

Einführung in die Numerik (Potschka)

Robin Heinemann

27. Juni 2017

Inhaltsverzeichnis

0	Einführung	2
1	Fehleranalyse	4
1.1	Zahldarstellung und Rundungsfehler	4
1.2	Konditionierung numerischer Aufgaben	6
1.2.1	Differentielle Fehleranalyse	7
1.2.2	Arithmetische Grundoperationen	10
1.3	Stabilität numerischer Algorithmen	11
2	Interpolation und Approximation	15
2.1	Auswertung von Polynomen und deren Ableitungen	20
2.2	Interpolation von Funktionen	22
2.3	Richardsonsche Extrapolation zum Limes	25
2.4	Spline-Interpolation	27
2.5	Gauß Approximation	29
3	Numerische Integration	32
3.1	Gaußsche Quadraturformeln	36
3.2	Praktische Aspekte der Quadratur	40
4	Lineare Gleichungssystem	41
4.1	Eliminationsverfahren	46
4.2	Nachiteration	51
4.3	Determinantenbestimmung	52
4.4	Rangbestimmung	52
4.5	Spezielle Gleichungssysteme	52
4.5.1	Bandmatrizen	52
4.5.2	Diagonaldominante Matrizen	53
4.5.3	Positiv definite Matrizen	53
4.6	Nicht reguläre Systeme	55
4.7	Singulärwertzerlegung	60

5 Nichtlineare Gleichungen	61
5.1 Intervallschachtelung / Bisektion	61
5.2 Newton-Verfahren im \mathbb{R}^n	61
5.3 Konvergenzverhalten iterativer Mathode (Spezialfall $n = 1$)	62

0 Einführung

Beispiel 0.1 Simulation einer Pendelbewegung

Modellannahmen:

- Masse m an Stange
- keine Reibung
- Stange: Gewicht 0, starr, Länge l
- Auslenkung ϕ

Erste Fehlerquelle: Modellierungsfehler

Modellgleichungen:

$$F_T(\phi) = -m \cdot g \sin \phi$$

Konsistenzcheck:

$$\begin{aligned} F_T(0) &= 0 & (\text{Ruhelage}) \\ F_T\left(\frac{\pi}{2}\right) &= F_G = -mg \end{aligned}$$

Bewegungsgleichungen:

- Weg $s(t)$
- $\frac{ds}{dt} =: v(t)$ Geschwindigkeit
- $\frac{dv}{dt} =: a(t)$ Beschleunigung

Beziehungen:

- Bogenlänge $s(t) = l\phi(t)$
- 2. Newton'sches Gesetz ($F = ma$)

$$-mg \sin \phi(t) = m \frac{d}{dt} v(t) = m \frac{d^2}{dt^2} s(t) = ml \frac{d^2}{dt^2} \phi(t)$$

⇒ DGL 2. Ordnung

$$\frac{d^2}{dt^2} \phi(t) = -\frac{g}{l} \sin \phi(t) \quad t \geq 0$$

Für eindeutige Lösung braucht man zwei Anfangsbedingungen:

$$\phi(0) = \phi_0 \quad \frac{d}{dt} \phi(0) = u_0$$

Lösung bei kleiner Auslenkung: Linearisiere um $\phi = 0$

$$\sin \phi = \phi - \frac{1}{3!} \phi^3 + \dots \approx \phi$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \phi(t) = -\frac{g}{l} \phi(t)$$

Für $u_0 = 0$ findet man mit dem Ansatz $\phi(t) = A \cos(\omega t)$:

$$-\omega^2 A \cos(\omega t) = -\frac{g}{l} A \cos(\omega t)$$

die Lösung:

$$\phi(t) = \phi_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{l}} t\right)$$

Fehlerquelle: Abschneidefehler.

Numerische Lösung:

Setze $u(t) := \frac{d}{dt} \phi(t)$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \phi \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ -\frac{g}{l} \sin(\phi) \end{pmatrix}$$

Approximation mit Differenzenquotienten

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ -\frac{g}{l} \sin \phi(t) \end{pmatrix} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \phi \\ u \end{pmatrix} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} \phi(t + \Delta t) - \phi(t) \\ u(t + \Delta t) - u(t) \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} \phi(t + \Delta t) - \phi(t) \\ u(t + \Delta t) - u(t) \end{pmatrix}$$

↓
> 0, klein

Fehlerquelle: Diskretisierungsfehler

Auf Gitter $t_n = n\Delta t$ mit Werten $\phi_n = \phi(n\Delta t)$, $u_n = u(n\Delta t)$:

$$\phi_{n+1} = \phi_n + \Delta t u_n, u_{n+1} = u_n - \Delta t \frac{g}{l} \phi_n$$

Kleinerer Diskretisierungsfehler mit zentralen Differenzen:

$$-\frac{g}{l} \sin \phi(t) = \frac{d^2}{dt^2} \phi(t) \approx \frac{\phi(t + \Delta t) - 2\phi(t) + \phi(t - \Delta t)}{\Delta t^2}$$

Rekursionsformel:

$$\phi_{n+1} = 2\phi_n - \phi_{n-1} - \Delta t^2 \frac{g}{l} \sin \phi_n, n \geq 1$$

mit $\phi_1 = \phi_0 + \Delta t u_0$ (Expliziter Euler)

Letzte Fehlerquelle: Rundungsfehler

1 Fehleranalyse

1.1 Zahldarstellung und Rundungsfehler

Anforderung: Rechnen mit reellen Zahlen auf dem Computer.

Problem: Speicher endlich (\implies endliche Genauigkeit).

Lösung: Gleitkommazahlen, ein **Kompromiss** zwischen:

- Umfang darstellbarer Zahlen
- Genauigkeit
- Geschwindigkeit einfacher Rechenoperationen (+, -, ·, /)

Alternativen:

- Fixkommazahlen
- logarithmische Zahlen
- Rationalzahlen

Definition 1.1 Eine (normalisierte) Gleitkommazahl zur Basis $b \in \mathbb{N}, b \geq 2$, ist eine Zahl $x \in \mathbb{R}$ der Form

$$x = \pm m \cdot b^{\pm e}$$

mit der Mantisse $m = m_1 b^{-1} + m_2 b^{-2} + \dots \in \mathbb{R}$ und dem Exponenten $e = e_{s-1} b^{s-1} + \dots + e_0 b^0 \in \mathbb{N}$, wobei $m_i, e_i \in \{0, \dots, b-1\}$. Für $x \neq 0$ ist die Darstellung durch die Normierungsvorschrift $m \neq 0$ eindeutig. Für $x = 0$ setzt man $m = 0$.

Beispiel 1.2 ($b = 10$) • m_i : i -te Nachkommastelle der Mantisse

- e : Verschiebt das Komma um e Stellen.

$$0.314 \times 10^1 = 3.14$$

$$0.123 \times 10^6 = 123\,000$$

Auf dem Rechner stehen nur endlich viele Stellen zur Verfügung:

r Ziffern + 1 Vorzeichen für Mantisse m

s Ziffern + 1 Vorzeichen für Exponenten.

Für $x = \pm [m_1 b^{-1} + \dots + m_r b^{-r}] \cdot b^{\pm [e_{s-1} b^{s-1} + \dots + e_0 b^0]}$ muss man also nur $(\pm)[m_1 \dots m_r](\pm)[e_{s-1} \dots e_0]$ abspeichern. Wählt man $b = 2$, so gilt $m_i, e_i \in \{0, 1\}$ und x kann mit $2 + r + s$ Bits gespeichert werden (Maschinenzahlen). Maschinenzahlen bilden das numerische Gleitkommagitter $A = A(b, r, s)$

Beispiel 1.3 ($b = 2, r = 3, s = 1$)

$$m = \frac{1}{2} + m_2 \frac{1}{4} + m_3 \frac{1}{8} \in \left\{ \frac{4}{8}, \frac{5}{8}, \frac{6}{8}, \frac{7}{8} \right\}$$

$$e = e_0 \in \{0, 1\}$$

Da A endlich ist, gibt es eine größte/kleinste darstellbare Zahl:

$$\begin{aligned} x_{\{min/max\}} &= \pm(b-1)[b^{-1} + \dots + b^{-r}] \cdot b^{(b-1)[b^{s-1} + \dots + b^0]} \\ &= \pm(1 - b^{-r}) \cdot b^{(b^s-1)} \end{aligned}$$

sowie eine kleinste positive/größte negative Zahl:

$$\begin{aligned} x_{posmin/negmax} &= \pm b^{-1} \cdot b^{-(b-1)[b^{s-1} + \dots + b^0]} \\ &= b^{-b^s} \end{aligned}$$

Das gängigste Format ist das IEEE-Format, das auch hinter dem Python-Datentyp float steht:

$$x = \pm m \cdot 2^{c-1022}$$

Dieser Datentyp ist 64 Bit (8 Byte) groß (doppelte Genauigkeit, double). Davon speichert 1 Bit das Vorzeichen, 52 Bits die Mantisse $m = 2^{-1} + m_2 2^{-2} + \dots + m_{53} 2^{-53}$ und 11 Bits die Charakteristik $c = c_0 2^0 + \dots + c_{10} 2^{10}$, mit $m_i, c_i \in \{0, 1\}$. Es gibt folgende spezielle Werte:

- Alle $c_i, m_i = 0$: $x = \pm 0$
- Alle $m_i = 0, c_i = 1$: $x = \pm \infty$
- Ein $m_i \neq 0$, alle $c_i = 1$: $x = \text{NaN}$ (not a number)

Für c bleibt damit ein Bereich von $\{0, \dots, 2046\}$ beziehungsweise $c-1022 \in \{-1022, \dots, 1024\}$. Damit gilt:

- $x_{max} \approx 2^{1024} \approx 1.8 \times 10^{308}, x_{min} = -x_{max}$
- $x_{posmin} = 2^{-1022} \approx 2.2 \times 10^{-308}, x_{negmax} = -x_{posmin}$

Ausgangsdaten $x \in \mathbb{R}$ einer numerischen Aufgabe und die Zwischenergebnisse einer Rechnung müssen durch Maschinenzahlen dargestellt werden. Für Zahlen des „zulässigen“ Bereichs $D = [x_{min}, x_{negmax}] \cup \{0\} [x_{posmin}, x_{max}]$ wird eine Rundungsoperation $\text{rd} : D \rightarrow A$ verwendet, die

$$|x - \text{rd } x| = \min_{y \in A} |x - y| \quad \forall x \in D$$

erfüllt.

Beispiel 1.4 (Natürliche Rundung im IEEE-Format)

$$\text{rd}(x) = \text{sgn}(x) \cdot \begin{cases} 0, m_1, \dots, m_{53} \cdot 2^e & m_{54} = 0 \\ (0, m_1, \dots, m_{53} + 2^{-53}) \cdot 2^e & m_{54} = 1 \end{cases}$$

Rundungsfehler:

- absolut:

$$|x - \text{rd}(x)| \leq \frac{1}{2} b^{-r} b^e$$

- relativ:

$$\left| \frac{x - \text{rd}(x)}{x} \right| \leq \frac{1}{2} \frac{b^{-r} b^e}{|m| b^e} \leq \frac{1}{2} b^{-r+1}$$

Der relative Fehler ist für $x \in D \setminus \{0\}$ beschränkt durch die „Maschinenengenauigkeit“

$$\text{eps} = \frac{1}{2} b^{-r+1}$$

Für $x \in D$ ist $\text{rd}(x) = x(1 + \varepsilon)$, $|\varepsilon| \leq \text{eps}$. Für das IEEE-Format (double)

$$\text{eps} = \frac{1}{2} 2^{-52} \approx 10^{-16}$$

Arithmetische Grundoperationen

$$* : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, * \in \{x, -, +, /\}$$

werden auf dem Rechner ersetzt durch Maschinenoperationen:

$$\otimes : A \times A \rightarrow A$$

Dies ist normalerweise für $x, y \in A$ und $x * y \in D$ realisiert durch

$$x \otimes y := \text{rd}(x * y) = (x * y)(1 + \varepsilon), |\varepsilon| \leq \text{eps}$$

Dazu werden die Operationen maschinenintern (unter Verwendung einer längeren Mantisse) ausgeführt, normalisiert und dann gerundet. Im Fall $x * y \notin D$ gibt es eine Fehlermeldung (overflow, underflow) oder das Ergebnis NaN. Achtung: Das Assoziativ- und Distributivgesetz gilt dann nur näherungsweise. Im Allgemeinen ist für $x, y, z \in A$

$$\begin{aligned} (x \oplus y) \oplus z &\neq x \oplus (y \oplus z) \\ (x \oplus y) \odot z &\neq (x \odot z) \oplus (y \odot z) \end{aligned}$$

Insbesondere gilt für $|y| \leq \frac{|x|}{b} \text{eps}$

$$x \oplus y = x$$

Damit ergibt sich eine alternative Charakterisierung der Maschinenengenauigkeit: eps ist die kleinste positive Zahl in A , sodass $1 \oplus \text{eps} \neq 1$

1.2 Konditionierung numerischer Aufgaben

Eine numerische Aufgabe wird als **gut konditioniert** bezeichnet, wenn eine kleine Störung in den Eingangsdaten (Messfehler, Rundungsfehler) auch nur eine kleine Änderung der Ergebnisse zur Folge hat.

Beispiel 1.5 (Schnittpunkt von Geraden) Zwei Geraden, die sich (annähernd) rechtwinklig treffen sind gut konditioniert.

Zwei Geraden, die sich unter einem stumpfen, oder spitzen Winkel treffen sind schlecht konditioniert.

Beispiel 1.6 (Lineares Gleichungssystem)

$$\begin{pmatrix} 1 & 10^6 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -10^6 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \implies x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ 10^{-3} \end{pmatrix} \implies x = \begin{pmatrix} -999 \\ 10^{-3} \end{pmatrix} \not\approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

\implies schlecht konditioniert.

Definition 1.7 Eine **numerische Aufgabe** berechnet aus Eingangsgrößen $x_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, m$ unter der funktionellen Vorschrift $f(x_1, \dots, x_m), i = 1, \dots, n$ Ausgangsgrößen $y_i = f_i(x_1, \dots, x_m)$

$$y = f(x), f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$$

Beispiel 1.8 (Lösung eines LGS) $Ay = x, f(x) = A^{-1}x$

Definition 1.9 Fehlerhafte Eingangsgrößen $x_i + \Delta x_i$ (Δx_i : Rundungsfehler, Maschineneffehler) ergeben fehlerhafte Resultate $y_i + \Delta y_i$. Wir bezeichnen $|\Delta y_i|$ als den absoluten Fehler und $\left| \frac{\Delta y_i}{y_i} \right|$ für $y_i \neq 0$ als den relativen Fehler.

1.2.1 Differentielle Fehleranalyse

Annahmen:

- kleine relative Datenfehler $|\Delta x_i| \ll |x_i|$
- f_i stetig partiell differenzierbar nach allen x_i

Dann gilt:

$$y_i = f_i(x_i), y_i + \Delta y_i = f_i(x + \Delta x) \\ \implies \Delta y_i = f_i(x + \Delta x) - f_i(x)$$

Taylorentwicklung

$$= \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Delta x_j + R_i^f(x, \Delta x)$$

mit einem Restglied R_i^f , das für $|\Delta x| = \max_{j=1, \dots, m} |\Delta x_j| \rightarrow 0$ schneller gegen 0 geht als $|\Delta x|$. Wenn f sogar zweimal stetig differenzierbar ist, gilt sogar, dass

$$\left| R_i^f(x, \Delta x) \right| \leq c |\Delta x|^2, c \in \mathbb{R}$$

Definition 1.10 (Landau-Notation) Seien $g, h : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}, t \rightarrow 0^+$. Wir schreiben:

- $g(t) = \mathcal{O}(h(t)) : \iff \exists t_0, c \in \mathbb{R}_+ : \forall t \in (0, t_0] : |g(t)| \leq c|h(t)|$
- $gt = \sigma(ht) : \iff \exists t_0 \in \mathbb{R}_+, c : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}, \lim_{t \rightarrow 0^+} c(t) = 0 : \forall t \in (0, t_0] : |g(t)| \leq c(t)|h(t)|$

Bemerkung 1.11 • Analoge Schreibweise für $t \rightarrow \infty$

- \mathcal{O} und σ sind Symbole, keine Funktionen

$$\mathcal{O}(t^2) + \mathcal{O}(t^3) + \mathcal{O}(2t^2) = \mathcal{O}(t^2) \not\implies \mathcal{O}(t^3) + \mathcal{O}(2t^2) = 0$$

- $\sigma(t^n)$ ist stärker als $\mathcal{O}(t^n) : \sigma(t^n) + \mathcal{O}(t^n) = \mathcal{O}(t^n)$
- $\mathcal{O}(t^{n+1})$ ist stärker als $\sigma(t^n)$: Wähle $c(t) = t!$

Beispiel 1.12 Ist $g(t)$ zweimal stetig differenzierbar, so gilt mit Taylor

$$g(t + \Delta t) = g(t) + \Delta t g'(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 g''(\tau), \tau \in [t, t + \Delta t]$$

$$\implies \frac{1}{\Delta t} (g(t + \Delta t) - g(t)) = g'(t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Damit folgt dass Δy_i in erster Näherung, das heißt bis auf eine Größe der Ordnung $\mathcal{O}(|\Delta x|^2)$ gleich

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \Delta x_j$$

ist. Schreibweise

$$\Delta y_i \doteq \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \Delta x_j$$

Für den komponentenweisen relativen Fehler gilt

$$\frac{\Delta y_i}{y_i} \doteq \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \frac{\Delta x_j}{y_i} = \sum_{j=1}^m \underbrace{\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \frac{x_j}{f_i(x)}}_{=: k_{ij}(x)} \frac{\Delta x_j}{x_j}$$

Vernachlässigt haben wir dabei

$$\left| \frac{R_i^f(x_j, \Delta x)}{y_i} \right| = \mathcal{O}\left(\frac{|\Delta x|^2}{|y_i|}\right)$$

Diese Vernachlässigung ist nur zulässig falls

$$|\Delta x| = \sigma(|y_i|), i = 1, \dots, n$$

damit

$$\mathcal{O}\left(\frac{|\Delta x|^2}{|y_i|}\right) = \sigma(|\Delta x|)$$

(stärker als $\mathcal{O}(|\Delta x|)$)

Definition 1.13 Die Größen $k_{ij}(x)$ heißen (relative) Konditionszahlen von f im Punkt x . Sie sind Maß dafür, wie sich kleine relative Fehler in den Ausgangsdaten x_j auf das Ergebnis y_i auswirken. Sprechweise:

- $|k_{ij}(x)| \gg 1$: Die Aufgabe $y = f(x)$ ist schlecht konditioniert
- sonst: Die Aufgabe $y = f(x)$ ist gut konditioniert
- $|k_{ij}(x)| < 1$: Fehlerdämpfung
- $|k_{ij}(x)| > 1$: Fehlerverstärkung.

