Definition 5.1: Skalarwertige Funktionen mit mehreren Variablen

- Unter einer Funktion mit n unabhängigen Variablen $x_1, \dots, x_n$ und einer abhängigen Variablen y versteht man eine Vorschrift, die jedem geordneten Zahlentupel $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ aus einer Definitionsmenge $D \subset \mathbb{R}^n$ genau ein Element y aus einer Wertemenge $W \subset \mathbb{R}$ zuordnet. Symbolische Schreibweise:

$$\begin{aligned} f:\ D \subset \mathbb{R}^n &\longrightarrow W \subset \mathbb{R} \\ (x_1, x_2, \dots, x_n) &\mapsto y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned}$$

- Da das Ergebnis $y \in \mathbb{R}$ ein Skalar (eine Zahl) ist, redet man auch von einer **skalarwertigen** Funktion.

Die obige Definition lässt sich einfach erweitern auf beliebige **vektorwertige** Funktionen, die nicht einen Skalar, sondern einen Vektor als Wert zurückgeben:

$$f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m,$$

mit

$$f(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ y_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ y_m = f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix},$$

wobei die m Komponenten $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ $(i = 1, \dots, m)$ von f wieder skalarwertige Funktionen sind, entsprechend Def. 5.1.

Addition und Multiplikation:

Wir können die Addition (bzw. Subtraktion) und die Multiplikation (bzw. Division) auffassen als skalarwertige Funktionen $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\begin{aligned} f(x,y) &= x + y \\ g(x,y) &= x/y \end{aligned}$$

Ohmsches Gesetz:

- Die an einem ohmschen Widerstand R abfallende Spannung U hängt vom Widerstand R und der Stromstärke I gemäss dem ohmschen Gesetz $U = R \cdot I$ ab.
- Also haben wir für die abhängige Variable $U = f(R, I) = RI$ die skalarwertige Funktion $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit den unabhängigen Variablen R und I. Häufig schreibt man auch direkt

$$U = U(R, I) = R \cdot I$$

und bringt dadurch die Abhängigkeit der Variable U von den unabhängigen Variablen R und I zum Ausdruck, wie wir es auch bereits vom eindimensionalen Fall kennen, z.B. $y = y(x)$.

1. Geben Sie je ein konkretes (nicht zu kompliziertes) Beispiel einer skalarwertigen Funktion $f : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ sowie einer vektorwertigen Funktion $\boldsymbol{g} : \mathbb{R}^4 \longrightarrow \mathbb{R}^3$ an.
2. Geben sie die lineare Funktion $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3$ an, für die die Lösung x des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \text{ mit } \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -2 & 5 & 1 \\ 1 & -2 & 5 \end{pmatrix} \text{ und } \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 5 \\ 11 \\ 12 \end{pmatrix}$$

gerade $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = 0$ ergibt.

Schnittkurvendiagramm

- Wird die Fläche $z = f(x, y)$ bei einer konstanten Höhe $z = const.$ geschnitten, ergibt sich eine Schnittkurve.
- Wird diese in die $(x, y)-$Ebene projiziert, spricht man von einer Höhenlinie bzw. bei der Abbildung von einem Höhenliniendiagramm., wie wir es z.B. von Wanderkarten her kennen.
- Natürlich kann man auch andere Schnitte als $z = const.$ (Schnittebene parallel zur $(x, y)-$Ebene) wählen, z.B. $x = const.$ (Schnittebene parallel zur $(y, z)-$Ebene) oder $y = const.$ (Schnittebene parallel zur $(x, z)-$Ebene). Siehe Abb. auf nächster Slide.

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= x_1^2 + x_2 - 11 = 0 \\ f_2(x_1, x_2) &= x_1 + x_2^2 - 7 = 0 \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 - 11 \\ x_1 + x_2^2 - 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dabei lautet die explizite Darstellung der Kurven

$$\begin{aligned} x_2 &= -x_1^2 + 11 \\ x_2 &= \sqrt{-x_1 + 7} \end{aligned}$$

und die Schnittpunkte sind

$$\bar{x}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}, \bar{x}_2 = \begin{pmatrix} -2.8 \\ 3.2 \end{pmatrix}, \bar{x}_3 = \begin{pmatrix} -3.8 \\ -3.3 \end{pmatrix}, \bar{x}_4 = \begin{pmatrix} 3.4 \\ -1.7 \end{pmatrix}$$

Partielle Ableitung Bsp:

Die partiellen Ableitungen erster Ordnung der Funktion

$$z = f(x, y) = 3xy^2 + \ln(x^3 y^2)$$

lauten

$$\begin{aligned} f_x &= 3 \cdot 1 \cdot y^2 + \frac{1}{x^3 y^2} \cdot 3x^2 \cdot y^2 \\ f_y &= 3x \cdot 2y + \frac{1}{x^3 y^2} \cdot x^3 \cdot 2y \end{aligned}$$

