2} = -\omega^n$$

→ umschreiben

$$(2^*) \quad C_{n+N/2} = \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n - \omega^n \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n$$

$$C_n = C_n^{(e)} + \omega^n C_n^{(o)}$$

$$C_{n+N/2} = C_n^{(e)} - \omega^n C_n^{(o)}$$

$$n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$$

$$C_n^{(e)} = \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} [f_{4m}(\omega^{4m})^n + f_{4m+2}(\omega^{4m+2})^n]$$

$$= \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} [f_{4m}(\omega^{4m})^n + \omega^{2n} f_{4m+2}(\omega^{4m})^n] \quad \text{ist f. } n=0 \dots \frac{1}{2}N/2-1$$

$$C_{n+\frac{1}{2}N/2}^{(e)} = \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} [f_{4m}(\omega^{4m})^{n+\frac{1}{2}N/2} + f_{4m+2}(\omega^{4m+2})^{n+\frac{1}{2}N/2}]$$

$$= \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} [f_{4m}(\omega^{4m})^n - \omega^{2n} f_{4m+2}(\omega^{4m})^n]$$

...

usw. (divide & conquer)

Aufwand : $T(N) = \frac{N}{2} \log_2(N)$

$$C_0 = f_0 + f_2 + f_1 + f_3$$

$$C_1 = f_0 - f_2 + \omega(f_1 - f_3)$$

$$C_2 = f_0 + f_2 - (f_1 + f_3)$$

$$C_3 = (f_0 - f_2) - \omega(f_1 - f_3)$$

$$C_4 = \dots$$

vgl. $C_n = \sum_{m=0}^3 f_m e^{i2\pi nm/4}$

9.1.07

DFT : $f_n = \frac{1}{N} \cdot \sum_{m=0}^{N-1} c_m e^{-j2\pi nm/N}$

$$\operatorname{Re}(c_n) = \sum \left[\operatorname{Re}(f_m) \cos\left(\frac{2\pi n}{N} m\right) - \operatorname{Im}(f_m) \sin\left(\frac{2\pi n}{N} m\right) \right]$$

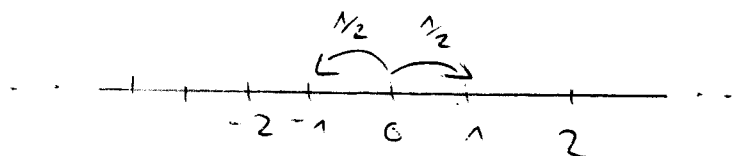
$$\operatorname{Im}(c_n) = \sum \operatorname{Im}(f_m) \cos\left(\frac{2\pi n}{N} m\right) + \operatorname{Re}(f_m) \sin\left(\frac{2\pi n}{N} m\right)$$

FFT

$$c_n = \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n, \quad n=0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$$

$\omega = e^{j2\pi/N}$

$$c_{n+\frac{N}{2}} = \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n - \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n$$

Zufallsbewegung (1D)

Gitterabstand

gesucht:

$P_n(0 \rightarrow j)$: Wahrscheinlichkeit, dass der RW sich nach n Schritten am j -Gitterpunkt befindet

Rekursionsrelation:

$$P_n(0 \rightarrow j) = \frac{1}{2} [P_{n-1}(0 \rightarrow j-1) + P_{n-1}(0 \rightarrow j+1)]$$

mit $P_0(0 \rightarrow j) = \delta_{j,0}$

$$\begin{aligned} \text{Lösung: } P_n(0 \rightarrow j) &= \frac{n!}{2^n} \frac{1}{\left(\frac{n-j}{2}\right)! \left(\frac{n+j}{2}\right)!} \\ &= \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{n+j}{2}} \end{aligned}$$

für $|j| < n$, $n+j$ gerade

$$\text{Für } n \gg 1 \quad n! \approx \sqrt{2\pi} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$$

$$\left(\frac{n-j}{2}\right)! \approx \sqrt{2\pi} \left(\frac{n-j}{2}\right)^{\frac{n-j}{2}+\frac{1}{2}} e^{-(n-j)/2}$$

$$P_n(0 \rightarrow j) \approx \frac{1}{2^n} \sqrt{2\pi} n^{1/2} e^{-x} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{+(n-j)/2}}{\left(\frac{n-j}{2}\right)^{\frac{n-j}{2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{+(n+j)/2}}{\left(\frac{n+j}{2}\right)^{\frac{n+j}{2}}}$$

$$\approx \frac{n^{1/2}}{2^n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2^{\frac{n-j}{2} + \frac{n+j}{2}}}{(n-j)^{\frac{n-j}{2}} (n+j)^{\frac{n+j}{2}}}$$

$$P_n(0 \rightarrow j) \approx n^{n+1/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-z} \quad ; \quad z = \frac{n-j+1}{2} \ln(n-j) + \frac{n+j+1}{2} \ln(n+j)$$