Bemerkung 1.14 Man kann auch Störungen in f betrachten.

Beispiel 1.15 Implizit gegebene Aufgaben. Für $n = m$ sei y die gegebene Eingangsgröße und ein x mit $f(x) = y$ die Ausgabe (zum Beispiel: $f(x) = Ax + b$). Die differentielle Fehleranalyse auf der Umkehrfunktion $x = f^{-1}(y)$ liefert unter geeigneten Annahmen.

$$\frac{\Delta x_i}{x_i} \doteq \sum_{j=1}^n k_{ij}^{-1}(y) \frac{\Delta y_j}{y_j}, \quad k_{ij}^{-1} = \frac{\partial f_i^{-1}}{\partial y_j}(y) \frac{y_j}{x_i}$$

Wir definieren die Matrizen

$$K^{-1}(y) = \left(k_{ij}^{-1}\right)_{i,j=1}^n, \quad K(x) = (k_{ij}(x))_{i,j=1}^n$$

und betrachten deren Produkt:

$$\begin{aligned} (K^{-1}(y)K(x))_{ij} &= \sum_{l=1}^n k_{il}^{-1}(y) k_{lj}(x) \\ &= \sum_{l=1}^n \frac{\partial f_i^{-1}}{\partial y_l}(y) \frac{y_l}{x_i} \frac{\partial f_l}{\partial x_j}(x) \frac{x_j}{y_l} \\ &= \frac{x_j}{x_i} \sum_{l=1}^n \frac{\partial f_i^{-1}}{\partial y_l} \frac{\partial f_l}{\partial x_j} = \frac{x_j}{x_i} \frac{d}{dx_j} (f_i^{-1}(f(x))) \\ &= \frac{x_j}{x_i} \frac{dx_i}{dx_j} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

K^{-1} ist gerade das Inverse von K .

Wiederholung: Numerische Aufgabe

$$f : x \in \mathbb{R}^m \mapsto y \in \mathbb{R}$$

Konditionszahlen:

$$\frac{\Delta y_i}{y_i} = \sum_{j=1}^m k_{ij}(x) \frac{\Delta x_j}{x_j}$$

$$k_{ij}(x) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \frac{x_j}{f_i(x)}$$

1.2.2 Arithmetische Grundoperationen

Addition: $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2, x_1, x_2 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

$$k_{1j}(x) = \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{x_j}{f} = 1 \frac{x_j}{x_1 + x_2} = \frac{1}{1 + \frac{x_j}{x_1}}$$

$$\bar{j} = \begin{cases} 2 & j = 1 \\ 1 & j = 2 \end{cases}$$

Die Addition ist schlecht konditioniert für $x_1 \approx -x_2$.

Definition 1.16 (Auslöschung) Unter Auslöschung versteht man den Verlust von Genauigkeit bei der Subtraktion von Zahlen gleichen Vorzeichens.

Beispiel 1.17 $b = 10, r = 4, s = 1$

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.112\,587 \times 10^2 & \text{rd}(x_1) &= 0.1126 \times 10^2 \\ x_2 &= 0.112\,448 \times 10^2 & \text{rd}(x_2) &= 0.1124 \times 10^2 \\ x_1 + x_2 &= 0.225\,035 \times 10^2 & \text{rd}(x_1) \oplus \text{rd}(x_2) &= 0.2250 \times 10^2 \\ x_1 - x_2 &= 0.129 \times 10^{-1} & \text{rd}(x_1) \ominus \text{rd}(x_2) &= -0.2 \times 10^{-1} \quad (\text{Großer Fehler}) \end{aligned}$$

Multiplikation: $y = f(x_1, x_2) = x_1 x_2$

$$k_{1j}(x) = \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{x_j}{f} = x_j - \frac{x_j}{x_1 x_2} = 1$$

\implies gut konditioniert

Beispiel 1.18 (Lösungen quadratischer Gleichungen) Für $p, q \in \mathbb{R}$ betrachte:

$$0 = y^2 - py + q$$

$$y_{1,2} = y_{1,2}(p, q) = \frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

nach Vieta $p = y_1 + y_2, q = y_1 \cdot y_2$

$$\begin{aligned}
 1 &= \frac{dp}{dp} = \frac{\partial y_1}{\partial p} + \frac{\partial y_2}{\partial p} \\
 0 &= \frac{dq}{dp} = \frac{\partial y_1}{\partial p} y_2 + y_1 \frac{\partial y_2}{\partial p} \\
 \implies (y_2 - y_1) \frac{\partial y_2}{\partial p} &= y_2 \\
 \implies \frac{\partial y_2}{\partial p} &= \frac{y_2}{y_2 - y_1} \\
 \implies \frac{\partial y_1}{\partial p} &= \frac{y_1}{y_1 - y_2} \\
 0 &= \frac{dq}{dq} = \frac{\partial y_1}{\partial q} + \frac{\partial y_2}{\partial q} \\
 1 &= \frac{dq}{dq} = \frac{\partial y_1}{\partial q} y_2 + y_1 \frac{\partial y_2}{\partial q} \\
 \implies 1 &= (y_2 - y_1) \frac{\partial y_1}{\partial q} \\
 \implies \frac{\partial y_1}{\partial q} &= \frac{1}{y_2 - y_1} \\
 \implies \frac{\partial y_2}{\partial q} &= -\frac{1}{y_2 - y_1} \\
 k_{11}(x) &= \frac{\partial y_1}{\partial p} \frac{p}{y_1} = \frac{y_1}{y_1 - y_2} \frac{y_1 + y_2}{y_1} = \frac{1 + y_2/y_1}{1 - y_2/y_1} \\
 k_{12}(x) &= \frac{\partial y_1}{\partial q} \frac{q}{y_1} = \frac{1}{y_2 - y_1} \frac{y_1 y_2}{y_1} = \frac{1}{1 - y_1/y_2}
 \end{aligned}$$

Analog für k_{21}, k_{22}

Die Berechnung von y_1, y_2 ist schlecht konditioniert $y_1 \approx y_2$.

Konkretes Beispiel: $p = 4, q = 33.999, y_{1,2} = 2 \pm 10 \times 10^{-1}$

$$k_{12} = \frac{y_2}{y_2 - y_1} = \frac{2 - 10^{-2}}{-2 \times 10^{-2}} = -99.5$$

\implies 100-fache Fehlerverstärkung.

1.3 Stabilität numerischer Algorithmen

Gegeben: Numerische Aufgabe $f : x \in \mathbb{R}^m \mapsto y \in \mathbb{R}^n$

Definition 1.19 (Verfahren / Algorithmus) Unter einem Verfahren / Algorithmus zur (gegebenenfalls näherungsweise) Berechnung von y aus x verstehen wir eine endliche Folge von elementaren Abbildungen $\varphi^{(k)}$, die durch sukzessiv Anwendung einen Näherungswert \tilde{y} zu y liefern.

$$x = x^{(0)} \mapsto \varphi^{(1)}(x^{(0)}) = x^{(1)} \mapsto \dots \mapsto \varphi^{(k)}(x^{(k-1)}) \mapsto \tilde{y} \rightarrow y$$

Im einfachsten Fall sind die $\varphi^{(i)}$ arithmetische Grundoperationen. Bei der Durchführung des Algorithmus auf dem Rechner treten in jedem Schritt Fehler auf (Rundungsfehler, Auswertungsfehler, ...), die sich akkumulieren können.

Definition 1.20 (Algorithmus) Ein Algorithmus heißt stabil, wenn die im Verlauf der Rechnung akkumulierten Fehler den durch die Konditionierung der Aufgabe $y = f(x)$ bedingten unvermeidbaren Problemfehler nicht übersteigen.

Beispiel 1.21 (Lösung quadratischer Gleichungen) Annahme: $0 \neq q < p^2/4$

Für $\left| \frac{y_1}{y_2} \right| \gg 1$, das heißt $q \ll \frac{p^2}{4}$, ist die Aufgabe gut konditioniert. Algorithmus: $u = p^2/4, v = u - q, w = \sqrt{v}$.

Im Fall $p < 0$ wird zur Vermeidung von Auslöschung zunächst $\tilde{y}_2 = p/2 - w$ berechnet.

Fehlerfortpflanzung:

$$w = \sqrt{u - q} \begin{cases} \approx \frac{|p|}{2} & q > 0 \\ > \frac{|p|}{2} & q < 0 \end{cases}$$

$$\frac{\Delta y_2}{y_2} \leq \left| \frac{\frac{1}{2}p}{\frac{p}{2} - w} \right| \left| \frac{\Delta p}{p} \right| + \left| \frac{-w}{\frac{p}{2} - w} \right| \left| \frac{\Delta w}{w} \right|$$

$$= \underbrace{\left| \frac{1}{1 - \frac{2w}{p}} \right|}_{\leq \frac{1}{2}} \left| \frac{\Delta p}{p} \right| + \underbrace{\left| \frac{1}{1 - \frac{p}{2w}} \right|}_{< 1} \left| \frac{\Delta w}{w} \right|$$

Die zweite Wurzel kann so bestimmt werden:

$$A : \tilde{y}_1 = \frac{p}{2} + w, \quad B : \tilde{y}_1 = \frac{q}{\tilde{y}_2}$$

Für $|q| \ll \frac{p^2}{4}$ ist $w \approx \frac{|p|}{2} \implies$ Auslöschung in Variante A

$$\left| \frac{\Delta y_1}{y_1} \right| \leq \underbrace{\frac{1}{1 + \frac{2w}{p}}}_{\gg 1} \frac{\Delta p}{p} + \underbrace{\frac{1}{1 + \frac{p}{2w}}}_{\gg 1} \frac{\Delta w}{w}$$

\implies Variante A ist instabil. Variante B ist stabil:

$$\left| \frac{\Delta y_1}{y_1} \right| \leq \underbrace{\left| \frac{\Delta q}{q} \right|}_{\leq \epsilon_{ps}} + \underbrace{\left| \frac{\Delta y_2}{y_2} \right|}_{\approx \epsilon_{ps}}$$

Regel: Bei der Lösung quadratischer Gleichungen sollten nicht beide Wurzeln aus der Lösungsformel berechnet werden.

Konkretes Beispiel: $p = -4, q = 0.01$ (vierstellige Rechnung)

$$u = 4, v = 3.99, w = 1.9974948 \dots, \tilde{y}_2 = -3.997(4981 \dots)$$

$$\tilde{y}_1 = \begin{cases} \text{exakt:} & -0.9925915 \dots \\ A : & -0.003000 \quad (\text{rel. Fehler: } 20\%) \\ B : & -0.002502 \quad (\text{rel. Fehler: } 1.7 \times 10^{-4}) \end{cases}$$

Auswertung arithmetischer Ausdrücke

Vorwärtsrundungsfehleranalyse: Akkumulation des Rundungsfehlers ausgehend von Startwert.

Beispiel 1.22 $y = f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 = (x_1 - x_2)(x_1 + x_2)$ Konditionierung:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\Delta y}{y} \right| &\leq \sum_{i=1}^2 \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{x_i}{f} \right| \left| \frac{\Delta x_i}{x_i} \right| \\ &= \left| 2x_1 \frac{x_1}{x_1^2 - x_2^2} \right| \left| \frac{\Delta x_1}{x_1} \right| + \left| -2x_2 \frac{x_2}{x_1^2 - x_2^2} \right| \left| \frac{\Delta x_2}{x_2} \right| \\ &\leq 2 \frac{x_1^2 + x_2^2}{|x_1^2 - x_2^2|} eps = 2 \left| \frac{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 + 1}{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 - 1} \right| eps \end{aligned}$$

\Rightarrow schlecht konditioniert für $\left| \frac{x_1}{x_2} \right| \approx 1$

Algorithmus A Algorithmus B

$$u = x_1 \odot x_1 \qquad u = x_1 \oplus x_1$$

$$v = x_2 \odot x_2 \qquad v = x_1 \ominus x_2$$

$$\tilde{q} = u \ominus v \qquad \tilde{q} = u \odot v$$

Sei $x_1, x_2 \in A$. Für Maschinenoperationen \otimes und $a, b \in A$ gilt

$$a \otimes b = (a * b)(1 + \varepsilon), |(\varepsilon)| \leq eps.$$

Algorithmus A:

$$\begin{aligned} u &= x_1^2(1 + \varepsilon_1), v = x_2^2(1 + \varepsilon_2) \\ \tilde{y} &= (x_1^2(1 + \varepsilon_1) - x_2^2(1 + \varepsilon_2))(1 + \varepsilon_3) \\ &= \underbrace{x_1^2 - x_2^2}_y + x_1^2 \varepsilon_1 - x_2^2 \varepsilon_2 + \underbrace{(x_1^2 - x_2^2)}_y \varepsilon_3, |\varepsilon| \leq eps \\ \Rightarrow \left| \frac{\Delta y}{y} \right| &\leq eps \frac{x_1^2 + x_2^2 + |x_1^2 - x_2^2|}{|x_1^2 - x_2^2|} = eps \left(1 + \left| \frac{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 + 1}{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 - 1} \right| \right) \end{aligned}$$

Wegen der Konditionierung des Problems

$$\left| \frac{\Delta y}{y} \right| \leq 2 \left| \frac{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 + 1}{\left(\frac{x_1}{x_2}\right)^2 - 1} \right| eps$$

ist A stabil. Algorithmus B:

$$u = x_1 \oplus x_2, v = x_1 \ominus x_2, y = u \odot v$$

Rundungsfehleranalyse

$$\begin{aligned}
u &= (x_1 + x_2)(1 + \varepsilon_1), v = (x_1 - x_2)(1 + \varepsilon_2) \\
\tilde{y} &= (x_1 + x_2)(1 + \varepsilon_1)(x_1 - x_2)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) \\
&= \underbrace{x_1^2 - x_2^2}_y + \underbrace{(x_1^2 - x_2^2)}_{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\
\Rightarrow \left| \frac{\Delta y}{y} \right| &\leq |(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)| \leq 3\varepsilon
\end{aligned}$$

\Rightarrow Algorithmus B ist stabiler als Algorithmus A.

Regel: Bei numerischen Rechnungen sollte man die schlechter konditionierten Operationen möglichst frühzeitig ansetzen.

Wiederholung

- Konditionierung: Eigenschaften einer numerischen Aufgabe
- Stabilität: Eigenschaft eines Verfahrens
 - Auslöschung
- Rundungsfehleranalyse
 - $y = f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 = (x_1 - x_2)(x_1 + x_2)$

Auswertung von Polynomen

$$y = p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

Als Modellfall betrachten wir

$$p(x) = a_1x + a_2x^2 = x(a_1 + a_2x)$$

Zwei Varianten für $\tilde{y} = p(\xi), \xi \in A$

A: $u = \xi \odot \xi, v = a_2 \odot u, w = a_1 \odot \xi, \tilde{y} = v + w$

B: $u = a_2 \odot \xi, v = a_1 \oplus u, \tilde{y} = \xi \odot v$

B spart eine arithmetische Operation.

Rundungsfehleranalyse A:

$$\begin{aligned}
u &= \xi^2(1 + \varepsilon_1), v = a_2\xi^2(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2), w = a_1\xi(1 + \varepsilon_3) \\
\tilde{y} &= (a_2\xi^2(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2) + a_1\xi(1 + \varepsilon_3))(1 + \varepsilon_4) \\
&= \underbrace{a_2\xi^2 + a_1\xi}_y + \underbrace{(a_2\xi^2 + a_1\xi)}_y \varepsilon_4 + a_2\xi^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + a_1\xi\varepsilon_3 + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
\frac{\Delta y}{y} &\stackrel{\cdot}{=} \varepsilon_4 \frac{a_2\xi^2(\varepsilon_1\varepsilon_2) + a_1\xi\varepsilon_3}{a_2\xi^2 + a_1\xi} \\
&= \varepsilon_4 + \varepsilon_3 + \frac{a_2\xi^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3)}{a_2\xi^2 + a_1\xi} \\
&= \varepsilon_3 + \varepsilon_3 + \frac{\xi}{\frac{a_1}{a_2} + \xi}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3)
\end{aligned}$$

Variante B:

$$\begin{aligned}
 u &= x_2 \xi (1 + \varepsilon_1), v = (a_1 + a_2 \xi (1 + \varepsilon_1)) (1 + \varepsilon_2) \\
 \tilde{y} &= \xi \cdot [a_1 + a_2 \xi (1 + \varepsilon_1)] (1 + \varepsilon_2) (1 + \varepsilon_3) \\
 &= \underbrace{\xi(a_1 + a_2 \xi)}_y + a_1 \xi (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + a_2 \xi^2 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
 \frac{\Delta y}{y} &= \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \frac{a_2 \xi^2}{a_1 \xi + a_2 \xi} \varepsilon_2 = \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \frac{\xi}{\frac{a_1}{x_2} + \xi} \varepsilon_1
 \end{aligned}$$

\Rightarrow Variante B ist etwas stabiler als A im Fall $\xi \approx -\frac{a_1}{a_2}$ (nahe bei Nullstelle) Allgemein:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n \\
 &= a_0 + x(a_1 + x(\dots + x(a_{n-1} + a_n x) \dots))
 \end{aligned}$$

Definition 1.23 (Horner-Schema)

$$b_n = a_n, b_k = a_k + \xi b_{k-1}, k = n-1, \dots, 0$$

liefert den Funktionswert $p(\xi) = b_0$ des Polynoms an der Stelle $x = \xi$.

Regel: Die Auswertung von Polynomen sollte mit dem Horner-Schema erfolgen.