Die konkreten Steigungen der Tangenten an $f(x, y)$ an der Stelle $(x_0, y_0) = (-1, 1)$ in $x-$ resp. $y-$Richtung lauten dann

$$\begin{aligned} f_x(-1,1) &= 3 \cdot 1 \cdot 1^2 + \frac{1}{(-1)^3 \cdot 1^2} \cdot 3 \cdot (-1)^2 \cdot 1^2 = 0 \\ f_y(-1,1) &= 3 \cdot (-1) \cdot 2 \cdot 1 + \frac{1}{(-1)^3 \cdot 1^2} \cdot (-1)^3 \cdot 2 \cdot 1 = -4 \end{aligned}$$

Partielle Ableitung:

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x},$$

$$t(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Definition 5.2 [8]: Partielle Ableitungen 1. Ordnung

Unter den partiellen Ableitungen 1. Ordnung einer Funktion $z = f(x, y)$ and der Stelle (x, y) werden die folgenden Grenzwerte verstanden (falls sie vorhanden sind):

- Partielle Ableitung 1. Ordnung nach x:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}$$

- Partielle Ableitung 1. Ordnung nach y:

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}$$

Geometrische Interpretation der partiellen Ableitungen der Funktion $z = f(x, y)$ an der Stelle (x_0, y_0):

1. $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$ ist die Steigung der Flächentangente im Flächenpunkt $P = (x_0, y_0, z_0)$ in positiver $x-$Richtung
2. $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)$ ist die Steigung der Flächentangente im Flächenpunkt $P = (x_0, y_0, z_0)$ in positiver $y-$Richtung

Produktregel:

So lautet beispielsweise die Produktregel bei zwei unabhängigen Variablen, d. h. für eine Funktion vom Typ $z = f(x, y) = u(x, y) \cdot v(x, y)$:

- $f_x = u_x \cdot v + u \cdot v_x$
- $f_y = u_y \cdot v + u \cdot v_y$

Definition 5.3: Tangentialebene

- Für den speziellen Fall $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit $y = f(x_1, x_2)$ und $\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)})^T \in \mathbb{R}^2$ ist die Jacobi-Matrix nur ein Zeilenvektor mit zwei Elementen, nämlich

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) & \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \end{pmatrix}.$$

Dann liefert die Linearisierung

$$\begin{aligned} g(x_1, x_2) &= f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) & \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - x_1^{(0)} \\ x_2 - x_2^{(0)} \end{pmatrix} \\ &= f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \cdot \begin{pmatrix} x_1 - x_1^{(0)} \end{pmatrix} + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \cdot \begin{pmatrix} x_2 - x_2^{(0)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

die Gleichung der **Tangentialebene**.

- Sie enthält sämtliche im Flächenpunkt $P = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}))$ an die Bildfläche von $y = f(x_1, x_2)$ angelegten Tangenten.

Definition 5.3: Linearisierung

- Die "verallgemeinerte Tangentengleichung"

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)})$$

beschreibt eine lineare Funktion und es gilt $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ in einer Umgebung eines gegebenen Vektors $\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, ..., x_n^{(0)})^T \in \mathbb{R}^n$. Man spricht deshalb auch von der **Linearisierung** der Funktion $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ in einer Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)}$ (ein hochgestellter Index in Klammern $\boldsymbol{x}^{(k)}$ bezeichnet wie bisher einen Vektor aus $\mathbb{R}^n$ nach der $k-$ten Iteration).

Definition 5.3: Jacobi-Matrix:

- Sei $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ mit $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(\boldsymbol{x}) \\ y_2 = f_2(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ y_m = f_m(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T \in \mathbb{R}^n$. Die **Jacobi-Matrix** enthält sämtliche partiellen Ableitung 1. Ordnung von $\boldsymbol{f}$ und ist definiert als

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

a) $f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 5x_1x_2 \\ x_1^2x_2^2 + x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

$\partial\left(\frac{f_1}{x_1}\right) = 5x_2$ $\quad$ $\partial\left(\frac{f_2}{x_1}\right) = 2x_1x_2^2 + 1$

$\partial\left(\frac{f_1}{x_2}\right) = 5x_1$ $\quad$ $\partial\left(\frac{f_2}{x_2}\right) = 2x_2x_1^2 + 2$

$Df(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{x_1} & \frac{\partial f_1}{x_2} \\ \frac{\partial f_2}{x_1} & \frac{\partial f_2}{x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5x_2 & 5x_1 \\ 2x_1x_2^2 + 1 & 2x_2x_1^2 + 2 \end{pmatrix}$

Einsetzen $(x_1, x_2) = (1, 2)$

$\partial\left(\frac{f_1}{x_1}\right) = 5 \cdot 2 = 10$ $\quad$ $\partial\left(\frac{f_2}{x_1}\right) = 2 \cdot 1 \cdot 2^2 + 1 = 9$

$\partial\left(\frac{f_1}{x_2}\right) = 5 \cdot 1 = 5$ $\quad$ $\partial\left(\frac{f_2}{x_2}\right) = 2 \cdot 2 \cdot 1^2 + 2 = 6$

$Df(1, 2) = \begin{pmatrix} 10 & 5 \\ 9 & 6 \end{pmatrix}$

Linearisierung Bsp.:

Betrachten wir konkret nochmals die Funktion $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 - 11 \\ x_1 + x_2^2 - 7 \end{pmatrix}$ aus dem einführenden Beispiel von Kap. 5.1 und linearisieren sie in der Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 1)^T$.