\uparrow
 $a^b = e^{b \ln a}$

$$= n^{n+1/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-j^2/2n}$$

$$P_n(0 \rightarrow j) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi n}} e^{-j^2/2n}$$

ungewöhnlich normierte
Gauß-Verteilung

Normierung

Es muss gelten: $\sum_j P_n(0 \rightarrow j) = 1$, $n+j$ gerade
 $\rightarrow \Delta j = 2 \quad |j| \leq n$

$$\rightarrow \frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta j P_n(0 \rightarrow j) = 1$$

Übergang zum Kontinuum ($a \downarrow$) $x = j \cdot a$

$$P_{n+1}(0 \rightarrow x) = \frac{1}{2} (P_n(0 \rightarrow x+a) + P_n(0 \rightarrow x-a))$$

$$P_n(0 \rightarrow x+a) = P_n(0 \rightarrow x) + a P'_n(0 \rightarrow x) + \frac{1}{2} a^2 P''_n(x) + \dots$$

$$P_{n+1}(0 \rightarrow x) = P_n(0 \rightarrow x) + \frac{\partial P_n(0 \rightarrow x)}{\partial n} + \dots$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial P_n}{\partial n} = \frac{1}{2} a^2 P''_n}$$

Diffusionsgleichung

Lösung für $P_n = \frac{P_n}{a}$

$$P_n(0 \rightarrow x) = \left(\frac{1}{2\pi n a^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{x^2}{n \cdot a^2} \right]$$

$$n a^2 \rightarrow \text{const}$$

RW in D-dim.

- Pseudocode:

```
while l < n {  
    Ziehe nächsten Nachbarn  $\in \{1, 2, \dots, 2d\}$   
    gehe dahin  
    l++  
}
```

- Rekursionsrelation: $P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \frac{1}{2d} \sum_{\pm \hat{e}} P_{n-1}(\vec{x} + a\hat{e} \rightarrow \vec{x}')$
 \hat{e} : Einheitsvektor in i -Richtung
mit $P_0(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \delta_{\vec{x}\vec{x}'}$

- Subtrahiere:

$$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') - P_{n-1}(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \frac{1}{2d} \sum_{\pm \hat{e}} [P_{n-1}(\vec{x} + a\hat{e} \rightarrow \vec{x}') - P_{n-1}(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')] = 0$$

Limes $a \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$

$$\frac{\partial}{\partial n} P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \frac{a^2}{2d} \nabla^2 P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')$$

\rightarrow hier: $n-1 \approx n$

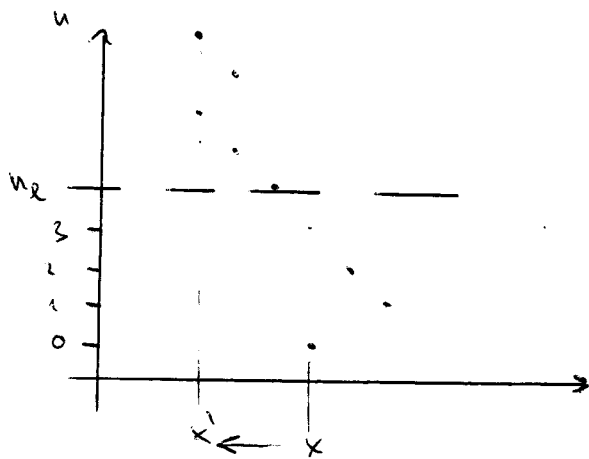
- 3-Punkte-Ausdruck:

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = f''(x) = \frac{f(x+a) - 2f(x) + f(x-a)}{a^2} + O(a^2)$$

- Lösung für $P_n = \frac{P_n}{a^d}$ \rightarrow

$$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \left(\frac{d}{2\pi n a^2} \right)^{d/2} \exp \left[-\frac{d}{2} \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|^2}{n a^2} \right]$$

Gaußsche Verteilung



$$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') =$$

$$\int d^d x_e P_{n_e}(\vec{x} \rightarrow \vec{x}_e) \cdot P_{n-n_e}(\vec{x}_e \rightarrow \vec{x}')$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung:
Zwischenstop ist möglich

16.1.07

Beweisansatz der Chapman-Kolmogorov-Gleichung:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} d^d x_e e^{-c_1(\vec{x} - \vec{x}_e)^2} \cdot e^{-c_2(\vec{x}_e - \vec{x}')^2} \\ &= \frac{\pi}{(c_1 + c_2)^{d/2}} e^{-\frac{c_1 c_2}{c_1 + c_2}(\vec{x} - \vec{x}')^2} \quad (\text{ Gauß }) \end{aligned}$$