2 Interpolation und Approximation

Grundproblem:

Darstellung und Auswertung von Funktionen.

Aufgabenstellung:

1. Eine Funktion $f(x)$ ist nur auf einer diskreten Menge von Argumenten x_0, \dots, x_n bekannt und soll rekonstruiert werden (zum Beispiel für Graph Ausgabe)
2. Eine analytisch gegebene Funktion $f(x)$ soll auf dem Rechner so dargestellt werden, dass jederzeit Funktionswerte zu beliebigen Argument x berechnet werden können.

\rightarrow System mit unendlich vielen Freiheitsgraden $y = f(x)$. „Simulation“ durch endlich viele Datensätze in Klassen P von einfach strukturierten Funktionen

- Polynome: $p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$

- rationale Funktionen:

$$r(x) = \frac{a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n}{b_0 + b_1 x + \dots + b_m x^m}$$

- trigonometrische Funktionen

$$t(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^n (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx))$$

- Exponentialsummen

$$e(x) = \sum_{k=1}^n a_k \exp(b_k x)$$

Definition 2.1 Geschieht die Zuordnung eines Elementes $g \in P$ zur Funktion f durch Fixieren von Funktionswerten

$$g(x_i) = y_i = f(x_i), i = 0, \dots, n$$

so spricht man von **Interpolation**. Ist g im gewissen Sinne die beste Darstellung von f , zum Beispiel: $\max_{a \leq x \leq b} |f(x) - g(x)|$ minimal für $g \in P$, oder

$\left(\int_a^b |f(x) - g(x)|^2 dx \right)^{1/2}$ minimal für $g \in P$ so spricht man von **Approximation**. Die Wahl der Konstruktion von $g \in P$ hängt von der zu erfüllenden Aufgabe ab. Offenbar ist die Interpolation eine Approximation mit

$$\max_{i=0, \dots, n} |f(x_i) - g(x_i)|$$

für $g \in P$

Wiederholung: Interpolation und Approximation

- Stützstellen x_i mit Werten $y_i, i = 0, \dots, n$
- Klassen P von Funktion

Polynominterpolation

Wir bezeichnen mit P_n den Vektorraum der Polynome vom Grad $\leq n$:

$$P_n = \{p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n \mid a_i \in \mathbb{R}, i = 0, \dots, n\}$$

Definition 2.2 (Lagrangsche Interpolationsaufgabe) Die Lagrangsche Interpolationsaufgabe besteht darin zu $x + 1$ paarweise verschiedenen Stützstellen (auch Knoten genannt) $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ und gegebenen Knotenwerten $y_0, \dots, y_n \in \mathbb{R}$ ein Polynom $p \in P_n$ zu bestimmen mit der Eigenschaft $p(x_i) = y_i$

Satz 2.3 Die Lagrangsche Interpolationsaufgabe ist eindeutig lösbar.

Beweis Eindeutigkeit: Sind $p_1, p_2 \in P_n$ Lösungen, so gilt für $p = p_1 - p_2$, dass

$$p(x_i) = p_1(x_i) - p_2(x_i) = y_i - y_i = 0, i = 0, \dots, n$$

Also hat p $n + 1$ Nullstellen und ist folglich identisch Null. $\implies p_1 = p_2$

Existenz: Wir betrachten die Gleichungen

$$p(x_i) = y_i \quad i = 0, \dots, n$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem mit $n + 1$ Gleichungen und $n + 1$ Freiheitsgraden.

$$\begin{pmatrix} x_0^0 & x_0^1 & \dots & x_0^n \\ x_1^0 & x_1^1 & & x_1^n \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_n^0 & x_n^1 & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Wegen der Eindeutigkeit von p ist $\ker V = \{0\}$. Mit dem Rangsatz ($\dim \mathbb{R}^{n+1} = \dim \ker V + \dim \operatorname{im} V$) liefert V eine surjektive Abbildung. Damit existiert eine Lösung. \square

Zur Konstruktion des Interpolationspolynoms $p \in P_n$ verwenden wir die sogenannten Lagrangschen Basispolynome.

$$L_i^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \in P_n, i = 0, \dots, n$$

Lemma 2.4 $\{L_i^{(n)}, i = 0, \dots, n\}$ ist eine Basis von P_n

Beweis Übung. \square

Offensichtlich gilt:

$$L_i^{(n)}(x_k) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Definition 2.5 Das Polynom

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i^{(n)}(x) \in P_n$$

hat die gewünschten Eigenschaften

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

und wird die Lagrangsche Darstellung des (Lagrangschen) Interpolationspolynoms zu dem Stützpunkten $(x_i, y_i), i = 0, \dots, n$ genannt.

Nachteil: Bei Hinzunahme eines weiteren Stützpunktes (x_{n+1}, y_{n+1}) ändern sich die Basispolynome völlig.

Abhilfe: Newtonsche Basispolynome

$$N_0(x) = 1, N_i(x) = (x - x_{i-1})N_{i-1}(x) = \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j)$$

Für den Ansatz

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i N_i(x)$$

erhält man durch Auswertung von x_0, \dots, x_n das gestaffelte Gleichungssystem

$$\begin{aligned} y_0 &= p(x_0) = a_0 \\ y_1 &= p(x_1) = a_0 + a_1(x_1 - x_0) \\ &\vdots \\ y_n &= p(x_n) = a_0 + a_1(x_1 - x_0) + \dots + a_n(x_n - x_0) \cdot \dots \cdot (x_n - x_{n-1}) \end{aligned}$$

aus dem sich die Koeffizienten a_i rekursiv berechnen lassen. Bei Hinzunahme eines weiteren Stützpunktes (x_{n+1}, y_{n+1}) setzt man den Prozess mit der Basisfunktion N_{n+1} fort. In der Praxis verwendet man folgende stabilere und effizientere Methode

Satz 2.6 (Newtonsche Darstellung) Das Lagrangsche Interpolationspolynom zu den Punkten $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ lässt sich bezüglich der Newtonschen Polynombasis schreiben in der Form

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y[x_0, \dots, x_i] N_i(x)$$

Dabei bezeichnen $y[x_0, \dots, x_i]$ die zu den Punkten (x_i, y_i) gehörenden „dividierten Differenzen“, welche rekursiv definiert sind durch

$$L \text{ für } k = 1, \dots, j : i = k - j : y[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{\overbrace{y[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]}^k - \overbrace{y[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}^k}{x_{i+k} - x_i} \quad \text{für } j = 0, \dots, n : y[x_j] = y_j$$

Beweis Es bezeichne $p_{i,i+k} \in P_k$ das Polynom, welches die Punkte $(x_i, y_i), \dots, (x_{i+k}, y_{i+k})$ interpoliert. Speziell ist $p_{0,n} = p$ das gesuchte Interpolationspolynom. Wir zeigen

$$p_{i,i+k}(x) = y[x_i] + y[x_i, x_{i+1}](x - x_i) + \dots + y[x_i, \dots, x_{i+k}](x - x_i) \cdot \dots \cdot (x - x_{i+k-1})$$

was für $i = 0$ und $k = n$ den Satz beweist. Der Beweis wird durch Induktion über die Indextendifferenz k geführt. Für $k = 0$ ist $p_{i,i} = y_i = y[x_i]$, $i = 0, \dots, n$. Sei die Behauptung richtig für $k - 1 \geq 0$. Nach Konstruktion gilt für ein $a \in \mathbb{R}$

$$p_{i,i+k}(x) = p_{i,i+k-1}(x) + a(x - x_i) \cdot \dots \cdot (x - x_{i+k-1}) = 0$$

für $x = x_j$, $j = i, \dots, i + k - 1$. Zu zeigen: $a = y[x_i, \dots, x_{i+k}]$. Offenbar ist a der Koeffizient von x^k in $p_{0,i+k}$. Nach Induktionsannahme ist also

$$\begin{aligned} p_{i,i+k-1}(x) &= \dots + y[x_i, \dots, x_{i+k-1}]x^{k-1} \\ p_{i+1,i+k-1}(x) &= \underbrace{\dots}_{\text{Grad} \leq k-2} + y[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]x^{k-1} \end{aligned}$$

Ansatz:

$$\begin{aligned}
 q(x) &= \frac{(x - x_i)p_{i+1,i+k}(x) - (x - x_{i+k})p_{i,i+k-1}(x)}{x_{i+k} - x_i} \\
 &= p_{i,i+k-1}(x) + \frac{(x - x_i)p_{i+1,i+k}(x) - (x - x_{i+k} + x_{i+k} - x_i)p_{i,i+k-1}(x)}{x_{i+k} - x_i} \\
 &= p_{i,i+k-1}(x) + (x - x_i) \frac{p_{i+1,i+k}(x) - p_{i,i+k-1}(x)}{x_{i+k} - x_i}
 \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned}
 q(x_i) &= y_i, q(x_{i+k}) = \frac{(x_{i+k} - x_i)y_{i+k} + 0}{x_{i+k} - x_i} = y_{i+k} \\
 q(x_j) &= \frac{(x_j - x_i)y_j - (x_j - x_{i+k})y_j}{x_{i+k} - x_i} = y_j, j = i + 1, \dots, i + k - 1
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow q$ interpoliert die Stützpunkte $(x_i, y_i), \dots, (x_{i+k}, y_{i+k}) \Rightarrow q \equiv p_{i,i+k}$ (Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms). Der führende Koeffizient in $p_{i,i+k}(x)$ ist demnach

$$\begin{aligned}
 q &= \frac{y[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - y[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i} \\
 &= y[x_i, \dots, x_{i+k}] \quad \square
 \end{aligned}$$

Korollar 2.7 Sei $\sigma : \{0, \dots, n\} \rightarrow \{0, \dots, n\}$ eine beliebige Permutation. Dann gilt für die Stützpunkte $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i) = (x_{\sigma(j)}, y_{\sigma(j)})$

$$y[\tilde{x}_0, \dots, \tilde{x}_n] = y[x_0, \dots, x_n]$$

Beweis Koeffizient des Monoms x^n ist $y[x_0, \dots, x_n]$ unabhängig von der Reihenfolge. \square

Wiederholung: Lagrange-Interpolation:

Gegeben: $(x_i, y_i), i = 0, \dots, n$

Suche $p \in P_n : p(x_i) = y_i, i = 0, \dots, n$

Lösung:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= \sum_{i=0}^n y_i L_i^{(n)}(x) \\
 &= L_i^{(n)}(x) \qquad \qquad \qquad = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \in P_n
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow L_i^{(n)}(x_j) = \delta_{ij}$$

Andere Darstellung: Newton-Neville

$$N_i(x) = \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j)$$

$$p(x) = \sum_{i=0}^N y[x_0, \dots, x_i] D_i(x)$$

$$y[x_i] = q_i$$

$$y[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{y[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - y[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

Definition 2.8 Das durch die Rekursion $j = 0, \dots, n, p_{j,j}(x) = y_j$ für $k = 1, \dots, j : i = k - j$

$$p_{i,i+k}(x) = p_{i,i+k-1}(x) + (x - x_i) \frac{p_{i+1,i+k}(x) - p_{i,i+k-1}(x)}{x_{i+k} - x_i}$$

erzeugte Polynom $p_{0,1}$ ist die sogenannte Nevellsche Darstellung des Interpolationspolynom zu den Stützstellen $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$

Schema:

	$k = 0$		$k = 1$		$k = 2$	\dots	$k = n - 1$		$k = n$
x_0	y_0	\rightarrow	$p_{0,1}$	\rightarrow	$p_{0,2}$	\dots	$p_{0,n-1}$	\rightarrow	$p_{0,n}$
x_1	y_1	\nearrow	$p_{1,2}$	\nearrow	$p_{1,3}$	\dots	$p_{1,n}$	\nearrow	
x_2	y_2	\nearrow							
\vdots		\vdots	\ddots						
x_{n-1}	y_{n-1}	\rightarrow	$p_{n-1,n}$						
x_n	y_n	\nearrow							

Die Hinzunahme eines weiteren Stützpunktes ist problemlos. Die Auswertung von $p_{0,n}(x)$ an einer Stelle $\xi \neq x_i$ ohne vorige Bestimmung der Koeffizienten der Newton-Darstellung ist damit sehr einfach und numerisch effizient und stabil möglich. Dazu wird im Schema x mit ξ ersetzt.

2.1 Auswertung von Polynomen und deren Ableitungen

Sei $p \in P_n$ gegeben in der Darstellung

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$$

Wiederholung: Auswertung von $p(\xi)$ mittels Horner-Schema

$$b_k = \begin{cases} a_n & k = n \\ a_k + \xi b_{k+1} & k = n - 1, \dots, 0 \end{cases}$$

$$\implies p(\xi) = b_0.$$

Zu $p_n = p \in P_n$ und festem ξ wird durch

$$p_{n-1}(x) = b_1 + b_2x + \dots + b_nx^{n-1}$$

ein Polynom $p_{n-1} \in P_{n-1}$ definiert. Wegen $a_k = b_k - \xi b_{k+1}, k = 0, \dots, n-1, a_n = b_n$:

$$\begin{aligned} p_n(x) &= \sum_{k=0}^n b_k x^k - \xi \sum_{k=0}^{n-1} b_{k+1} x^k \\ &= b_0 + x \sum_{k=1}^n b_k x^{k-1} - \xi \sum_{k=1}^n b_k x^{k-1} \\ &= r_0 + (x - \xi) p_{n-1}(x) \quad r_0 = p(\xi) = b_0 \end{aligned}$$

\implies Für eine Nullstelle ξ von p_n leistet das Horner-Schema die Abspaltung des Linearfaktors $(x - \xi)$ vom Polynom p_n . Weiter ist dann für $x \neq \xi$

$$\frac{p_n(x) - p_n(\xi)}{x - \xi} = p_{n-1}(x)$$

$$x \rightarrow \xi$$

$$p'_n(\xi) = p_{n-1}(\xi)$$

Zur Berechnung von $p'_n(\xi)$ wird das Horner-Schema auf p_{n-1} angewendet.

$$p_{n-2} \in P_{n-2}, p_{n-1}(x) = r_1 + (x - \xi)p_{n-2}(x), r_1 = p_{n-1}(\xi)$$

Fortsetzen \rightarrow endliche Folge von Polynomen p_n, p_{n-1}, \dots, p_0 mit

$$\begin{aligned} p_{n-j}(x) &= (x - \xi)p_{n-j-1}(x) + r_j, \quad j = 0, \dots, n \\ p_n(x) &= r_0 + r_1(x - \xi) + \dots + r_n(x - \xi)^n \end{aligned}$$

Vergleich mit der Taylorentwicklung von p_n um ξ ergibt

$$r_j = \frac{1}{j!} p_n^{(j)}(\xi)$$

Die Koeffizienten von p_{n-j} seien

$$p_{n-j}(x) = a_j^{(j)} + a_{j+1}^{(j)}x + \dots + a_n^{(j)}x^{n-j}, j = 0, \dots, n$$

Es gilt die Rekursion:

$$a_k^{(j+1)} = \begin{cases} a_n^{(j)} & k = n \\ a_k^{(j)} + \xi a_{k+1}^{(j)} & \end{cases}$$

und es gilt

$$p^{(j)}(\xi) = j! a_j^{(j+1)}, j = 0, \dots, n$$

Dieses „vollständige Horner-Schema“ kann leicht zur Auswertung von Polynomen in Newton-Darstellung modifiziert werden:

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \dots + a_n(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1})$$

2.2 Interpolation von Funktionen

Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$. Werte gegeben durch Funktion $y_i = f(x_i), i = 0, \dots, n$

Frage: Wie gut approximiert das Interpolationspolynom $p \in P_n$ die Funktion f auf $[a, b]$?

Bezeichnungen:

- $\overline{(x_0, \dots, x_n)}$ = kleinstes Intervall, das alle x_i enthält.
- $C[a, b]$: Vektorraum der über $[a, b]$ stetigen Funktionen
- $C^k[a, b]$: Vektorraum über $[a, b]$ k-mal stetig differenzierbarer Funktionen.

Satz 2.9 (Interpolationsfehler 1) Sei $f \in C^{n+1}[a, b]$. Dann gibt es zu jedem $x \in [a, b]$ ein $\xi_x \in \overline{(x_0, \dots, x_n, x)}$, sodass gilt

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

Beweis Für $x \in \{x_0, \dots, x_n\}$ ist alles klar. Sei $x \in [a, b] \setminus \{x_0, \dots, x_n\}$. Wir setzen

$$l(t) = \prod_{j=0}^n (t - x_j), \quad c(x) = \frac{f(x) - p(x)}{l(x)}$$

Die Funktion

$$F(t) = f(t) - p(t) - c(x)l(t)$$

besitzt dann mindestens die $n+2$ Nullstellen x_0, \dots, x_n, x in $[a, b]$. Durch wiederholte Anwendung des Satzes von Rolle schließt man, dass die Ableitung F^{n+1} eine Nullstelle $\xi_x \in \overline{(x_0, \dots, x_n, x)}$. Es

$$\begin{aligned} 0 &= F^{(n+1)}(\xi_x) = f^{(n+1)}(\xi_x) - p^{(n+1)}(\xi_x) - c(x)l^{(n+1)}(\xi_x) \\ &= f^{(n+1)}(\xi_x) - c(x)(n+1)! \end{aligned} \quad \square$$

Wiederholung:

- Neville-Schema für $p \in P_n$:
$$p(x_i) = y_i, i = 0, \dots, n$$
- Vollständiges Horner-Schema
- Interpolation von Funktionen $y_i = f(x_i)$

Interpolationsfehler 1: Sei $f \in C^{n+1}[a, b] \implies \forall x \in [a, b] \exists \xi_x \in \overline{(x_0, \dots, x_n, x)}$:

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

Satz 2.10 (Interpolationsfehler 2) Sei $f \in C^{n+1}[a, b]$. Dann gilt für $x \in [a, b] \setminus \{x_0, \dots, x_n\}$:

$$f(x) - p(x) = f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

mit der Notation

$$f[x_i, \dots, x_{i+k}] = y[x_i, \dots, x_{i+k}]$$

und es ist

$$f[x_0, \dots, x_n, x] = \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_n} f^{(n+1)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \dots + t_n(x_n - x_{n-1}) + t(x - x_n)) dt dt_n \dots dt_1$$

Beweis Per Induktion über n .