Die Schritte lassen sich beliebig aufspalten, bis nur noch Einzelschritte gemacht werden

$$\Rightarrow P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \left[\prod_{\ell=1}^{n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} d^d x_\ell P_1(\vec{x}_{\ell-1} \rightarrow \vec{x}_\ell) \right] P_1(\vec{x}_{n-1} \rightarrow \vec{x}')$$

$$= \underbrace{\left[\prod_{\ell=1}^{n-1} \left(\frac{d}{2\pi a^2} \right)^{d/2} \int d^d x_\ell \right] \frac{d^{d/2}}{2\pi a^2}}_{= \int D\vec{x}} \exp \left[-\frac{d}{2} \sum_{\ell=1}^{n-1} \frac{(\vec{x}_{\ell-1} - \vec{x}_\ell)^2}{a^2} \right] \cdot \exp \left[-\frac{d}{2} \frac{(\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})^2}{a^2} \right]$$

$$= \int D\vec{x} \exp \left[-\frac{d}{2} \sum_{\ell=1}^n \frac{(\vec{x}_{\ell-1} - \vec{x}_\ell)^2}{a^2} \right]$$

$$\frac{d}{2} \sum_{l=1}^n \frac{(\vec{x}_{l-1} - \vec{x}_l)^2}{a^2} = \frac{1}{4} \sum_{l=1}^n \frac{a^2}{2d} \frac{(\vec{x}_l - \vec{x}_{l-1})^2}{(a^2/2d)^2}$$

definiere : $S := \frac{a^2}{2d} l$ $\Delta S = \frac{a^2}{2d} \Delta l$

$$\dots = \frac{1}{4} \int_0^S ds \dot{\vec{x}}^2(s) \quad , \quad \dot{\vec{x}} = \frac{d\vec{x}}{ds}$$

$$S_n = \frac{a^2}{2d} n \rightarrow \text{kont.}$$

$$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \int D\vec{x} \exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \dot{\vec{x}}^2(s) \right]$$

Wiener'sches
Integral

Integraldarstellung der Diffusions-
gleichung

$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')$: als Summe über alle möglichen Pfade von
 \vec{x} nach \vec{x}'

Jeder Pfad ist gewichtet mit einem Faktor

$$\exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \dot{\vec{x}}^2 \right]$$

lange Pfade : $\dot{\vec{x}}$ groß \rightarrow exponentiell
unterdrückt

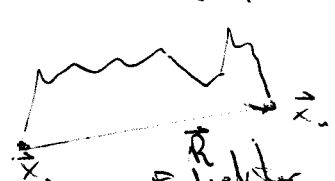
brauchen nicht berücksichtigt werden

$$P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \sum_{\text{Pfade}} e^{-S_0} \quad , \quad S_0 = \frac{1}{4} \int_0^S ds \dot{\vec{x}}^2$$

Schreibe : $P_n(\vec{R}) = P_n(\vec{x} - \vec{x}') = \left[\frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \int d\vec{x}_l P_1(\vec{x}_l) \right] P_1(\vec{x}_n)$

\uparrow
 $\vec{R} = \vec{x}' - \vec{x} = \vec{x}_n - \vec{x}_1$

\uparrow
 $\vec{x}_n = \vec{x}_2 \quad \vec{x}_{n-1}$



$$P_n(\vec{R}) = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \int d\vec{x}_l P_1(\vec{x}_l) S(\vec{R} - \sum_{l=1}^n \vec{x}_l) = \left(\frac{d}{2\pi n a^2} \right)^{d/2} e^{-\frac{d}{2n a^2} \vec{R}^2}$$

Endabstandsverteilung

Gyrationradius

zuerst: $\langle \vec{R}^2 \rangle_n = \int d\vec{R} \vec{R}^2 P_n(\vec{R})$

$$= \left(\frac{d}{2\pi n a^2} \right)^{\frac{d}{2}} \Omega_d \int_0^\infty dR R^{d+1}$$

\hookrightarrow Kugeloberfläche $\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$

$$= n a^2 \quad (*)$$

$$= \begin{cases} 2\pi & , d=2 \\ 4\pi & , d=3 \\ \frac{2\pi^2}{3} & , d=4 \end{cases}$$

Gyrationradius R_n^2 (nicht zusammenhängend mit \vec{R} o. ä.)

$$R_n^2 := \frac{1}{n} \sum_{l,m=1}^n \langle (\vec{x}_l - \vec{x}_m)^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2n^2} \sum_{l,m=1}^n \langle (\vec{x}_l - \vec{x}_m)^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2n^2} \sum_{l,m=1}^n |l-m| a^2$$

$$= \frac{1}{2n^2} \int_0^n dl \int_0^n dm |l-m| a^2$$

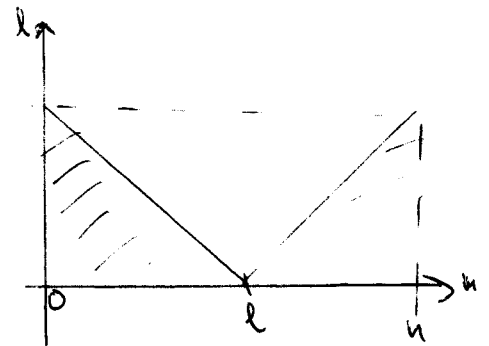
$$= \frac{1}{n^2} \int_0^n dl \int_0^l dm (l-m) a^2$$

$$= \frac{1}{6n^2} a^2 \cdot n^3$$

$$= \frac{1}{6} n a^2$$

Schwerpunkt:

$$\vec{x} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \vec{x}_l$$

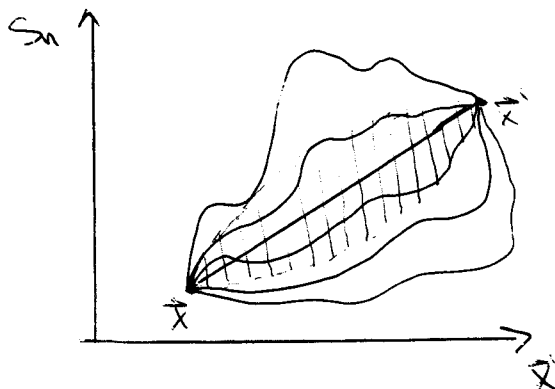


$$R_n \sim n^{1/2}$$

verallgemeinert:

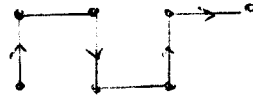
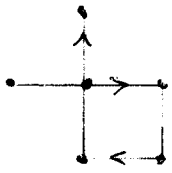
$$R_n \sim n^{1/D}$$

D. Hausdorff-fraktale-Dimension



exponentielle Unterdückung!

Selbstmeidende Zufallsbewegungen (SAW)



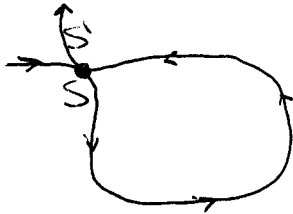
Brownsche Zufallsbewegung: keine Beschränkung

Edwardsches Modell (Kontinuum):

Für $P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \int D\vec{x} \exp[-S_0]_{\vec{x} \rightarrow \vec{x}'} \quad , \quad S_0 = \frac{1}{4} \int_0^{s_n} ds \dot{\vec{x}}^2(s)$
(S.O.)

$$S = S_0 + \gamma \int_0^{s_n} ds \int_0^{s_n} ds' \delta(\vec{x}(s) - \vec{x}(s')) \quad , \quad s \neq s'$$

Zusatzterm



Knoten tragen jetzt ein Gewicht $e^{-\gamma}$

Dies wirkt sich auch auf die fraktale Dimension aus (nach Flory):

$$S \sim n \frac{R_n^2}{n^2} + \gamma n^2 \cdot \frac{1}{R_n^d}$$

$$\frac{\partial S}{\partial R_n} \stackrel{!}{=} 0 \quad : \quad \frac{R_n}{n} - \gamma \frac{n^2}{R_n^d} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{R_n^{d+2} \sim \gamma n^3}$$

$$R_n \sim n^{3/(d+2)}$$

$$\Rightarrow \boxed{D = \frac{d+2}{3}}$$

zeitabhängige SG : $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t) \quad (*)$

Entwicklung nach Basisvektoren $u_n(\vec{x})$:

$$\hat{H} u_n(\vec{x}) = E_n u_n(\vec{x})$$

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n u_n e^{-i E_n t / \hbar}$$

Entwicklungskoeffizienten : $c_n = \int d\vec{x} u_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, 0)$

Benutzt : $\int d\vec{x} u_n^*(\vec{x}) u_m(\vec{x}) = \delta_{n,m}$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_n \int d\vec{x}' u_n^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}', 0) e^{-i E_n t / \hbar} u_n(\vec{x}) \\ &= \int d\vec{x}' k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0) \psi(\vec{x}', 0) \end{aligned}$$

$$k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0) = \sum_n u_n(\vec{x}) e^{-i E_n t / \hbar} u_n^*(\vec{x}')$$

k ist der Zeitentwicklungsoperator
("Propagator")

$$(*) \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0) = \hat{H} k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0)$$

imaginäre Zeit $t = -i\tau$ ($\hat{H} = \hat{H}_0$)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} k(\vec{x}, \tau \leftarrow \vec{x}', 0) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 k(\vec{x}, \tau \leftarrow \vec{x}', 0)} \quad (**)$$

vgl. Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P_n(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \frac{\sigma^2}{2d} \nabla^2 P_n(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$S = \frac{\sigma^2}{2d} u : \boxed{\frac{\partial}{\partial S} P_S(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') = \nabla^2 P_S(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')} \quad (***)$$

$$\rightarrow S \hat{=} \frac{\hbar}{2m} \tau$$

Die Bogenlänge entspricht der Newtonschen Zeit
 $\frac{\hbar}{2m} \tau$

Formale Lösung von (**): (wieder mit vollem \hat{A})