IA: $n = 0$:

$$f(x) - p_0(x) = f(x) - f(x_0) = \begin{cases} f[x_0, x](x - x_0) \\ (x - x_0) \int_0^1 f'(x_0 + t(x - x_0)) dt \end{cases}$$

wobei ein

$$\int_0^1 g'(t) dt = g(1) - g(0)$$

für $g(t) = f(x_0 + t(x - x_0)) \implies g'(t) = f'(t)(x - x_0)$

Sei die Behauptung richtig für $n - 1 \geq 0$. Dann ist

$$\begin{aligned} f(x) - p_n(x) &= f(x) - \sum_{i=0}^n f[x_0, \dots, x_n] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \\ &= f(x) - p_{n-1}(x) - f[x_0, \dots, x_n] \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) \\ &= f[x_0, \dots, x_{n-1}, x] \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) - f[x_0, \dots, x_n] \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) \\ &= (f[x_0, \dots, x_{n-1}, x] - f[x_0, \dots, x_n]) \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) \\ &= \frac{f[x, x_0, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_n]}{x - x_n} \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) \\ &= f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) \end{aligned}$$

Weiterhin gilt:

$$f[x_0, \dots, x_{n-1}, x] - f[x_0, \dots, x_n] = \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} [f^{(n)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \dots + t_n(x - x_{n+1})) - f^{(n)}(x_0)] dt dt_{n-1} \dots dt_1$$

Setze $g(t) = f^{(n)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \dots + t_n(x_n - x_{n-1}) + t_{x-x_n})$

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} [g(t_n) - g(0)] dt_n \dots dt_1 \\
 &= \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} \int_0^{t_n} f^{(n+1)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \dots + t_n(x_n - x_{n-1}) + t_{x-x_n}) dt_n \dots dt_1 \\
 \implies f[x_0, \dots, x_n, x] &= \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_n} f^{(n+1)}(\dots) dt_n \dots dt_1 \quad \square
 \end{aligned}$$

Die Integraldarstellung der dividierten Differenzen gestattet ihre stetige Fortsetzung für den Fall, das Stützstellen zusammenfallen:

$$f[x_0, \dots, x_r, x_r, \dots, x_n] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f[x_0, \dots, x_r, x_r + \varepsilon, \dots, x_n]$$

Im Extremfall $x_0 = x_1 = \dots = x_n$ wird

$$\begin{aligned}
 f[x_0, \dots, x_n] &= \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} f^{(n)}(x_0) dt_n \dots dt_1 \\
 &= \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} 1 dt_n \dots dt_1 f^{(n)}(x_0) \\
 &= \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)
 \end{aligned}$$

Damit geht das Newtonsche Interpolationspolynom über in das Taylorpolynom n-ten Grades von f in x_0 . Konstruieren wir die Fehlerdarstellung so erhalten wir für ein $\xi_x \in (x_0, \dots, x_n, x)$

$$\begin{aligned}
 \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j) &= f(x) - p(x) \\
 &= f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j) \\
 \implies f[x_0, \dots, x_n, x] &= \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}
 \end{aligned}$$

Definition 2.11 (Hermite-Interpolation) Die Hermitesche Interpolationsaufgabe lautet:

Gegeben $x_i, i = 0, \dots, m$ (paarweise verschieden), $y_i^{(k)}, i = 0, \dots, m, k = 0, \dots, \mu_i, \mu_i \geq 0$.

Gesucht: $p \in P_n, n = m + \sum_{i=0}^m \mu_i, p^{(k)}(x_j) = y_j^{(k)}, i = 0, \dots, m, k = 0, \dots, \mu_i, (\mu_i + 1)$ -fache Stützstellen.

Beispiel 2.12 $x_0 = -1, x_1 = 1, m = 1, y_0^{(0)} = 0, y_1^{(0)} = 1, y_1^{(1)} = 2 \implies \mu_0 = 0, \mu_1 = 1 \implies n = 1 + 0 + 1 = 2 \implies p(x) = x^2$

Analog zur Lagrange-Interpolation:

- Existenz + Eindeutigkeit
- Darstellung des Interpolationsfehlers

Wiederholung: Fehlerdarstellung Lagrange-Interpolation. Sei $f \in C^{n+1}[a, b]$. $\exists \xi_x \in \overline{(x_0, \dots, x_n, x)}$

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

$$f(x) - p(x) = f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

$$f[x_0, \dots, x_n, x] = \int_0^1 \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_n} f^{(n+1)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \dots + t_n(x_n - x_{n-1}) + t(x_n - x)) dt dt_n \dots dt_1$$

Hermite-Interpolation: Such $p \in P_n$, $n = m + \sum_{i=0}^m \mu_i$

$$p^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)}, i = 0, \dots, m, k = 0, \dots, \mu_i$$

2.3 Richardsonsche Extrapolation zum Limes

Gegeben: Numerischer Prozess mit Werten $a(h)$, $h \in \mathbb{R}_+$, $h \rightarrow 0$.

Gesucht: $a(0) = \lim_{h \rightarrow 0} a(h)$

Idee: Für $h_i > 0$, $i = 0, \dots, n$, interpoliere $(h_i, a(h_i))$ und berechne $p_n(0)$

Beispiel 2.13 (Numerische Differentiation) Sei $f \in C^\infty[a, b]$, $x \in (a, b)$. Nach Taylor gilt

$$a(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{f^{(2i+1)}(x)}{(2i)!} h^{2i}$$

Satz 2.14 (Extrapolationsfehler) Für $h \in \mathbb{R}_+$ habe $a(n)$ die Entwicklung

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^n a_j h^{jq} + a_{n+1}(h) h^{(n+1)q}$$

mit $q > 0$, Koeffizienten a_j und

$$a_{n+1}(h) = a_{n+1} + \mathcal{O}(1)$$

Die Folge $(h_i)_{i \in \mathbb{N}}$ erfülle

$$0 \leq \frac{h_{k+1}}{h_k} \leq \rho < 1$$

($\implies h_k$ positiv, monoton fallend). Dann gilt für das Interpolationspolynom $p_1^{(k)} \in P_n$ (in h^q) durch

$$(h_k^q, a(h_k)), \dots, (h_{k+n}^q, a(h_{k+n}))$$

$$a(0) - p_n^{(k)}(0) = \mathcal{O}(h_k^{(n+1)q})$$

($k \rightarrow \infty$)

Beweis Abkürzungen $z = h^q$, $z_k = h_k^q$. Interpoliere $(z_{k+i}, a(h_{k+i}))$, $i = 0, \dots, n$.

$$p_n(z) = \sum_{i=0}^n a(h_{k+i}) L_{k+i}^{(n)}(z)$$

$$L_{k+1}^{(n)}(z) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n \frac{z - z_{k+l}}{z_{k+1} - z_{k+l}}$$

Übung:

$$\sum_{i=0}^n x_{k+1}^n(0) = \begin{cases} 1 & r = 0 \\ 0 & r = 1, \dots, n \\ (-1)^n \prod_{j=0}^n z_{k+j} & r = n+1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} p_n(0) &= \sum_{i=0}^n \left(a_0 + \sum_{j=1}^n a_j z_{k+i}^j + a_{n+1}(h_{k+1}) z_{k+i}^{n+1} \right) L_{k+i}^{(n)}(0) \\ &= a_0 \underbrace{\sum_{i=0}^n L_{k+1}^{(n)}}_{=1} + \sum_{j=1}^n a_j \underbrace{\sum_{i=0}^n z_{k+1}^j L_{k+i}^{(n)}(0)}_0 \\ &= +a_{n+1} \underbrace{\sum_{i=0}^n z_{k+1}^{n+1} L_{k+i}^{(n)}}_{=(-1)^n \prod_{i=0}^n z_{k+i}} + \sum_{i=0}^n \imath(1) z_{k+i}^{n+1} L_{k+i}^{(n)}(0) \end{aligned}$$

Da man Landau-Symbole nicht ausklammern darf, schätzen wir ab:

$$\begin{aligned} \left| L_{k+i}^{(n)}(0) \right| &= \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^n \left| \frac{z_k + l}{z_{k+i} - z_{k+l}} \right| \\ &\leq \prod_{l=0}^{i-1} \left| \frac{z_{n+l}}{z_{k+i} - z_{k+l}} \right| \prod_{l=1+i}^n \left| \frac{z_{k+i}}{z_{k+i} - z_{k+l}} \right| \\ &= \prod_{l=0}^{i-1} \frac{1}{\left| \frac{z_{k+i}}{z_{k+l}} - 1 \right|} \prod_{l=i+1}^n \frac{1}{\left| 1 - \frac{z_{k+l}}{z_{k+i}} \right|} \\ &\leq \frac{1}{(1 - \rho^q)^n} \\ \implies p_n(0) &= a_0 + a_{n+1} (-1)^n \prod_{i=0}^n z_{k+i} + \imath(z_k^{n+1}) \\ &= a_0 + \mathcal{O}(h_k^{(n+1)q}) \end{aligned} \quad \square$$

2.4 Spline-Interpolation

Problem: Oszillationen des Interpolationspolynoms, wenn man Stützstellen nicht geeignet wählen kann. Abhilfe: Stückweise polynomielle Interpolation:

- Zerlegung: $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$
- Teilintervalle: $I_i = [x_{i-1}, x_i], i = 1, \dots, n$
- Feinheit: $h = \max_{i=1, \dots, n} h_i$ mit $h_i = |I_i| = x_i - x_{i-1}$
- Vektorräume stückweise polynomieller Funktionen

$$S_n^{k,r}[a, b] = \{p \in C^r[a, b] \mid p|_{I_i} \in P_k(i_i)\}, i = 1, \dots, n$$

Beispiel 2.15 (Stückweise lineare Interpolation) $\implies p \in S_n^{(1,0)}[a, b]$. Fehlerabschätzung:

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

Beispiel 2.16 (Splines) Zweimal stetig differenzierbare, stückweise kubische Polynome. Motivation: Biegestab. Minimiere Biegeenergie

$$\int_{x_0}^{x_n} s''(x)^2 dx$$

Definition 2.17 (Kubischer Spline) Eine Funktion $s_n : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ heißt kubischer Spline bezüglich $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, wenn gilt

1. $s_n \in C^2[a, b]$
2. $s_n|_{I_i} \in P_3, i = 1, \dots, n$

Gilt zusätzlich

3. $s_n''(a) = s_n''(b) = 0$ so heißt s_n natürlicher Spline.

Existenz des interpolierenden kubischen Spline zu Knotenwerten $s_n(x_i) = y_i, i = 0, \dots, n$

Satz 2.18 (Spline-Interpolation) Der interpolierende kubische Spline existiert und ist eindeutig bestimmt durch zusätzliche Vorgabe von $s_n''(a), s_n''(b)$

Beweis s hat die Form

$$s(x)|_{I_i} = p_i(x), i = 1, \dots, n, p_i \in P_3(I_i)$$

4 Koeffizienten auf jedem der n Intervalle ergeben $4n$ Freiheitsgrade. Zur Bestimmung:

$s(x_i) = y_i, i = 0, \dots, n$	2n Gleichungen
$s' \in C[a, b]$	$n - 1$
$s'' \in C[a, b]$	$n - 1$
Zusatzbedingung für $s_n''(a), s_n''(b)$	2
	<hr/>
	4n

\implies quadratisches lineares Gleichungssystem, $4n \times 4n$

$$N = \{\omega \in C^2[a, b] \mid \omega_{x_i} = 0, i = 0, \dots, n\}$$

Seien $s_n^{(1)}$ und $s_n^{(2)}$ interpolierende Splines $\implies s = s_n^{(1)} - s_n^{(2)} \in N$. Für $\omega \in N$ beliebig:

$$\begin{aligned} \int_a^b s''(x)\omega''(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s''(x)\omega''(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \left[- \int_{x_i}^{x_{i+1}} s^{(3)}\omega' dx + s''\omega' \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \right] \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \left[- \int_{x_i}^{x_{i+1}} s^{(4)}\omega dx - s^{(3)}\omega \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} + s''\omega' \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \right] \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} s''\omega' \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = s''(x)\omega'(x) - s''(a)\omega'(a) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Speziell für $\omega = s$

$$\int_a^b |s''(x)|^2 dx = 0$$

$\implies s$ ist linear $0 = s(a) = s(b) = 0$

□

Wiederholung: Extrapolation $a(h)$, $h_i > 0$, $a(0) = \lim_{h \rightarrow 0} a(h)$ Fehler: Entwicklung

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^n a_j h^{a_j}$$

$$0 < \frac{h_{k+1}}{h_k} \leq \rho < 1$$

interpolieren $(h_{k+1}^a, a(h_{k+1}))$, $i = 1, \dots, n$

$$\implies a(0) - p_i^{(k)}(0) = \mathcal{O}(h_k^{(n+1)})$$

Splines: $S_h^{(k,r)}[a, b] = \{p \in C^r[a, b] \mid p|_{[x_i, x_{i+1}]} \in P_k[x_i, x_{i+1}]\}$ Splines: $s \in S_k^{(n,x)}[a, b]$.

Natürliche kubische Splines: $s''(a) = s''(b) = 0$.

Satz 2.19 Für den interpolierenden natürlichen Spline S_n durch $x_0, \dots, x_n, y_0, \dots, y_n$ gilt

$$\int_a^b |S'(x)|^2 dx \leq \int_a^b |g''(x)|^2 dx$$

bezüglich allen Funktionen $g \in C^2[a, b]$ mit $g(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$

Beweis Sei $N = \{\omega \in C^2[a, b] \mid \omega(x_i) = 0, i = 0, \dots, n\} \implies \omega = g - I_n \in N$.

$$\begin{aligned} \implies \int_a^b |g''(x)|^2 dx &= \int_a^b |S_n''(x) + \omega''(x)|^2 dx \\ &= \int_a^b |S_n''(x)|^2 dx + \underbrace{2 \int_a^b S_n''(x) \omega''(x) dx}_0 + \underbrace{\int_a^b |\omega''(x)|^2 dx}_{\geq 0} \\ &\geq \int_a^b |S_n''(x)|^2 dx \end{aligned} \quad \square$$

Satz 2.20 (Approximationsfehler) Sei $f \in C^4[a, b]$. Erfüllt der interpolierende kubische Spline $S_1''(a) = f''(a) \wedge S_n(b) = f''(b)$ so gilt:

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - S_n(x)| \leq \frac{1}{2} h^4 \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|$$

Ohne Beweis.

2.5 Gauß Approximation

Wir betrachten $C[a, b]$, die Menge der stetigen Funktionen auf $[a, b]$ über dem Zahlkörper $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$, als \mathbb{K} -Vektorraum. Für $f, g \in [a, b]$ erfüllt

$$(f, g) := \int_a^b f(t) \overline{g(t)} dt$$

die Eigenschaften eines Skalarproduktes:

1. Definitheit:

$$(f, f) = \int_a^b f(t) \overline{f(t)} dt = \int_a^b |f(t)|^2 dt \geq 0$$

$$\text{und } (f, f) = 0 \implies f = 0$$

2. $\alpha \in \mathbb{K}, h \in C[a, b]$:

$$(\alpha f + g, h) = \int_a^b (\alpha f(t) + g(t)) \overline{h(t)} dt = \alpha \int_a^b f(t) \overline{h(t)} dt + \int_a^b g(t) \overline{h(t)} dt = \alpha(f, h) + (g, h)$$

3. Symmetrie:

$$(f, g) = \int_a^b f(t) \overline{g(t)} dt = \int_a^b \overline{\overline{f(t)} g(t)} dt = \int_a^b g(t) \overline{f(t)} dt = \overline{(g, f)}$$

Durch $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ ist damit eine Norm auf $C[a, b]$ gegeben:

1. Definitheit:

$$\|f\| \geq 0, f = 0 \iff \|f\| = 0$$

2. Sublinearität: Wir benutzen die Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\begin{aligned} |(f, g)| &\leq \|f\| \|g\| \\ \implies \|f + g\|^2 &= (f + g, f + g) = (f, f) + (f, g) + (g, f) + (g, g) \\ &= \|f\|^2 + \underbrace{2\Re(f, g)}_{\leq 2|(f, g)|} + \|g\|^2 \\ &\leq \|f\|^2 + 2\|f\| \|g\| + \|g\|^2 = (\|f\| + \|g\|)^2 \\ \implies \|f + g\| &\leq \|f\| + \|g\| \quad (\text{Dreiecksungleichung}) \end{aligned}$$

3. Homogenität:

$$\|\alpha f\| = \sqrt{(\alpha f, \alpha f)} = \sqrt{\alpha \bar{\alpha} (f, f)} = |\alpha| \|f\|$$

Mit diesem Skalarprodukt und dieser Norm ist also $C[a, b]$ ein Prähilbertraum.

Satz 2.21 (Gauß-Approximation) Sei H ein Prähilbertraum und sei $S \subset H$ ein endlichdimensionaler Teilraum. Dann existiert zu jedem $f \in H$ eine eindeutig bestimmte „beste Approximation“ $g \in S$

$$\|f - g\| = \min_{\varphi \in S} \|f - \varphi\|$$

Beweis Vorüberlegung: Wenn $g \in S$ eine beste Approximation ist, so hat für $\varphi \in S$ die Hilfsfunktion

$$F_\varphi(t) = \|f - g - t\varphi\|^2, t \in \mathbb{R}$$

bei $t = 0$ ein Minimum. Somit ist

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} F_\varphi(t) \Big|_{t=0} = \frac{d}{dt} [(f - g - t\varphi, f - g - t\varphi)] \Big|_{t=0} \\ &= \frac{d}{dt} [(f - g, f - g) - t(\varphi, f - g) - f(f - g, \varphi) + t^2(\varphi, \varphi)] \Big|_{t=0} \\ &= 2\Re(f - g, \varphi) \forall \varphi \in S \end{aligned}$$

Falls $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ ergibt testen mit $i\varphi$

$$0 = \Re(f - g, i\varphi) = -\Re(f - g, \varphi) = \Im(t - g, \varphi) \implies (f - g, \varphi) = 0 \forall \varphi \in S$$

Interpretation: Der Fehler $f - g$ ist orthogonal zum Teilraum S . Gilt umgekehrt die letzte Gleichung für ein $g \in S$, so gilt für $\varphi \in S$

$$\|f - g\|^2 = (f - g, f - g) = (f - g, f - \varphi) + \underbrace{(f - g, \varphi)}_0$$

Cauchy-Schwarz:

$$\begin{aligned} & \leq \|f - g\| \|f - \varphi\| \\ \Rightarrow \|f - g\| & \leq \inf_{\varphi \in S} \|f - \varphi\| \end{aligned}$$

$\Rightarrow g$ ist Bestapproximation.