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

Amplitude für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle$$

Schrödinger-
bild

Heisenbergbild

Zeitgitterung:

$$= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t_{n-1}) \hat{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots \dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t) | \vec{x} \rangle$$

Unternimm in Integraldarstellung (analog zum RW):

Dabei wird genutzt, dass $1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|$,

$$\langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

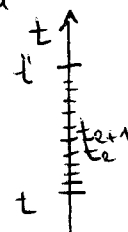
Dies wird eingeschrieben in

$$\langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t_{n-1}) \underset{1}{\uparrow} \hat{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \underset{1}{\uparrow} \dots \underset{1}{\uparrow} \hat{U}(t_1, t) | \vec{x} \rangle$$

$n-1$ Einschiebe

$$\Rightarrow \langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \left(\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_k \right) \frac{1}{\pi} \langle \vec{x}_k, t_k | \vec{x}_{k-1}, t_{k-1} \rangle$$

$$\text{mit: } \vec{x}_0 = \vec{x}, \quad t_0 = t \\ \vec{x}_n = \vec{x}', \quad t_n = t'$$



$$\epsilon = t_k - t_{k-1} \\ = \frac{t - t'}{n}$$

Volle Rechnung analog zu Chapman - Homogener -
Betrachtung beim RW

$$\langle \vec{x}_n, t_n | \vec{x}_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \langle \vec{x}_n | e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | \vec{x}_{n-1} \rangle$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$1 = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|, \quad \langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = (2\pi)^d \delta(\vec{k} - \vec{k}')$$

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = e^{-i\vec{k}\vec{x}} = \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle^*$$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \psi \rangle \\ &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}\vec{x}} \psi(\vec{k}) \end{aligned} \quad \text{IFT}$$

$$\epsilon \text{ klein: } e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} \hat{H}} \approx e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} \hat{V}} e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} \hat{T}} \cdot e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} \frac{1}{2} [\hat{V}, \hat{T}]} \quad \leftarrow \text{(Baker-Hausdorff)}$$

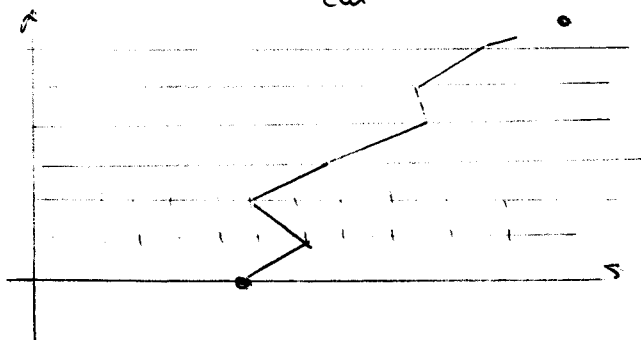
[...]

$\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}}$

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle \rightarrow \int D\vec{x}(t) e^{i/\hbar S[\vec{x}(t)]}$$

$$S[\vec{x}(t)] = \int_{t_0}^{t_1} d\vec{E} \left[\frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2(\vec{E}) - V(\vec{x}(\vec{E})) \right]$$

verg. $S \hat{=} \frac{i\hbar}{2m} t$



Gerichtung der versch.
Pfade mit der
Wirkung $e^{i/\hbar S}$

30. 1. 07

Numerische Umsetzung: Metropolis-Methode

$$k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0) = \sum_n u_n(\vec{x}) \cdot e^{-E_n t / \hbar} u_n^*(\vec{x}') \quad 1)$$

$$\xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} u_0(\vec{x}) u_0^*(\vec{x}') e^{-E_0 \tau / \hbar}$$

$$k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}, 0) \longrightarrow |u_0(\vec{x})|^2 e^{-E_0 \tau / \hbar}$$

$$\text{Schätz } k(\vec{x}, \tau \leftarrow \vec{x}, 0) \longrightarrow e^{-E_0 \tau / \hbar}$$

$$\Rightarrow |u_0(\vec{x})|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{k(\vec{x}, \tau \leftarrow \vec{x}, 0)}{\text{Schätz } k(\vec{x}, \tau \leftarrow \vec{x}, 0)}$$

$$|u_0(\vec{x})|^2 = \frac{\left[\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int d\vec{x}_l \right] \exp \left\{ - \frac{E_1}{\hbar} \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{x}_l - \vec{x}_{l-1}}{\varepsilon'} \right)^2 + V(\vec{x}_l) \right] \right\}}{\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int d\vec{x}_l \exp \left\{ - \frac{E_1}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{x}_l - \vec{x}_{l-1}}{\varepsilon'} \right)^2 + V(\vec{x}_l) \right] \right\}}$$