Existenz und Eindeutigkeit: Da $n = \dim S < \infty$, besitzt S eine Basis $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$. Jedes $g \in S$ hat eine eindeutige Darstellung

$$\begin{aligned} g &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i \\ \Rightarrow \left(f - \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i, \varphi \right) &= (f, \varphi) - \sum_{i=1}^n \alpha_i (\varphi_i, \varphi) = 0 \quad \forall \varphi \in S \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n (\varphi_i, \varphi) \alpha_i &= (f, \varphi_k), \quad k = 1, \dots, n \end{aligned}$$

Dies ist ein lineares $n \times n$ Gleichungssystem. Notation: $A\alpha = B$ mit $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T \in \mathbb{K}^n$, $b \in \mathbb{K}^n$, $b_i = (f, \varphi_i)$, $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$, $A_{ki} = (\varphi_i, \varphi_k)$. A ist hermitisch wegen $(\varphi_i, \varphi_k) = \overline{(\varphi_k, \varphi_i)}$. Sei $\alpha \in \mathbb{K}^n$ beliebig. Wegen

$$\begin{aligned} \alpha^H A \alpha &= \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^n \bar{\alpha}_k (\varphi_i, \varphi_k) \alpha_i \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^n (\alpha_i, \varphi_i, \alpha_k, \varphi_k) \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i, \sum_{k=1}^n \alpha_k \varphi_k \right) = (g, g) > 0 \end{aligned}$$

für $\alpha \neq 0$ ($\Rightarrow g \neq 0$) ist A also positiv definit und damit invertierbar \Rightarrow mit $\alpha = A^{-1}b$ löst das eindeutig bestimmte Gleichungssystem und g ist die Bestapproximation. \square

Das lineare Gleichungssystem besitzt besonders einfache Lösung, wenn die Basis $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ eine Orthogonalbasis ist, das heist $(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \alpha_i &= (f, \varphi_i), \quad i = 1, \dots, n \\ \Rightarrow g &= \sum_{i=1}^n (f, \varphi_i) \varphi_i \quad \text{ist Bestapproximation} \end{aligned}$$

Lemma 2.22 (Gram-Schmidt-Algorithmus) Zu jeder Basis $\{\psi_1, \dots, \psi_k\}$ von S lässt sich eine Orthonormalbasis $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ konstruieren.

$$\tilde{\varphi}_1 = \psi_1, \quad \varphi_1 = \frac{\tilde{\varphi}_1}{\|\tilde{\varphi}_1\|}$$

$$\tilde{\varphi}_k = \psi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\psi_k, \varphi_i) \varphi_i, \quad \varphi_k = \frac{\tilde{\varphi}_k}{\|\tilde{\varphi}_k\|}$$

Beweis Per Induktion nach n .

$n = 1$: Da $\psi \neq 0$ gilt $(\varphi_1, \varphi_1) = \frac{|\psi_1|^2}{\|\psi_1\|^2} = 1$.

$n > 1$: Sei $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ eine Orthonormalbasis. Es gilt

$$0 \neq \tilde{\varphi}_n = \psi_n - \sum_{k=1}^{n-1} (\psi_n, \varphi_k) \varphi_k$$

da sonst $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ linear abhängig wären. Für $i = 1, \dots, n-1$ gilt

$$(\varphi_n, \varphi_1) = (\psi_n, \varphi_1) - \sum_{k=1}^{n-1} (\psi_n, \varphi_k) \underbrace{(\varphi_k, \varphi_1)}_{\delta_{ik}} = 0$$

und $\|\varphi_n\|^2 = 1$ nach Konstruktion. □

Wiederholung: Gauß-Approximation, Prähilbertraum H , Teilraum $S \subset H$, $\dim S = n < \infty$

$$\forall f \in H \exists! g \in S : \|f - g\| \leq \min_{\varphi \in S} \|f - \varphi\|$$

Äquivalent: $e := f - g \perp S \iff (f - g, \varphi) = 0 \forall \varphi \in S$

Orthogonalisiere Basis $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ von S mit Gram-Schmidt

$$\tilde{\varphi}_i = \begin{cases} \psi_i & i = 1 \\ \psi_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{(\psi_i, \tilde{\varphi}_j)}{\|\tilde{\varphi}_j\|^2} \tilde{\varphi}_j & i = 2, \dots, n \end{cases}$$

Normalisieren: $\varphi_k = \|\tilde{\varphi}_k\|^{-1} \tilde{\varphi}_k$. $(\varphi_1, \dots, \varphi_n)$ Orthonormalbasis $\implies (\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$

$$\implies g = \sum_{k=1}^n (f, \varphi_k) \varphi_k$$

Erinnerung:

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}, \quad f[g_k] = f(k)$$

3 Numerische Integration

Approximation von bestimmten Integralen reeller Funktionen $f \in C[a, b]$ durch Quadraturformeln

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx I^{(n)}(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$$

mit Stützstellen $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ und Gewichten $\alpha_i \in \mathbb{R}$.

Beispiel 3.1 (Summierte Rechteckregel)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_i)$$

Interpolatorische Quadraturformeln.

Idee: Interpoliere f durch ein Interpolationspolynom auf $[a, b]$!

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$

$$\Rightarrow I^{(n)}(f) = \int_a^b p_n(x)dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b \underbrace{L_i^{(n)}(x)}_{=\alpha_i} dx$$

Quadraturgewichte hängen nur von a, x_0, \dots, x_n, b ab.

Satz 3.2 (Lagrange-Quadratur) Für interpolatorische Quadraturformeln gilt

$$I(f) - I^{(n)}(f) = \int_a^b f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx$$

Beweis Restglieddarstellung der Interpolation. □

Definition 3.3 Eine Quadraturformel $I^{(n)}$ wird „von der Ordnung m “ genannt, wenn sie alle $p \in P_{m-1}$ exakt integriert. Das heißt

$$\int_a^b p(x)dx = I^{(n)}(p) \forall p \in P_{m-1}$$

\Rightarrow Interpolatorische Quadraturformeln zu $n+1$ Stützstellen sind (mindestens) von der Ordnung $n+1$.

Spezialfall: Äquidistante Stützstellen: Newton-Cotes-Formeln:

1. Abgeschlossene Formeln ($H = \frac{b-a}{n}, x_i = a + iH, a = x_0, b = x_n$)

$$I^{(1)}(f) = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \quad (\text{Trapezregel})$$

$$I^{(2)}(f) = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)] \quad (\text{Simpsonregel, Keplersche Fassregel})$$

$$I^{(3)}(f) = \frac{b-a}{8} [f(a) + 3f(a+H) + 3f(b-H) + f(b)] \quad (3/8 \text{ Regel})$$

2. Offene Formeln $\left(H = \frac{b-a}{n+2}, x_i = a + (i+1)H, a < x_0, x_n < b\right)$

$$I^{(0)}(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad (\text{Mittelpunktregel})$$

$$I^{(1)}(f) = \frac{(b-a)}{2}(f(a+H) + f(b-H))$$

$$I^{(1)}(f) = \frac{(b-a)}{3}\left(2f(a+H) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 2f(b-H)\right)$$

Satz 3.4 (Quadraturrestglieder) 1. Trapezregel: Für jedes $f \in C^2[a, b]$ gibt es ein $\xi \in [a, b]$ mit

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

2. Simpson-Regel: Für jedes $f \in C^4[a, b]$ $\exists \xi \in [a, b]$ sodass

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)] = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$$

3. Mittelpunktregel: $\forall f \in C^2[a, b]$ $\exists \xi \in [a, b]$ sodass

$$\int_a^b f(x)dx - (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) = \frac{(b-a)^3}{24}f''(\xi)$$

Satz 3.5 (Verallgemeinerter Mittelwertsatz) Sei $f \in C[a, b]$, $g \geq 0$ oder $g \leq 0$ integrierbar. Dann $\exists \xi \in [a, b]$, sodass

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx$$

Beweis (Beweis der Quadraturrestglieder).

1. Für $x \in [a, b]$ ist $(x-a)(x-b) \leq 0$

$$\implies I(f) - I^{(1)}(f) = \int_a^b f[x_0, x_1, x] \prod_{i=1}^1 (x - x_i)dx$$

Verallgemeinerter Mittelwertsatz: $\exists \xi \in [a, b]$, sodass

$$\begin{aligned} &= \frac{f''(\xi)}{2!} \left(-\frac{1}{6}(b-a)^3\right) \\ &= -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3 \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
I(f) - I^{(2)}(f) &= \int_a^b f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x\right] (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) (x-b) \\
&= \int_a^b \frac{f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x\right] - f\left[\frac{a+b}{2}, a, \frac{a+b}{2}, b\right]}{x - \frac{a+b}{2}} (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b) dx + f\left[\frac{a+b}{2}, a, \frac{a+b}{2}, b\right] \\
&= \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_a^b (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b) dx \\
&= -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880} (b-a)^5
\end{aligned}$$

3. analog zu 2.

□

Probleme:

- negative Gewichte α_i ab $n = 7$ (geschlossen) und $n = 2$ (offen) \implies Auslöschungsgefahr
- Oszillationen des Lagrange-Interpolanten für äquidistante Gitter (Runge-Phänomen), im Allgemeinen $I^{(n)}(f) \not\rightarrow I(f), n \rightarrow \infty$

Abhilfe: Summierte Quadraturformeln

$$I_n^{(n)}(f) = \sum_{i=1}^{N-1} I_{[x_i, x_{i+1}]}^{(n)}(f), h = \frac{b-a}{N}, x_i = a + ih$$

Gilt die lokale Fehlerdarstellung:

$$I_{[x_i, x_{i+1}]}(f) - I_{[x_i, x_{i+1}]}^{(n)}(f) = \omega_n h^{n+2} f^{(m+1)}(\xi_i), \quad \xi_i \in [a, b]$$

für $m \geq n$ gilt:

$$\begin{aligned}
I(f) - I_n^{(n)}(f) &= \sum_{i=0}^{N-1} [I_{[x_i, x_{i+1}]}(f) - I_{[x_i, x_{i+1}]}^{(n)}(f)] \\
&= \omega_n h^{m+2} N \underbrace{\sum_{i=0}^{N-1} \frac{f^{(m+1)}(\xi_i)}{N}}_{\in [\min_i f^{(m+1)}(\xi_i), \max_i f^{(m+1)}(\xi_i)]} \\
&= \omega_n h^{m+2} N f^{(m+1)}(\xi) \quad (\text{für ein } \xi \in [a, b] \text{ (Verallg. Mittelwertsatz)}) \\
&= \omega_n h^{(m+1)} (b-a) f^{(m+1)}(\xi)
\end{aligned}$$

Beispiel 3.6 1. Summierte Trapezregel ($m = 1$)

$$\begin{aligned}
I_h^{(1)} &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{x_{i+1} - x_i}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \\
&= \frac{h}{2} f(a) + h \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + \frac{h}{2} f(b) \\
I(f) - I_h^{(1)}(f) &= -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \xi \in [a, b]
\end{aligned}$$

2. Summierte Simpson-Regel ($m = 3$)

$$\begin{aligned}
I_h^{(2)}(f) &= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{x_{i+1} - x_i}{6} [f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1})] \\
&= \frac{h}{6} [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=0}^{N-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(b)] \\
I(f) - I_h^{(2)}(f) &= -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \xi \in [a, b]
\end{aligned}$$

3. Summierte Mittelpunktsregel ($m = 1$)

$$\begin{aligned}
I_h^{(0)}(f) &= \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i) f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = h \sum_{i=0}^{N-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \\
I(f) - I_h^{(0)}(f) &= \frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi), \quad \xi \in [a, b]
\end{aligned}$$

Widerholung Quadratur

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) = I^{(n)} f$$

- Interpolatorische Quadraturregel, Äquidistante Stützstellen
→ Newton-Cotes Formeln (abgeschlossen, offen)
- Summierte Formeln $x_i = a + iH, H > 0$

$$I_H^{(n)}(f) = \sum_{i=1}^n I_{[x_{i-1}, x_i]}^{(n)}(f)$$

3.1 Gaußsche QuadraturformelnFrage: Wie wählt man x_i in

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^N \alpha_i f(x_i)$$

optimal? Nach Konstruktion ist $I^{(n)}$ mindestens von der Ordnung $n + 1$

Lemma 3.7 Interpolatorische Quadraturformeln sind höchstens von der Ordnung $2n + 2$

Beweis Wähle

$$p(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)^2 \in P_{2n+2}$$

$$\implies 0 < \int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i \underbrace{p(x_i)}_0 = 0 \quad \square$$

Gaußsche Quadraturformen erreichen die Maximalordnung $2n+2$ (exakt für $p \in P_{2n+1}$) Herleitung:
Für $x_0, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{2n+1} \in [a, b]$ betrachte $I^{(n)}(f)$ und $I^{(2n+1)}(f)$

$$\begin{aligned} I(f) - I^{(2n+1)}(f) &= I(f) - \sum_{i=0}^{2n+1} f[x_0, \dots, x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) dx \\ &= I(f) - I^{(n)}(f) - \sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0, \dots, x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) dx \end{aligned}$$

Für $i > n$ gilt

$$\int_a^b \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) dx = \int_a^b \underbrace{\prod_{j=0}^n (x - x_j)}_{P_{n+1}} \underbrace{\prod_{j=n+1}^{i-1} (x - x_j)}_{\in P_n} dx$$

Wähle Stützstellen so, dass

$$0 = \int_a^b \prod_{j=0}^n (x - x_j) q(x) dx = \left(\prod_{j=0}^n (x - x_j), q \right) \forall q \in P_n$$

$$I(f) - I^{(n)}(f) = I(f) - I^{(2n+1)}(f)$$

$\implies I^{(n)}$ ist exakt für $p \in P_{2n+1}$, das heißt von Ordnung $2n + 2$. Mit einem Orthogonalsystem $\{p_0, \dots, p_{n+1}\}$ von P_{n+1} sind die Nullstellen $\lambda_0, \dots, \lambda_n$ von p_{n+1} von Interesse. Frage: Sind die Nullstellen von p_{n+1} reell, einfach und in $[a, b]$?

Satz 3.8 Gegeben sei ein Skalarprodukt auf $C[a, b]$

$$(f, g)_\omega = \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)dx$$

mit integrierbarer Gewichtsfunktion $\omega(x) \geq 0, x \in (a, b)$ mit höchstens endlich vielen Nullstellen. Dann haben die mittels Gram-Schmidt aus $\{1, x, \dots\}$ bezüglich $(\cdot, \cdot)_\omega$ orthogonalisierten Polynome $\{p_0, p_1, \dots\}$ lauter reelle, einfache Nullstellen in $[a, b]$

Beweis Sei $N_n := \{\lambda \in (a, b) \mid \lambda \text{ Nullstelle ungerader Vielfachheit von } p_n\}$. Setze

$$q(x) = \begin{cases} 1 & N_n \neq \emptyset \\ \prod_{i=1}^m (x - \lambda_i) & N_n = \{\lambda_1, \dots, \lambda_m\}, m > 0 \end{cases}$$

Nach dem Fundamentalsatz der Algebra und wegen $p(x) = x^n - r(x)$, $r \in P_{n-1}$, nach Konstruktion mit Gram-Schmidt (ohne Normalisieren) gilt

$$p_n(x) = \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i), \lambda_i \in \mathbb{C}, i = 1, \dots, n$$

Ist λ_I nicht reell, so ist $\bar{\lambda}_i$ auch eine Nullstellen von p_n und

$$(x - \lambda_i)x - \bar{\lambda}_i = (x - \lambda_I)(x - \lambda_i) \implies |x - \lambda_i|^2 \geq 0$$

$\implies p_n q \in P_{n+m}$ ist reell und hat in $[a, b]$ keinen Vorzeichenwechsel.

$$(p_n, q)_\omega = \int_a^b p_n(x)(x)\omega(x)dx \neq 0$$

Für $m < n$ ist das ein Widerspruch zu $p_n \perp p_{n-1} \implies \mu_n = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$. Für $[a, b] = [-1, 1]$ und $\omega \equiv 1$, das heißt $(\cdot, \cdot)_\omega = (\cdot, \cdot)_2$ sind die p_n mittels $p_n(x) = x^n + \dots$ normierte Legendre-Polynome $L_n(x)$. Wir wählen also die Nullstellen $\zeta_0, \dots, \lambda_n$ von p_{n+1} beziehungsweise L_{n+2} als Stützstellen einer interpolatorischen Quadraturformel auf $[-1, 1]$.