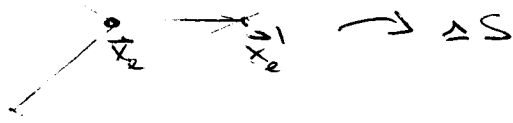
$$\begin{array}{l|l} t = -i\tau & \\ \Delta t = -i\Delta\tau & \\ \varepsilon & \varepsilon' \\ \vec{x}_0 & = \vec{x} \\ \vec{x}_N & = \vec{x} \end{array} \quad \begin{array}{l} = \frac{1}{Z} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int d\vec{x}_l e^{-\frac{E_1}{\hbar} S} \\ S = \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{\vec{x}_l - \vec{x}_{l-1}}{\varepsilon'} \right)^2 + V(\vec{x}_l) \right] \\ Z = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int d\vec{x}_l e^{-\frac{E_1}{\hbar} S} \right] \end{array}$$

$$|u_0(\vec{x})|^2 = \frac{1}{Z} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int d\vec{x}_l \right] \delta(\vec{x}_0 - \vec{x}) e^{-\frac{E_1}{\hbar} S}$$

Idee: $\frac{e^{-\frac{E_1}{\hbar} S}}{Z} = P(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N-1})$ Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Werte \vec{x}_l der Atome

1) aus $k(\vec{x}, t \leftarrow \vec{x}', 0) = \sum_n u_n(\vec{x}) \cdot e^{-iE_n t / \hbar} u_n^*(\vec{x}')$ mit $\tau := +it$

- Frage mit einem willkürlichen Pfad $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$ an
- Wie gelangen wir ins Gleichgewicht?



$$P(x, i+1) = P(x, i) + \sum_{x'} [P(x', i) W(x' \rightarrow x) - P(x, i) W(x \rightarrow x')]$$

↑ Zustand nach i Iterationen

Gleichgewicht: $P(x, i+1) = P(x, i) = P_g(x)$

→ "detailed balance":

$$P_g(x) W(x \rightarrow x') = P_g(x') W(x' \rightarrow x)$$

$$\frac{W(x \rightarrow x')}{W(x' \rightarrow x)} = \frac{P_g(x')}{P_g(x)} = \frac{e^{-\frac{E'}{k_B T}}}{e^{-\frac{E}{k_B T}}} = e^{-\frac{E' - E}{k_B T}} = e^{-\frac{\Delta S}{k_B T}}$$

Wähle $\begin{cases} W(x' \rightarrow x) = 1 & \text{wenn } W(x \rightarrow x') > W(x' \rightarrow x) \\ W(x \rightarrow x') = 1 & \text{sonst} \end{cases}$

$$W(x \rightarrow x') = \begin{cases} e^{-\frac{\Delta S}{k_B T}} & \Delta S > 0 \leftarrow \text{qu-Fluktuationen} \\ 1 & \Delta S < 0 \leftarrow \text{klassisch} \end{cases}$$

Sind wenn die Wirkung positiv (energetisch ungünstig) gibt es noch eine Wahrscheinlichkeit für den Vorgang

Metropolis - Pseudocode:

while ($i < MCI$) {

$MCI =$ Anzahl der MC-Schritte

wähle willkürlich ein Atom, setze

$$\vec{x}_2 \rightarrow \vec{x}_2' = \vec{x}_2 + (2 \cdot r - 1) \Delta \quad ; \quad r = \text{Zufallsz. } [0, 1)$$

und berechne ΔS

$\Delta =$ max. zugelassene Auslenkung (Param)
muss geschickt gewählt werden (50% sollte akzeptiert werden)

wenn $\Delta S < 0$: akzeptiere

wenn $\Delta S > 0$: Ziehe Zufallszahl r' und
akzeptiere Vorschlag wenn
 $r' < e^{-\frac{\Delta S}{k_B T}}$

wenn akzeptiert:

$$h(j')++$$

\vec{x}_2' in j' -bin

sonst

$$h(j)++$$

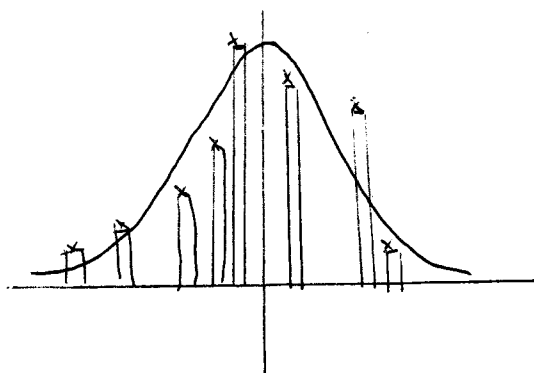
\vec{x}_2 in j -bin

$i++$

}

$$|u(\vec{x})|^2 = \frac{1}{\Delta x} \cdot \frac{1}{MCI} h(j)$$

: \vec{x} in j -bin



Ergebnisse folgen statistisch
der Ergebnisziefunktion

Perkolationsstheorie

Clusterverteilung: $n_s \sim S^{-\tau} e^{-\beta_s}$; $\beta_s \propto |p - p_c|^{1/\sigma}$

\uparrow Entropiefaktor \uparrow Boltzmannfaktor

n_s : Anzahl von Clustern mit s besetzten Gitterpunkten
pro Gitterpunkt

System wird charakterisiert durch die Parameter τ
und σ

p : Wahrscheinlichkeit, dass ein Gitterpunkt besetzt
ist (Konzentration)

Interessant:

• mittlere Clustergröße: $S = \frac{\sum' s^2 n_s}{\sum' s n_s}$; \sum' : perkolierender Cluster ist ausgeschlossen von der Summe

$s \cdot n_s$: Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger
Gitterpunkt zu einem s -Cluster gehört

$\sum' s n_s$: Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger
Gitterpunkt zu irgendeinem endlichen Cluster gehört

$\frac{s n_s}{\sum' s n_s}$: Wahrscheinlichkeit, dass ein besetzter
Gitterpunkt zu einem s -Cluster gehört
 $\rightarrow * S$ (Clustergröße) $\rightarrow \sum'$ mittlere Größe

P : Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger Gitterpunkt
zu einem perkolierenden Cluster

$$P = P + \sum' s n_s$$

In der Nähe von P_c :

- $P \sim (P - P_c)^{\beta}$, $P > P_c$, β : kritischer Exponent

In der Nähe der Perkolationschwelle

$$\begin{aligned}
 P &\sim -\sum_s' s u_s \sim \int_0^{\infty} ds s \cdot s^{-\tau} e^{-\frac{g s}{x}} \\
 &= g^{\tau-2} \int_0^{\infty} dx x^{1-\tau} e^{-x} \\
 &\sim (P - P_c)^{\frac{\tau-2}{\tau}}
 \end{aligned}$$

- $S \sim |P - P_c|^{-\gamma}$

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{\sum_s' s^2 u_s}{\sum_s' s u_s} \sim \frac{\int_0^{\infty} ds s^2 s^{-\tau} e^{-g s}}{\int_0^{\infty} ds s s^{-\tau} e^{-g s}} \\
 &\sim g^{\tau-3} \int_0^{\infty} dx x^{2-\tau} e^{-x} \\
 &\sim |P - P_c|^{\frac{\tau-3}{\tau}}
 \end{aligned}$$

$$\boxed{\gamma = \frac{3-\tau}{\tau}}$$

- $\overset{\text{Zustandssumme}}{\downarrow}$
 $\ln z \propto \sum_s' u_s \sim |P - P_c|^{2-\alpha}$

$$\boxed{2 - \alpha = \frac{\tau-1}{\tau} = 2\beta + \gamma}$$

- Gyrationradius: $R_s^2 = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S |\vec{r}_i - \bar{\vec{r}}|^2$; $\bar{\vec{r}}$: Schwerpunkt
 $\bar{\vec{r}} = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \vec{r}_i$
 $\sim S^{2/D}$

D: Hausdorff- oder fraktale Dimension

$$R_s^2 = \frac{1}{S^2} \sum_{i,j=1}^S |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2$$

$\rightarrow R_s$ mittlerer Abstand zwischen 2 Gitterpunkten in einem S -Cluster

- Korrelationsfunktion: $g(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$: Wahrscheinlichkeit, dass \vec{r}_i und \vec{r}_j zum Cluster gehören

meistens: $g(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$

$$\sum_{\vec{r}_j} g(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \text{mittlere Anzahl der Gitterpunkte die zum Cluster gehören zu dem auch } \vec{r}_i \text{ gehört}$$

$$= S$$

- Korrelationslänge $\xi^2 = \frac{\sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{\sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} g(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}$

mittlerer Abstand zweier Gitterpunkte die zum selben Cluster gehören

$$\xi^2 = \frac{\sum_S R_s^2 S^2 u_S}{\sum_S S^2 u_S}$$

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$$

$$\xi^2 \sim \frac{\sum_s s^{2/D} s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s}$$