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(\lambda_i), \alpha_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - \lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j} dx$$

□

Satz 3.9 (Gauß-Quadratur) Es gibt genau eine interpolatorische Quadraturformel zu $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen auf $[-1, 1]$ mit Ordnung $2n+2$. Ihre Stützstellen sind gerade die Nullstellen. $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in (-1, 1)$ das $(n+1)$ -ten Legendre Polynom $L_{n+1} \in P_{n+1}$ und die Gewichte erfüllen

$$\alpha_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \left(\frac{x - \lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j} \right)^2 dx > 0, i = 0, \dots, n$$

Für $f \in C^{2n+2}[-1, 1]$ besitzt das Restglied die Darstellung

$$R^{(n)} = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 \prod_{j=0}^n (x - \lambda_j)^2 dx, \xi \in (-1, 1)$$

Beweis Existenz: Es gilt $p_{n+1} \perp P_n$ Für $\omega = 1$ und $p_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - \lambda_i) = x^n + \dots$

$$\implies I^{(n)}(f) = I^{(2n+1)}(f)$$

$\Rightarrow I^{(n)}$ hat Ordnung $2n + 2$. Gewichte:

$$L_i^{(x)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - \lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j} \in P_n$$

$$\Rightarrow \left(L_i^{(n)}(x) \right)^2 \in P_{2n}$$

$$\Rightarrow 0 < \int_{-1}^1 \left(L_i^{(n)}(x) \right)^2 dx = \sum_{j=0}^n \alpha_j \underbrace{\left(L_i^{(n)}(x_j) \right)}_{\delta_{ij}} = \alpha_i$$

Eindeutigkeit: Sei $\tilde{I}^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^n \tilde{\alpha}_i f(\tilde{\lambda}_i)$ ebenfalls der Ordnung $2n+2$. Wie oben folgt $\tilde{\alpha}_i > 0$ mithilfe

$$\tilde{L}_i^{(n)}(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{n - \tilde{\lambda}_j}{\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-1}^1 \frac{1}{\tilde{\alpha}_i} \tilde{L}_i^{(n)} p_{n+1}(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^n \frac{\tilde{\alpha}_i}{\tilde{\alpha}_i} \underbrace{\tilde{L}_i^{(n)}(\tilde{\lambda}_j)}_{\delta_{ij}} p_{n+1}(\tilde{\lambda}_j) = p_{n+1}(\tilde{\lambda}_i), i = 0, \dots, n \end{aligned}$$

$\Rightarrow \tilde{\lambda}_i = \lambda_i$ und $\tilde{\alpha}_i = \alpha_i, i = 1, \dots, n$.

Restglied: Für $f \in C^{(2n+2)}[-1, 1]$ hat der Hermite-Interpolant $h \in P_{2n+1}$ zu den Bedingungen

$$h(\lambda_i) = f(\lambda_i), h'(\lambda_i) = f'(\lambda_i), i = 0, \dots, n$$

die Darstellung:

$$f(x) - h(x) = f[\lambda_0, \lambda_0, \dots, \lambda_n, \lambda_n, x] \prod_{i=0}^n (x - \lambda_i)^2$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow I(f) - I^{(f)} &= I(f) - \underbrace{I^{(n)}(h)}_{=I(h)} - \left(I^{(n)}(f) - I^{(n)}(h) \right) \\ &= I(f - h) - I^{(n)}(f - h) \\ &= \int_{-1}^1 f[\lambda_0, \lambda_0, \dots, \lambda_n, \lambda_n] \underbrace{\prod_{i=0}^n (x - \lambda_i)^2}_{>0} dx - \underbrace{\sum_{i=0}^n \alpha_i [f(\lambda_i) - h(\lambda_i)]}_0 \end{aligned}$$

Mit verallgemeinertem Mittelwertsatz folgt:

$$= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 \prod_{i=0}^n (x - \lambda_i)^2 dx$$

□

Die $\lambda_i^{(n)}$ (Nullstellen von p_{n+1}) und die dazugehörigen α_i lassen sich tabellieren. Durch Transformation von $[a, b]$ auf $[-1, 1]$ erhält man eine allgemeine Quadraturformel.

Satz 3.10 (Konvergenz der Gauß-Quadratur) Sei $I^{(n)}(f)$ die $(n+1)$ punktige Gauß-Formel zur Berechnung von $I(f) = \int_{-1}^1 f(x)dx$. Für jedes $f \in C[-1, 1]$ konvergiert $I^{(n)}(f) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} I(f)$

Beweis Es gilt

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i^{(n)} f(\lambda_i^{(n)}), \alpha_i^{(n)} > 0, \sum_{i=0}^n \alpha_i^{(n)} = 2$$

Sei $\varepsilon > 0$. Nach dem Weierstrasschem Approximationssatz gibt es $p_\varepsilon \in P_n$ mit

$$\max_{x \in [-1, 1]} |f(x) - p_\varepsilon(x)| \leq \frac{\varepsilon}{4}$$

Für $n > \frac{1}{2}m - 1$ (das heißt $2n + 2 > m$) gilt

$$\left| I(f) - I^{(n)}(f) \right| \leq \underbrace{|I(f - p_\varepsilon)|}_{\leq \frac{\varepsilon}{4} \cdot 2} + \underbrace{|I(p_\varepsilon) - I^{(n)}(p_\varepsilon)|}_0 + \underbrace{|I^{(n)}(f - p_\varepsilon)|}_{\leq \frac{\varepsilon}{4} \cdot 2} \leq \varepsilon$$

□

Wiederholung: Gauß-Quadratur

- $n + 1$ Stützstellen, Ordnung $2n + 2$ (optimal)
- x_i Nullstellen des Legendre Polynoms p_{n+1}
- $I^{(n)}(f) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} I(f)$ für f stetig
- Verallgemeinerung auf gewichtete Integrale

$$\int_a^b f(x) \omega(x) dx \quad I(f\omega) \quad I_\omega(f)$$

\implies Orthogonalisiere bezüglich

$$(f, g)_\omega = \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)dx$$

3.2 Praktische Aspekte der Quadratur

Ziel: Möglichst hohe Genauigkeit bei möglichst wenig Funktionsauswertungen. Schwierigkeiten:

- Fehlerschätzung: $f^{(k)}$ nur schwer zugänglich für $k > 2 \implies$ a-posteriori Fehlerschätzer.

Beispiel 3.11 1. Vergleiche $I_n(f)$ und $I_{\frac{n}{2}}(f)$ bei summierten Quadraturformeln

2. Extrapolationfehler

- Wiederbenutzung bereits berechneter Werte von f
 - schwierig bei Gauß
 - einfach bei Newton-Cotes

4 Lineare Gleichungssystem

Gegeben: $A \in \mathbb{R}^{m \times n} = (a_{ij}), b \in \mathbb{R}^m$. Gesucht: $x \in \mathbb{R}^n$ mit $Ax = b \implies m$ Gleichungen, n Unbekannte. Das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ heißt

- unterbestimmt, falls $m < n$
- überbestimmt falls $m > n$
- quadratisch falls $m = n$

Störungstheorie:

- Konditionierung von quadratischen linearen Gleichungssystemen
- Fehlereinfluss von Datenfehlern und Rundungsfehlern auf Lösung x

Vektor- und Matrizennormen:

Sei $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$. Erinnerung: Eigenschaften einer Norm: $\|\cdot\| : \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{R}$

- Definitheit: $\|x\| > 0 \forall x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}$
- Positive Homogenität: $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\| \forall x \in \mathbb{K}^n, \alpha \in \mathbb{K}$
- Subadditivität: $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \forall x, y \in \mathbb{K}^n$

Beispiel 4.1 Euklidische Norm: (l_2)

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}$$

Maximumsnorm (l_∞)

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

l_1 -Norm:

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

l_p -Norm, $p \geq 1, p < \infty$

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}$$

Betrachte Vektorraum der $n \times n$ -Matrizen $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$

Definition 4.2 Eine Norm $\|\cdot\|$ auf $\mathbb{K}^{n \times n}$ heißt verträglich mit einer Vektornorm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{K}^n , wenn gilt:

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \forall x \in \mathbb{K}^n, A \in \mathbb{K}^{n \times n}$$

Sie heißt **Matrizennorm**, wenn sie submultiplikativ ist

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\| \forall A, B \in \mathbb{K}^{n \times n}$$

Beispiel 4.3 Die Frobeniusnorm

$$\|A\|_{Fr} = \left(\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}$$

ist eine mit $\|\cdot\|_2$ verträgliche Matrizenorm.
Die natürliche Matrizenorm

$$\|A\| = \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{\substack{x \in \mathbb{K}^n \\ \|x\|=1}} \|Ax\|$$

ist eine mit $\|\cdot\|$ verträgliche Matrizenorm (Übung!). Es gilt

$$\|\mathbb{I}\| = \sup_{\substack{x \in \mathbb{K}^n \\ \|x\|=1}} \|\mathbb{I}x\| = 1$$

Lemma 4.4 Die natürlichen Matrizenormen zu $\|\cdot\|_\infty$ und $\|\cdot\|_1$ sind die „maximale Zeilen-/Spaltensumme“:

$$\|A\|_\infty = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{k=1}^n |a_{jk}|$$

$$\|A\|_1 = \max_{k=1,\dots,n} \sum_{j=1}^n |a_{jk}|$$

Beweis Skript. □

Betrachte: $Ax = b$ und Störung

$$\underbrace{(A + \delta A)}_{\tilde{A}} \underbrace{(x + \delta x)}_{\tilde{x}} = \underbrace{b + \delta b}_{\tilde{b}}$$

Satz 4.5 (Neumann-Reihe) Gilt $\|A\| < 1$, so

$$\mathbb{I} - A \sum_{k=0}^{\infty} A^k = \mathbb{I}$$

Beweis Für die Partialsummen gilt

$$(\mathbb{I} - A) \sum_{k=0}^n A^k = \mathbb{I} - A + A - A^2 + A^2 \dots - A^{n+1} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{I}$$

wegen $\|A^k\| \leq \|A\|^k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$. □

Wiederholung: Kondition numerischer Aufgabe $y = f(x), y \in \mathbb{R}^n, x \in \mathbb{R}^m$.

$$\frac{\Delta y_i}{y_i} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \frac{\Delta x_j}{y_i} = \sum_{j=1}^m \underbrace{\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \frac{x_j}{f_i(x)}}_{=: k_{ij}(x)} \frac{\Delta x_j}{x_j}$$

Neumann-Reihe:

$$\|A\| < 1 \implies (\mathbb{K} - A_a)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} A^n$$

Natürliche Matrixnorm:

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

$\|A\|_{\infty}$: „Zeilensummennorm“

$\|A\|_1$: „Spaltensummennorm“

Euklidisches Skalarprodukt auf \mathbb{K}

$$(x, y)_2 = \bar{y}^T x$$

Lemma 4.6 (Spektralnorm) Für $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ist

$$\|A\|_2 = \max\{\sqrt{|\lambda|} \mid \lambda \text{ Eigenwert von } \bar{A}^T A\}$$

Für hermitesche $A = \bar{A}^T$ gilt:

$$\|A\|_2 = \max\{|\lambda| \mid \lambda \text{ Eigenwert von } A\}$$

Beweis $B = \bar{A}^T A$ ist hermitesch. $\implies B$ hat n reelle Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ und eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren $\{w_1, \dots, w_n\} \subset \mathbb{K}^n$ $Bw_i = \lambda_i w_i$. Jedes $x \in \mathbb{K}^n$ hat eine eindeutige Darstellung

$$x = \sum_{i=1}^n \alpha_i w_i$$

$$\implies \|x\|_2^2 = (x, x)_2 = \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \bar{\alpha}_j \underbrace{(w_i, w_j)_2}_{\delta_{ij}} = \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2$$

$$\|Ax\|_2^2 = (Bx, Bx)_2 = \sum_{i,j=1}^n \lambda_i \alpha_i \overline{(\lambda_j \alpha_j)} \underbrace{(w_i, w_j)}_{\delta_{ij}}$$

$$= \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 |\alpha_i|^2$$

$$\begin{aligned} \|B\|_2^2 &= \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Bx\|_2^2}{\|x\|_2^2} = \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 |\alpha_i|^2}{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2} \\ &\leq \max_{i=1, \dots, n} |\lambda_i|^2 \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} |\lambda_i| &= |\lambda_i| \|\omega_i\|_2 = \|\lambda_i \omega_i\|_2 = \|B \omega_i\|_2 \\ &\leq \|B\|_2 \|\omega_i\|_2 = \|B\|_2, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned} \quad \square$$

Betrachte $Ax = b$ und Störung

$$\underbrace{(A + \delta A)}_{\tilde{A}} \underbrace{(x + \delta x)}_{\tilde{x}} = \underbrace{b + \delta b}_{\tilde{b}}$$

Satz 4.7 (Störungssatz) Die Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ sei regulär und es sei

$$\|\delta A\| \leq \frac{1}{\|A^{-1}\|}$$

Dann ist die gestörte Matrix $\tilde{A} = A + \delta A$ ebenfalls regulär. Für den relativen Fehler der Lösung gilt mit der Konditionszahl von A

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

die Ungleichung

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left[\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right]$$

Beweis

$$\|A^{-1} \delta A\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta A\| < 1$$

Neumann $\implies A + \delta A = A[\mathbb{I} + A^{-1} \delta A]$ ist regulär.

$$(A + \delta A)\tilde{x} = b + \delta b, (A + \delta A)x = b + \delta Ax$$

$$\implies (A + \delta A)\delta x = \delta b - \delta Ax$$

$$\begin{aligned} \|(A + \delta A)^{-1}\| &= \|[A(\mathbb{I} + A^{-1} \delta A)]^{-1}\| \\ &= \|(\mathbb{I} + A^{-1} \delta A)^{-1} A^{-1}\| \leq \left\| \sum_{n=0}^{\infty} (-A^{-1} \delta A)^n \right\| \|A^{-1}\| \\ &\leq \left(\sum_{n=0}^{\infty} \|A^{-1} \delta A\|^n \right) \|A^{-1}\| = \frac{1}{1 - \|A^{-1} \delta A\|} \|A^{-1}\| \end{aligned}$$

$$\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$$

$$\|\delta x\| \leq \|(A + \delta A)^{-1}\| [\|\delta b\| + \|\delta A\| \|x\|]$$

$$\leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1} \delta A\|} [\|\delta b\| + \|\delta A\| \|x\|]$$

$$\leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|A\| \|A\|^{-1}} \left[\frac{\|\delta b\|}{\|x\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right]$$

$$\frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left[\frac{\|Sb\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{A} \right] \|x\| \quad \square$$

Ist $\text{cond}(A)\|\delta A\| \ll \|A\|$, so gilt

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \left[\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{A} \right]$$

Die Konditionszahl hängt von der verwendeten Norm ab.

Beispiel 4.8 1. $\text{cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$

2. Für die Spektralnrm gilt:

$$\text{cond}_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\frac{|\mu_{\max}|}{|\mu_{\min}|}}$$

wobei μ_{\max}, μ_{\min} betragsgrößer beziehungsweise kleinster Eigenvektor von $\bar{A}^T A$. Ist $A = A$, Ist $A = \bar{A}^T$ so gilt:

$$\text{cond}_2(A) = \frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}$$

mit λ_{\max} und λ_{\min} Betrasgrößer beziehungsweise kleinster Eigenvektor von A . Regel: Es gelte $\text{cond}(A) \approx 10^s$

$$\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \approx 10^{-k}, \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \approx 10^{-k}$$

Dann muss ein relativer Fehler von

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \approx 10^{s-k}$$

erwartet werden. Mit $\|\cdot\| = \|\cdot\|_\infty$ verliert man s Stellen Genauigkeit.

Beispiel 4.9

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \varepsilon \in (0, 1], A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon^{-1} \\ 0 & \varepsilon^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &\implies \|A\|_\infty = 2, \|A^{-1}\|_\infty = 1 + \varepsilon^{-1} \\ &\implies \text{cond}_\infty \|A\| \|A^{-1}\| = 2 + \varepsilon^{-1} \end{aligned}$$

für $\varepsilon = 10^{-8}$ kann man bereits 8 Stellen Genauigkeit verlieren.

Ist die Abschätzung im Störungssatz scharf? Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit mit Eigenwerten $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$. Wähle: $\delta A = 0, b = \omega_1, \delta b = \varepsilon \omega_k, \varepsilon \neq 0$

$$\begin{aligned} Ax = b &\implies x = \frac{1}{\lambda_1} \omega_1 \\ A\tilde{x} = b + \delta b &\implies \tilde{x} = \frac{1}{\lambda_1} \omega_1 + \varepsilon \frac{1}{\lambda_k} \omega_k \\ \implies \frac{\|\delta x\|_2}{\|x\|_2} &= |\varepsilon| \frac{\lambda_1}{\lambda_n} \frac{\|\omega_n\|_2}{\|\omega_1\|_2} \\ &= \text{cond}(A) \frac{\|\delta b\|_2}{\|b\|_2} \end{aligned}$$

4.1 Eliminationsverfahren

Direkte Methode zur Lösung von $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Spezialfall: A obere Dreiecksmatrix $a_{ij} = 0, i > j$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & \dots & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Ist $a_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$ löst man durch Rückwärtseinsetzen

$$x_j = \begin{cases} \frac{b_n}{a_{nn}} & j = n \\ \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=j+1}^n a_{jk} x_k \right) & j = n-1, \dots, 1 \end{cases}$$

Arithmetische Operationen:

$$\sum_{j=1}^n j = \frac{(n+1)n}{2} = \frac{n^2}{2} + \mathcal{O}(n)$$

Eine Operation: eine Division oder eine Multiplikation und eine Addition. Wiederholung: Konditionszahl einer Matrix

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n} : \text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

Störungssatz: $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left[\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \right]$$

Gaußsches Eliminationsverfahren

Umformung von $Ax = b$ auf $Rx = c$ mit R obere Dreiecksmatrix mittels

- Vertauschen von Gleichungen

- Addition von Vielfachen einer Gleichung zu einer anderen

Annahme: A hat Vollrang

0. Setze $A^{(0)} = A, b^{(0)} = b$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(0)} & \dots & a_{1n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & \dots & a_{nn}^{(0)} & b_n^{(0)} \end{array} \right]$$

1. Wähle $r \in \{1, \dots, n\}$ mit $a_{r1}^{(0)} \neq 0$ (Pivotelement) und vertausche 1. und r -te Zeile

$$\left[\begin{array}{ccc|c} \tilde{a}_{11}^{(0)} & \dots & \tilde{a}_{1n}^{(0)} & \tilde{b}_1^{(0)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \tilde{a}_{n1}^{(0)} & \dots & \tilde{a}_{nn}^{(0)} & \tilde{b}_n^{(0)} \end{array} \right] := [\tilde{A}^{(0)} \mid \tilde{b}^{(0)}]$$

2. Für $j = 2, \dots, n$ eliminiere $\tilde{a}_{j1}^{(0)}$ durch Subtraktion von $\frac{\tilde{a}_{j1}^{(0)}}{\tilde{a}_{11}^{(0)}} := q_{j1}$ mal der ersten Zeile von den Zeilen $2, \dots, n$:

$$\left[\begin{array}{cccc|c} \tilde{a}_{11}^{(0)} & \tilde{a}_{12}^{(0)} & \dots & \tilde{a}_{1n}^{(0)} & \tilde{b}_1^{(0)} \\ 0 & \tilde{a}_{22}^{(1)} & \dots & \tilde{a}_{2n}^{(1)} & \tilde{b}_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \tilde{a}_{n2}^{(1)} & \dots & \tilde{a}_{nn}^{(1)} & \tilde{b}_n^{(1)} \end{array} \right] := [A^{(1)} \mid b^{(1)}]$$

Fahre fort auf kleinerem System $\implies [A^{(0)} \mid b^{(0)}] \rightarrow [A^{(1)} \mid b^{(1)}] \rightarrow \dots \rightarrow [A^{(n-1)} \mid b^{(n-1)}] =: [R \mid c]$

Wird im k -ten Schritt $[A^{(k-1)} \mid b^{(n-1)}] \rightarrow [\tilde{A}^{(k-1)} \mid \tilde{b}^{(n-1)}] \rightarrow [A^{(k)} \mid b^{(k)}]$ das Pivot-Element $q_{r_k k}^{k-1}$ gewählt, so gilt $[\tilde{A}^{(k-1)} \mid \tilde{b}^{(k-1)}] = P_k [A^{(k-1)} \mid b^{(k-1)}]$ mit der Permutationsmatrix

$$P_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & 1 & & \\ 1 & \dots & \dots & \dots & 0 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad G_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & -q_{k+1,k}^{(k)} & 1 & & & & \\ & & \vdots & & \ddots & & & \\ & & -q_{n,k}^{(k)} & & & & 1 & \end{pmatrix}$$

Mit den Fehlstellungen von P_k an k und r_k und der Fehlspalte von G_k bei k . Weiterhin gilt: $[A^{(k)} \mid b^{(k)}] = G_k[\tilde{A}^{(k-1)} \mid \tilde{b}^{(k-1)}]$ mit $q_{jk}^{(k)} = \tilde{a}_{jk}^{(k-1)} / \tilde{a}_{kk}^{(k-1)}$. G_k heißt Frobenius Matrix. Wegen $P_k^{-1} = P_k$ und

$$G_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & q_{k+1,k}^{(k)} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & q_{n,k}^{(k)} & & & 1 \end{pmatrix}$$

haben $Ax = b$ und $A^{(k)}x = b^{(k)}$ dieselbe Lösung:

$$Ax = b \iff A^{(k)}x = G_{n-1}P_{n-1} \dots G_1P_1Ax = G_{n-1}P_{n-1} \dots G_1P_1b = b^{(k)}$$

Wahl des Pivot-Elementes

Ziel: Numerische Stabilität.