$$\sim \sigma^{-2/D} \sim |p - p_c|^{-\frac{2}{\sigma D}}$$

$$\boxed{\nu = \frac{1}{\sigma D}}$$

• Potenzgesetz: $g(|\vec{x}|) \sim |\vec{x}|^{-(d-2+\eta)} e^{-|\vec{x}|/\xi}$

$$\hat{S} = \sum_{\vec{x}} g(|\vec{x}|)$$

$$|p - p_c|^{-\gamma} \approx \sum_{\vec{x}} \frac{e^{-|\vec{x}|/\xi}}{|\vec{x}|^{d-2+\eta}}$$

$$\sim \xi^{d-(d-2+\eta)}$$

$$\sim \xi^{2-\eta}$$

$$; \xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$$

$$\sim |p - p_c|^{-2+\eta/\nu}$$

$$\rightarrow \boxed{|\gamma - \nu(2-\eta)|}$$

- Hyperscaling: $\ln z \sim \xi^{-d}$ aus Dimensionsbetrachtung
 $\sim |P - P_c|^{d\nu}$
 $\sim |P - P_c|^{2-\alpha}$

$$\Rightarrow \boxed{d\nu = 2 - \alpha}$$

$$\rightarrow \frac{d}{\sigma D} = \frac{\tau - 1}{\sigma}$$

$$\Rightarrow \boxed{\tau = \frac{d}{D} + 1}$$

$$\frac{\beta}{\sigma} = \frac{\tau - 2}{\sigma} \quad \sigma D = \left(\frac{d}{D} - 1\right) D = d - D$$

$$\frac{\gamma}{\sigma} = \frac{3 - \tau}{\sigma} \quad \sigma D = \left(2 - \frac{d}{D}\right) D = 2 - \gamma$$

$$\Rightarrow 2D = d + 2 - \gamma$$

$$\gamma = 0 : \boxed{D = \frac{1}{2}(d + 2)} \quad (\text{de-Geunes, vgl. Flory})$$

Eindimensionales Gitter



$$n_s = p^s (1 - p)^2$$

$$; \quad p < 1$$

\uparrow \uparrow
 s 2
 besetzte unbesetzte

\Rightarrow im unendlichen System
gibt es immer Löcher

$$P_c = 1$$

$$\sum_s s u_s \stackrel{?}{=} p \quad (p = p_c)$$

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} s u_s &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} s p^s \\ &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p \frac{d}{dp} p^s \\ &= (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \sum p^s \\ &= (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right) = p. \quad \checkmark \end{aligned}$$

$$S \stackrel{?}{=} \frac{\sum s^2 u_s}{\sum s u_s} \quad (p < p_c)$$

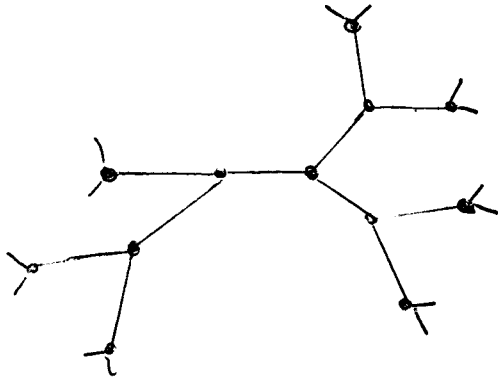
$$= \frac{1}{p} (1-p)^2 \sum s^2 p^s$$

$$= \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum p^s$$

$$= \frac{1+p}{1-p}$$

tatsächlich divergent für $p \rightarrow p_c$ \checkmark

Ball - Gitter



Gitterdimension ist
unendlich
(keine Schichten)

1. Generation: 3 Punkte
2. Generation: 6 Punkte
3. Generation: 12 Punkte

Eine Kugel mit r Generationen enthält

$$V(r) = 1 + 3(1 + 2 + 4 + \dots + 2^{r-1})$$

$$\Rightarrow 1 + 2(1 + (2-1) + \dots + (2-1)^{r-1})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow V(r) &= 1 + 2 \sum_{i=1}^r (2-1)^{i-1} \\ &= 1 + 2 \frac{(2-1)^r - 1}{(2-1) - 1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow V(r) = \frac{2(2-1)^r}{2-2} - \frac{2}{2-2}$$

- die letzte Generation aus $2(2-1)^{r-1}$ Punkte bildet die Oberfläche $S(r)$

$$S(r) = 2(2-1)^{r-1}$$

$$\text{Für große } r: \frac{S(r)}{V(r)} = \frac{2-2}{2-1}$$

Perkulationsquelle:



Im Mittel: $p(2-1)$ neu besetzte
Nachbarn