1. Spaltenpivotierung:

$$|a_{r_k,k}^{(k-1)}| = \max_{j=k,\dots,n} |a_{jk}^{(k-1)}|$$

2. Totalpivotierung

$$|a_{r_k,s_k}^{(k-1)}| = \max_{i,j=k,\dots,n} |a_{ij}^{(k-1)}|$$

- bessere Stabilität
- teurer
- Permutationsmatrizen Q_k für x

$$\underbrace{G_k P_k \dots G_1 P_1 A Q_1 \dots Q_k}_{A^{(k)}} \underbrace{Q_k \dots Q_1}_{Qx} x = G_k P_k \dots G_1 P_1 b$$

Speicherausnutzung

Die $q_{jk}^{(k)}$ können an den eliminierten Stellen im unteren Dreieck von A gespeichert werden. Das obere Dreieck von A wird während der Rechnung ersetzt. Nach k Eliminationsschritten

$$\left[\begin{array}{ccccccc|c} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1k} & r_{1,k+1} & \dots & r_{1n} & c_1 \\ \lambda_{21} & r_{22} & \dots & r_{2k} & r_{2,k+1} & \dots & r_{2n} & c_2 \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \lambda_{k1} & \dots & \lambda_{kk} & r_{kk} & r_{k,k+1} & \dots & r_{kn} & c_k \\ \lambda_{k1} & \dots & \dots & \lambda_{k+1,k} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k)} & b_{k+1}^{(k)} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \lambda_{n1} & \dots & \dots & \lambda_{n,k} & a_{n,k+1}^{(k)} & \dots & a_{n,n}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right]$$

mit $\lambda_{i+1,1}, \dots, \lambda_{ni}$ Permutationen von $q_{i+1,i}^{(k)}, \dots, q_{ni}^{(k)}$. Endresultat ($k = n - 1$)

$$\left[\begin{array}{cccc|c} r_{11} & \dots & \dots & r_{1n} & c_1 \\ l_{21} & r_{22} & \dots & r_{2n} & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & \dots & l_{n,n-1} & r_{nn} & c_n \end{array} \right]$$

Satz 4.10 (LR-Zerlegung) Die Matrizen

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}, R = \begin{bmatrix} r_{11} & \dots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

bilden eine LR-Zerlegung der Matrix PA . $PA = LR$, mit $P = P_{n-1} \dots P_1$. Für $P = \mathbb{I}$ ist die Zerlegung eindeutig.

Beweis (für $P = \mathbb{I}$).

$$R = G_{n-1} \dots G_1 A \iff \underbrace{G_1^{-1} \dots G_{n-1}^{-1}}_L R = A$$

Eindeutigkeit: Übung. □

Aufwand: k -ter Eliminationsschritt

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} a_{kj}^{(k-1)}$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)}$$

$i, j = k + 1, \dots, n \implies n - k$ Divisionen, $(n - k) + (n - k)^2$ Multiplikationen und Additionen

$$\implies N_{\text{Gauß}}(n) = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

Gilt für Lösung von $Ax = b$ und für die Berechnung der Zerlegung $PA = LR$

Beispiel 4.11

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 6 \\ 2 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ 7 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Pivotierung:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 7 \\ 1 & 1 & 1 & 4 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 2/3 & 1/3 & -1 & 17/3 \\ 1/3 & 2/3 & -1 & 10/3 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 1/3 & 2/3 & -1 & 10/3 \\ 2/3 & 1/3 & -1 & 17/3 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 1/3 & 2/3 & -1 & 10/3 \\ 2/3 & 1/2 & -1/2 & 4 \end{array} \right]$$

→

$$x_3 = -8$$

$$x_2 = \frac{3}{2} \left(\frac{10}{3} + x_3 \right) = -7$$

$$x_1 = \frac{1}{3} (2 - x_2 - 6x_3) = 19$$

LR-Zerlegung:

$$P_1 = E_3, P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$PA = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 6 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = LR = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 1/2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 6 \\ 0 & 2/3 & -1 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Für die numerische Stabilität der Gauß-Elimination ist im Allgemeinen eine Pivotierung sehr wichtig.

Rückwärtsanalyse nach Wilkinson $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, löse $Ax = b$ mit Gauß-Elimination mit Spaltenpivotierung. Die berechnete Lösung \tilde{x} ist die exakte Lösung eines gestörten Systems $(A + \delta A)\tilde{x} = b$ mit

$$\frac{\|\delta A\|_\infty}{\|A\|_\infty} \leq 1.01 \cdot 2^{n-1} (n^3 + 2n^2) \text{eps}$$

(ohne Beweis)

Störungssatz \implies

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}_\infty(A)}{1 - \text{cond}_\infty(A) \|\delta A\|/\|A\|} \cdot 1.012^{n-1} (n^3 + 2n^2) \text{eps}$$

Diese Abschätzung deckt pathologische Fälle ab. In der Praxis ist das Verhalten gutartig, das heißt die Gaußelimination mit Spaltenpivotierung ist ein stabiler Algorithmus. Wiederholung: Gauß-Elimination $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$A^{(0)} = A, A^{(k)} = G_k P_k A^{(k-1)}, k = 1, \dots, n-1$$

$$R = A^{(n-1)} a = G_{n-1} P_{n-1} \dots G_1 P_1 A$$

setze

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{n-1} &= P_{n-1}, \tilde{G}_k = P_{n-1} \dots P_{k-1} G_k P_{k+1} \dots P_{n-1} \\ \implies P_{k+1} \dots P_{n-1} \tilde{G}_k &= G_k P_{k+1} \dots P_{n-1} \\ \implies R &= \underbrace{\tilde{G}_{n+1} \dots \tilde{G}_1}_{L^{-1}} \underbrace{P_{n-1} \dots P_1}_P A \\ \implies LR &= PA \end{aligned}$$

Löse $Rx = c$ oder $Ly = b$, $Rx = y$.

4.2 Nachiteration

Wegen Rundungsfehlern bei der Gauß-Elimination gilt: $PA = LR$ nicht exakt. Damit gilt mit einer Näherungslösung x^0 gewonnen aus $LRx^0 = Pb$ für den sogenannten Defekt

$$d^0 = b - Ax^0 \neq 0$$

Man kann man eine iterative Defektkorrektur betreiben.

$$\begin{aligned} d^k &= b - Ax^k, LR\delta x^k = Pd^k \\ x^{k+1} &= x^k + \delta x^k, k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Lemma 4.12

$$x^k = \left(\sum_{n=0}^k (\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA)^n \right) R^{-1}L^{-1}Pb$$

Beweis per Induktion über k :

$k = 0$ ✓

$k \geq 0$:

$$\begin{aligned} \delta x^k &= R^{-1}L^{-1}(b - Ax^k) \\ x^{k+1} &= x^k + \delta x^k = (\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA)x^k + R^{-1}L^{-1}Pb \\ &= \left(\sum_{n=0}^k (\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA)^{n+1} \right) R^{-1}L^{-1}Pb + R^{-1}L^{-1}Pb \\ &= \left(\sum_{n=0}^{k+1} (\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA)^n \right) R^{-1}L^{-1}Pb \end{aligned} \quad \square$$

Ist $\|\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA\| < 1$, so gilt

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbb{I} - R^{-1}L^{-1}PA)^n &= (\mathbb{I} - \mathbb{I} + R^{-1}L^{-1}PA)^{-1} \\ &= (PA)^{-1}LR \end{aligned}$$

$\implies x^k$ konvergiert gegen

$$x^* = (PA)^{-1}LR R^{-1}L^{-1}Pb = A^{-1}b$$

Wichtig: In der Praxis muss der Defekt d^k mit höherer Genauigkeit berechnet werden.

Beispiel 4.13 Skript.

4.3 Determinantenbestimmung

$$A, B \in \mathbb{R}^{n \times n} \implies \det(A \cdot B) = \det A \det B$$

$$A = P^T L R$$

$$\det A = \underbrace{\det(P^T)}_{\pm 1} \underbrace{\det L}_1 \underbrace{\det R}_{\prod_{i=1}^n r_{ii}} = \pm \prod_{i=1}^n r'_{ii}$$

Bei k Vertauschungen von Zeilen ist das Vorzeichen $(-1)^k$.

4.4 Rangbestimmung

\rightarrow Totalpivotierung $PAQ^T = LR$ Gilt nach dem i -ten Eliminationsschritt

$$a_{k,j}^{(i)} = 0 \forall j, k = i + 1, \dots, n$$

so ist $\text{Rang}(A) = i$ (Geht auch bei nicht quadratischen Matrizen, einfach mit Nullen auffüllen)

4.5 Spezielle Gleichungssysteme

4.5.1 Bandmatrizen

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt Bandmatrix vom Bandtyp $(m_l, m_r) \in \{0, \dots, n-1\}^2$, wenn gilt

$$a_{jk} = 0 \forall k < j - m_l \vee k > j + m_r, j, k = 1, \dots, n$$

Die Größe $m = m_l + m_r$ heißt Bandbreite.

Typ	Name
$(0, 0)$	Diagonalmatrix
$(1, 1)$	Tridiagonalmatrizen
$(n-1, 0)$	Untere Dreiecksmatrix
$(0, n-1)$	Obere Dreiecksmatrix

Satz 4.14 (Bandmatrix) Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Bandmatrix vom Typ (m_l, m_r) , Für die Gauß-Elimination $A = LR$ ohne Zeilenvertauschung durchführbar ist, dann sind alle reduzierten Matrizen $A^{(i)}$ desselben Typs und L beziehungsweise R sind vom Typ $(m_l, 0)$ beziehungsweise $(0, m_r)$. Aufwand:

$$N = \frac{1}{3} n m_l m_r + \mathcal{O}(n(m_l + m_r))$$

(Ohne Beweis)

Beispiel 4.15 Typ $(1, 1)$:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ c_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & c_n & a_n \end{pmatrix} = LR, L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \gamma_1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & 1 \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & \alpha_n \end{pmatrix}$$

Rekursive Bestimmung

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= a_1, \beta_1 = b_1 \\ \gamma_i &= c_i / \alpha_{i-1}, \alpha_i = a_i - \gamma_i \beta_{i-1}, \beta_i = b_i \\ \gamma_n &= c_n / \alpha_{n-1}, \alpha_n = a_n - \gamma_n \beta_{n-1}\end{aligned}$$

Aufwand: $3n - 2$ Speicher, $2n - 2$ arithmetische Operationen.

Vorsicht: (Beispiel Typ (4, 4)): Band „füllt auf“

4.5.2 Diagonaldominante Matrizen

Definition 4.16 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt diagonaldominant, wenn

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n |a_{jk}| \leq |a_{jj}|, \quad j = 1, \dots, n$$

Satz 4.17 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär und diagonaldominant $\implies A = LR$ kann mit Gauß-Elimination ohne Zeilenvertauschungen berechnet werden. (Beweis: Skript)

4.5.3 Positiv definite Matrizen

Definition 4.18 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $A^T = A$ heißt positiv definit, wenn

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

Satz 4.19 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit $\implies A = LR$ kann mit Gauß-Elimination ohne Zeilenvertauschung berechnet werden mit Pivots $a_{ii}^{(i)} > 0$

Beweis

$$0 < e_1^T A e_1 = a_{11}$$

$$\begin{aligned}a_{jk}^{(1)} &= a_{jk} - \frac{a_{j1}}{a_{11}} a_{1k} = a_{kj} - \frac{a_{k1}}{a_{11}} a_{1j} = a_{kj}^{(1)} \\ \implies A^{(1)} &= \left(a_{jk}^{(1)} \right)_{j,k=2}^n \text{ ist symmetrisch}\end{aligned}$$

Ist $A^{(1)}$ positiv definit, so beweist Induktion die Behauptung. Setze dafür $\tilde{x} = (x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^{n-1}$, $x \in \mathbb{R}^n$, sodass

$$x_1 = -\frac{1}{a_{11}} \sum_{k=2}^n a_{1k} x_k$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow 0 < x^T A x &= \sum_{j,k=1}^n a_{jk} x_j x_k \\
&= \sum_{j,k=2}^n a_{jk} x_j x_k + 2x_1 \sum_{k=2}^n a_{1k} x_k + a_{11} x_1^2 - \underbrace{\frac{1}{a_{11}} \sum_{j,k=2}^n a_{k1} a_{j1} x_k x_j + \frac{1}{a_{11}} \left(\sum_{k=2}^n a_{1k} x_k \right)^2}_0 \\
&= \underbrace{\sum_{j,k=2}^n \left(a_{jk} - \frac{a_{k1} a_{j1}}{a_{11}} \right) x_k x_j}_{=a_{jk}^{(1)}} + \underbrace{a_{11} \left(x_1 + \sum_{k=2}^n \frac{a_{1k}}{a_{11}} x_k \right)^2}_0 \\
&= \tilde{x}^T A^{(1)} \tilde{x}.
\end{aligned}$$

□

$$\rightarrow A = LR, r_{ii} = a_{ii}^{(i)} > 0$$

$$A = A^T = (LR)^T = \left(LD \underbrace{D^{-1}R}_{=:R} \right)^T = \tilde{R}^T D L^T$$

mit $A = \text{diag}(r_1, \dots, r_{nn})$ und

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12}/r_{11} & \dots & r_{1n}/r_{11} \\ \ddots & & & \vdots \\ & \ddots & & r_{n-1,n}/r_{n-1,n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Eindeutigkeit der LR-Zerlegung

$$LR = \tilde{R}^T D L^T \Rightarrow L = \tilde{R}^T, R = D L^T$$

Satz 4.20 Jede symmetrisch positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ hat eine sogenannte Cholesky-Zerlegung

$$A = LDL^T = \tilde{L} \tilde{L}^T$$

Aufwand: $N_{\text{Cholesky}}(n) = \frac{n^3}{6} + \mathcal{O}(n^2)$.

Algorithmus von Cholesky:

$$\begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & & \\ \vdots & \ddots & \\ \tilde{l}_{n1} & \dots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & \dots & \tilde{l}_{n1} \\ \ddots & & \vdots \\ & & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$i \geq j : a_{ij} = \sum_{k=1}^j \tilde{l}_{ik} \tilde{l}_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} \tilde{l}_{ik} \tilde{l}_{jk} + \tilde{l}_{ij} \tilde{l}_{jj}$$

für $i = 1, \dots, n$:

$$\tilde{l}_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{ik}^2}$$

Für $j = i + 1, \dots, n$:

$$\tilde{l}_{ij} = \frac{1}{\tilde{l}_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{ik} \tilde{l}_{jk} \right)$$

Wiederholung: Spezielle Matrizen, LR-Zerlegung

- Bandmatrizen: Nullen nicht speichern / berechnen
- Diagonal-determinante Matrizen: keine Pivotisierung notwendig
- Symmetrisch, positiv definite Matrizen keine Pivotisierung notwendig

$$A = \tilde{L} \tilde{L}^T = LDL^T$$

(billiger als $A = LR$)

4.6 Nicht reguläre Systeme

Wir betrachten $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (nicht notwendig quadratisch). Das Lineare Gleichungssystem $Ax = b$ hat

- keine Lösung, wenn $b \notin \text{im}(A)$
- unendlich viele Lösungen $\bar{x} + \Delta x$ wenn $A\bar{x} = b$, $\Delta x \in \ker(A) \neq \{0\}$

Verallgemeinerter Lösungsbegriff: Finde $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ mit minimalem Defekt $d = \|b - A\bar{x}\|_2$ (Für $d = 0$ löst \bar{x} $Ax = b$)

Satz 4.21 (Least-Squares-Lösung) Es gibt immer eine „Lösung“ $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ mit kleinsten Fehlerquadraten:

$$\|A\bar{x} - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

Das gilt genau dann, wenn

$$A^T A \bar{x} = A^T b$$

(Normalgleichung). Für $\text{Rang}(A) = n$ ist \bar{x} eindeutig bestimmt. Ansonsten hat jede weitere Lösung die Form $\bar{x} + y$ mit $y \in \ker(A)$

Lemma 4.22 Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann ist $\bar{A}^T A$ hermitesch positiv semidefinit. Ist $\text{Rang}(A) = n$, so ist $\bar{A}^T A$ positiv definit.

Beweis 1. $\overline{\bar{A}^T A}^T = (A^T \bar{A})^T = \bar{A}^T A$

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

3. $\text{Rang}(A) = n \implies m \geq n$ und $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ injektiv \implies Aus $\|A\|_2 = 0 \implies Ax = 0 \implies x = 0$
 $\implies \bar{x}^T \bar{A}^T A x > 0 \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ \square

Beweis 1. Es gelte $A^T A \bar{x} = A^T b$

$$\begin{aligned} &\implies A^T(A\bar{x} - b) = 0 \\ &\implies \|b - Ax\|_2^2 = \|b - A\bar{x} + A(\bar{x} - x)\|_2^2 \\ &\quad = \|b - A\bar{x}\|_2^2 + 2(b - A\bar{x}, A(\bar{x} - x))_2 + \|A(\bar{x} - x)\|_2^2 \\ &\quad (A(\bar{x} - b), b - A\bar{x})_2 = (\bar{x} - x)^T A^T (b - A\bar{x}) = 0 \\ &\implies \|b - Ax\|_2^2 > \|b - A\bar{x}\|_2^2 + \|A(\bar{x} - x)\|_2^2 \\ &\implies \bar{x} \text{ ist minimal. Umgekehrt: Sei } \bar{x} \text{ minimal} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial x_i} \|Ax - b\|_2^2 \Big|_{x=\bar{x}} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^m \left(\sum_{k=1}^n a_{jk} x_k - b_j \right)^2 \right) \Big|_{x=\bar{x}} \\ &= \sum_{j=1}^m 2 \left(\sum_{k=1}^n a_{jk} \bar{x}_k - b_j \right) \\ a_{ji} &= (2A^T(A\bar{x} - b))_i \\ &\implies A^T A \bar{x} = A^T b \end{aligned}$$

2. Lösbarkeit: Wegen $\text{im}(A)^\perp = \ker(A^T)$ hat b eine eindeutige Zerlegung $b = r + s, r \in \ker(A^T), s \in \text{im}(A)$ Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ so, dass $A\bar{x} = s \implies A^T A \bar{x} = A^T s + A^T r = A^T b$
3. $\text{Rang}(A) = n: A^T A$ positiv definit $\implies \bar{x}$ eindeutig. $\text{Rang}(A) < n: A^T A x_1 = A^T b$.
Wegen

$$b = Ax_1 + (b - Ax_1) \in \text{im } A + \ker A^T$$

und Eindeutigkeit von $b = r + s$ gilt $A\bar{x} = Ax_1 \forall \bar{x} - x_1 \in \ker A$ \square

Numerische Lösung: Cholesky für Normalengleichung. Vorsicht: Im Fall $\text{Rang}(A) = n = m$ gilt

$$\text{cond}_2(A^T A) = \text{cond}_2(A)^2$$

Merke: Normalengleichungen sind häufig schlecht konditioniert. Abhilfe: QR-Zerlegung von A

Satz 4.23 Sei $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$ mit $\text{Rang}(A) = n \leq m$. Dann existiert eine eindeutig bestimmte Matrix $Q \in \mathbb{K}^{m \times n}$ mit $\bar{Q}^T Q = E_n$ und eine eindeutig bestimmte obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit reellen Diagonalelementen $r_{ii} > 0, i = 1, \dots, n$, sodass

$$A = QR$$

Bezeichnung: Q : orthonormale Matrix ($m = n$: unitär)

Beweis Konstruktion der Spalten q_k von Q mittels Gram-Schmidt aus den Spalten a_k von A

$$q_i = \begin{cases} q_i = \|a_1\|_2^{-1} a_1 & i = 1 \\ q_i = \|\tilde{q}_i\|_2^{-1} \tilde{q}_i, \tilde{q}_i = a_i - \sum_{k=1}^{i-1} (a_i, q_k)_2 q_k & i = 2, \dots, n \end{cases}$$

Wegen $\text{Rang}(A) = n$ sind die a_k linear unabhängig und $\|\tilde{q}_k\|_2 \neq 0, k = 1, \dots, n$. Betrachte:

$$\begin{aligned} a_k &= \tilde{q}_k + \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, q_i)_2 q_i \\ &= \|\tilde{q}_k\|_2 q_k + \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, q_i) q_i \\ &= \sum_{i=1}^k r_{ik} q_i \end{aligned}$$

$r_{kk} = \|\tilde{q}_k\|_2 \in \mathbb{R}_+, r_{ik} = (a_k, q_i)_2$. Setze $r_{ik} = 0, i > k, R = (r_{ik}) \in \mathbb{K}^{n \times n} \implies A = QR$.

Eindeutigkeit: Sei $Q_1 R_1 = A = Q_2 R_2$. Setze

$$\begin{aligned} Q &= \bar{Q}_2^T Q_1 = \bar{Q}_2^T A R_1^{-1} = R_2 R_1^{-1} && \text{(obere Dreiecksmatrix)} \\ \bar{Q}^T &= \bar{Q}_1^T Q_2 = \bar{Q}_1^T A R_2^{-1} = R_1 R_2^{-1} && \text{(obere Dreiecksmatrix)} \\ \bar{Q}^T Q &= R_1 R_2^{-1} R_2 R_1^{-1} = \mathbb{I} \end{aligned}$$

Q ist orthonormal und diagonal. Ihre Eigenwerte λ_i erfüllen $|\lambda_i| = 1$

$$Q R_1 = R_2 R_1^{-1} R_1 = R_2 \implies \lambda_i \underbrace{(R_1)_{ii}}_{>0} = (R_2)_{ii} > 0$$

$$\implies \lambda_i \in \mathbb{R}, \lambda_i = 1$$

$$Q = E_n \implies R_1 = R_2, Q_1 = A R_1^{-1} = A R_2^{-1} = Q_2 \quad \square$$

Least-Squares-Lösung mit

$$A = Q_1 R = (Q_1 \mid Q_2) \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit $Q = (Q_1 \mid Q_2) \in \mathbb{R}^{m \times n}, R = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{Rang}(A) = n$

$$\begin{aligned} \bullet \quad \|Qv\|_2^2 &= v^T Q^T Q v = \|v\|_2^2 \\ \bullet \quad \|Ax - b\|_2^2 &= \|Q \tilde{R} x - Q Q^T b\|_2^2 = \|Q(\tilde{R} x - Q^T b)\|_2^2 \\ &= \|\tilde{R} x - Q^T b\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{pmatrix} b \right\|_2^2 \\ &= \|R x - Q_1^T b\|_2^2 + \|Q_2^T b\|_2^2 \end{aligned}$$

minimal für $x = R^{-1} Q_1^T b$.

- $A^T A = (Q_1 R)^T Q_1 R = R^T Q_1^T Q_1 R = R^T R$ (Cholesky-Zerlegung)
 $A^T A x = A^T b = R^T R x = R^T Q_1^T b$
- Lösung mit R ist besser konditioniert als Lösung mit $R^T R$: $\text{cond}_2(R^T R) = \text{cond}_2(R)^2$

Widerholung: $A \in M(n \times m, \mathbb{K})$

- $A = QR = \tilde{Q}\tilde{R}$, $\tilde{Q} = Q|\tilde{Q}_2$, $\tilde{Q}^T Q = E_n$, $\tilde{Q}^T \tilde{Q} = E_m$
- Eindeutigkeit mit $r_{ij} > 0$
- $\|Ax - b\|_2^2 = \|\tilde{Q}\tilde{R}x - \tilde{Q}\tilde{Q}^T b\|_2^2 = \|\tilde{Q}(\tilde{R}x - \tilde{Q}^T b)\|_2^2 = \|R x - Q^T b\|_2^2 + \|\tilde{Q}_2 b\|_2^2$.
 $\text{Rang}(A) = n: x = \tilde{R}^{-1} \tilde{Q}^T b$
- verhindert schlechte Konditionierung der Normalengleichung

$$\text{cond}_2(A^T A) = \text{cond}_2(A)^2 = \text{cond}_2(R)^2$$

Problem: Gram-Schmidt zur Berechnung von Orthogonalbasis ist nicht stabil. Stabile Variante: Householder-Verfahren

Definition 4.24 Für $v \in \mathbb{K}$ mit $\|v\|_2 = 1$ heißt

$$I = E_n - 2v\bar{v}^T \in \mathbb{K}^{n \times n}$$

„Householder-Transformation“.

$$v\bar{v}^T = \begin{pmatrix} v_1\bar{v}_1 & \dots & v_1\bar{v}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n\bar{v}_1 & \dots & v_n\bar{v}_n \end{pmatrix}$$

Eigenschaften von S :

- $\bar{S}^T = S$ hermitesch
- $\bar{S}^T S = (E_n - 2v\bar{v}^T)(E_n - 2v\bar{v}^T) = E_n - 4v\bar{v}^T + 4v \underbrace{\bar{v}^T v}_1 \bar{v}^T = E_n$ (unitär)
- Spiegelung: Sei $u \in \mathbb{K}^n$. Zerlege $u = (v, u)_2 v + [u - (v, u)_2 v] = u_1 + u_2$

$$\begin{aligned} Su_1 &= (E_n - 2v\bar{v}^T)(v, u)_2 v \\ &= (v, u)_2 (v - 2v\bar{v}^T v) = -u_1 \\ SU_2 &= (E_n - 2v\bar{v}^T)(u - u_1) \\ &= u - 2(v, u)_2 v + u_1 = u - u_1 = u_2 \end{aligned}$$

v : Normale der Spiegelungshyperebene

Householder-Verfahren:

$$A = A^{(0)} \rightarrow \dots \rightarrow A^{(i-1)} \rightarrow \dots \rightarrow A^{(n)} = \tilde{R}$$

mit

$$A^{(i)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(i)} & \dots & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(i)} \\ & \ddots & & & & \vdots \\ & & a_{ii}^{(i)} & \dots & \dots & a_{in}^{(i)} \\ & & 0 & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{im}^{(i)} & & a_{nm}^{(i)} \end{pmatrix}$$

Schritt i : Householder-Transformation

$$S_i A^{(i-1)} = A^{(i)}$$

$$\implies \tilde{R} = A^{(n)} = S_n S_{n-1} \dots S_1 A = \tilde{Q}^T A$$

$$\implies \tilde{Q} \tilde{R} = A, \tilde{Q} = \tilde{S}_1^T \dots \tilde{S}_n^T = S_1 \dots S_n$$

Achtung: $\tilde{r}_{ii} > 0$ wird nicht garantiert. (keine Eindeutigkeit). Bezeichnung: $\tilde{A}^{(i)} = (\tilde{a}_i^{(i)} \mid \dots \mid \tilde{a}_n^{(i)})$

Setze

$$v_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{v}_i \end{pmatrix}, \tilde{v}_i \in \mathbb{K}^{m-i}$$

$$\implies S_i = E_m - 2v_i \tilde{v}_i^T = \begin{pmatrix} E_{i-1} & 0 \\ 0 & E_{m-i} - 2\tilde{v}_i \tilde{v}_i^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_i \end{pmatrix}$$

\implies Die ersten $i - 1$ zeilen von $A^{(i-1)}$ bleiben unverändert. Wähle \tilde{v}_i so, dass

$$\tilde{S}_i \tilde{s}_i^{(i)} \in \text{Lin}\{e_1^i\}, e_1^i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m-i}$$

2 Möglichkeiten:

$$\tilde{v}_i = \frac{\tilde{a}_i^{(i)} - \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1}{\|\tilde{a}_i^{(i)} - \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1\|_2}$$

$$\tilde{v}_i = \frac{\tilde{a}_i^{(i)} + \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1}{\|\tilde{a}_i^{(i)} + \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1\|_2}$$

Zur Vermeidung von Auslöschung:

$$\tilde{v}_i = \frac{\tilde{a}_i^{(i)} + \operatorname{sgn}(\tilde{a}_{ii}^{(i)}) \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1}{\|\tilde{a}_i^{(i)} + \operatorname{sgn}(\tilde{a}_{ii}^{(i)}) \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 e_1\|_2}$$

$$\Rightarrow \tilde{S}_i \tilde{A}^{(i)} = \begin{array}{c|c} \pm \|\tilde{a}_i^{(i)}\|_2 & \\ \hline 0 & \tilde{a}_i^{(i)} - 2(\tilde{a}_{i+j,i}^{(i)}, \tilde{v}_i) \tilde{v}_i, j = 2, \dots, m-i \\ \vdots & \\ 0 & \end{array}$$

Insgesamt ergibt sich für die Spalten von $A^{(i)} = S_i A^{(i-1)}$

$$\begin{aligned} a_k^{(i)} &= a_k^{(i-1)}, k = 1, \dots, i-1 \\ a_i^{(i)} &= (a_{i,1}^{(i-1)}, \dots, a_{i-1,i}^{(i-1)}, \|\tilde{a}_i^{(i-1)}\|_2, 0, \dots, 2)^T \\ a_k^{(i)} &= a_k^{(i-1)} - 2(\tilde{a}_k^{(i-1)}, \tilde{v}_i) v_i, k = i+1, \dots, n \end{aligned}$$

4.7 Singulärwertzerlegung

Satz 4.25 Es sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann existieren orthogonale Matrizen $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, soadd

$$U^T A V = \Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m \times n}, p = \min(m, n)$$

mit $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$

Beweis Skript, □

$A = U \Sigma V^T$. Nützliche Folgerungen: ($\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \dots = \sigma_p = 0$)

- $\operatorname{Rang}(A) = r$
- $\ker A = \operatorname{Lin}\{v_{r+1}, \dots, v_n\}$
- $\operatorname{im} A = \operatorname{Lin}\{u_1, \dots, u_r\}$
- $A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$
- $\|A\|_2 = \sigma_1$
- $\operatorname{cond}_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_p}$
- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^r \sigma_i^2} = \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_p \end{pmatrix} \right\|_2$
- $\left\| A - \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T \right\|_2 = \left\| \sum_{i=k+1}^r \sigma_i u_i v_i^T \right\|_2 = \sigma_{k+1}$

5 Nichtlineare Gleichungen

5.1 Intervallschachtelung / Bisektion

Sei $f \in C[a, b]$. Suche $x \in [a, b]$ mit $f(x) = 0$. Gilt $a_0, b_0 \in [a, b]$ mit $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$, so hat f

eine Nullstelle in $[a_0, b_0]$ (Zwischenwertsatz).

```

for  $k = 0, 1, \dots$  do
     $x_k = 1/2(a_k + b_k)$ ;
    if  $f(a_k)f(x_k) < 0$  then
         $a_{k+1} = a_k$ ;
         $b_{k+1} = x_k$ ;
    else
         $a_{k+1} = x_k$ ;
         $b_{k+1} = b_k$ ;
    end
    if  $|b_{k+1} - a_{k+1}| < TOL|a_{k+1}|$  then
        | Ende Lösung:  $1/2(b_{k+1} + a_{k+1})$ 
    end
end

```

Konvergenz:

$$a_k \leq a_{k+1} \leq b_{k+1} \leq b_k$$

$$|b_{k+1} - a_{k+1}| = \frac{1}{2}|b_k - a_k| = 2^{-k-1}|b_0 - a_0|$$

Eigenschaften:

- sehr stabil
- langsam
- Erweiterung für $x \in \mathbb{R}^n$ oder $x \in \mathbb{C}$ nicht möglich

5.2 Newton-Verfahren im \mathbb{R}^n

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Bezeichnung: $J(x) = f'(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ (Jacobi-Matrix). Vorüberlegung: Taylor-Entwicklung von f um eine Näherungslösung $x_k \in D$:

$$f(x_k + \Delta x_k) = f(x_k) + J(x_k)\Delta x_k + \mathcal{O}(\|\Delta x_k\|) \stackrel{!}{=}$$

Abgeleitete Iterationsvorschrift:

- Löse $J(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$
- Schritt $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$

Insbesondere Fall $n = 1$: $J(x_k)\Delta x_k = -f(x_k) \rightarrow \Delta x_k + x_k = \text{Nullstelle der Tangente an der Stelle } x_k$.

5.3 Konvergenzverhalten iterativer Mathode (Spezialfall $n = 1$)

Definition 5.1 Ein Iterationsverfahren zur Berechnung von

$$x_* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k$$

hat eine Konvergenz der Ordnung α , $\alpha \geq 1$, wenn mit einem $c > 0$ gilt:

$$|x_{k+1} - x_*| \leq c|x_k - x_*|^\alpha \quad k = 0, 1, \dots$$

Im Fall $\alpha = 1$ (lineare Konvergenz) heißt das beste c lineare Kontraktionsrate. Gilt

$$|x_{k+1} - x_k| \leq c_k |x_k - x_*|$$

mit einer Nullfolge $c_k \rightarrow 0$, so spricht man von superlinearer Konvergenz.

Definition 5.2 Die Menge $D(x) = \{y \in D \mid \|f(y)\| \leq \|x\|\}$ heißt die Niveaumenge von f zum Punkt x .

Satz 5.3 (Newton-Kantorovich) Für ein $\bar{x} \in D$ gelte

1. $\|J^{-1}(x)\| \leq \beta, x \in D_f(\bar{x})$
2. $\|J(x) - J(y)\| \leq \gamma\|x - y\|, x, y \in D_f(\bar{x})$
3. $x_0 \in D_f(x)$
4. $q := 1/2\alpha\beta\gamma < 1$ mit $\alpha = \|J^{-1}(x_0)f(x_0)\|$

Dann konvergiert die Folge (x_k) aus der Newtoniteration gegen eine Nullstelle $x_* \in D$ von f , mit der a-priori Fehlerabschätzung

$$\|x_k - x_*\| \leq \frac{\alpha}{1 - q} q^{(2^k - 1)}, k \geq 1$$

Beweis Skript

□