Für die Jacobi-Matrix erhalten wir

$$\boldsymbol{Df}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 \\ 1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

und an der Stelle $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 1)^T$ gilt

$$\boldsymbol{Df}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)}) \\ \boldsymbol{g}(x_1, x_2) &= \begin{pmatrix} -9 \\ -5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -9 + 2(x_1 - 1) + (x_2 - 1) \\ -5 + (x_1 - 1) + 2(x_2 - 1) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 - 12 \\ x_1 + 2x_2 - 8 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Betrachten wir konkret die Funktion $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$. Wir linearisieren sie in der Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 2)^T$. Wir erhalten für die Jacobi-Matrix

$$\boldsymbol{Df}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{x}) &= f(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)}) \\ g(x_1, x_2) &= 5 + \begin{pmatrix} 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 2 \end{pmatrix} \\ &= 5 + 2(x_1 - 1) + 4 \cdot (x_2 - 2) \\ &= 2x_1 + 4x_2 - 5. \end{aligned}$$

Problemtellung Nullstellenbestimmung:

Definition 5.4 [1]:

- Gegeben sei $n \in \mathbb{N}$ und eine Funktion $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Gesucht ist ein Vektor $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ mit $\boldsymbol{f}(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$.
- Komponentenweise bedeutet dies: Gegeben sind n Funktionen $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, die die Komponenten von $\boldsymbol{f}$ bilden. Gesucht ist ein Vektor $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ mit $f_i(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$ (für $i = 1, ..., n$). Dann heisst $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ eine Lösung des **Gleichungssystems**

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(x_1, ..., x_n) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, ..., x_n) \\ f_2(x_1, ..., x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, ..., x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Quadratisch-konvergentes Newton-Verfahren:

Newton-Verfahren für Systeme:

$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ lautet die Jacobi-Matrix

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

und durch Linearisierung erhalten wir

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(n)}).$$

Newton-Verfahren für Systeme [1]:

Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle. Das Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, ...$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

  - Setze

$$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

- Mögliche Abbruchkriterien, $\varepsilon > 0$ (gmäss [6]):
  - $n \geq n_{max}$, $n_{max} \in \mathbb{N}$
  - $\| \boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)} \| \leq \| \boldsymbol{x}^{(n+1)} \| \cdot \varepsilon$
  - $\| \boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)} \| \leq \varepsilon$
  - $\| \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) \| \leq \varepsilon$
- Es kann passieren, dass mit dem Newton-Verfahren statt einer Nullstelle von $\boldsymbol{f}$ ein lokales Minimum $\boldsymbol{x}_{min}$ gefunden wird, das ungleich 0 ist. In diesem Falle ist $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}_{min})$ aber immer nicht regulär. Siehe untenstehendes Beispiel 5.6.

Wenn der Vektor $\boldsymbol{x}^{(n+1)}$ eine Nullstelle von $\boldsymbol{f}$ ist, gilt:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) = 0 \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)}) \cdot (\boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)}).$$

Durch Auflösen nach $\boldsymbol{x}^{(n+1)}$ erhalten wir dann die Iterationsvorschrift

$$\boxed{\boldsymbol{x}^{(n+1)} = \boldsymbol{x}^{(n)} - \left(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\right)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}))}$$

wieder in Analogie zum eindimensionalen Fall

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Bsp. Newton-Verfahren:

$$\boldsymbol{f}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1,x_2) \\ f_2(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 8x_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Df}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_1,x_2) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x_1,x_2) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x_1,x_2) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 24x_2^2 \end{pmatrix}$$

Wir wählen den Startvektor $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$. Daraus ergibt sich für die erste Iteration das lineare Gleichungssystem

$$\boldsymbol{Df}(4,2)\delta^{(0)} = -\boldsymbol{f}(4,2) \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 96 \end{pmatrix} \delta^{(0)} = -\begin{pmatrix} 16 \\ 80 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \delta^{(0)} = -\begin{pmatrix} \frac{76}{11} \\ \frac{6}{11} \end{pmatrix} \text{und}$$

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \delta^{(0)} = \begin{pmatrix} -\frac{32}{11} \\ \frac{16}{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.909\ldots \\ 1.4545\ldots \end{pmatrix}.$$

i	0	1	2	3	4
$x^{(i)}$	$\binom{4}{2}$	$\binom{-2.909}{1.455}$	$\binom{-2.302}{1.151}$	$\binom{-2.051}{1.025}$	$\binom{-2.0018}{1.0009}$

Die Folge konvergiert gegen $(-2,1)^T$, damit haben wir eine der drei Nullstellen gefunden.

$$\boxed{\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}}$$

Das nichtlineare Gleichungssystem

$$1 - x^2 = y^2$$
$$\frac{(x-2)^2}{a} + \frac{(y-1)^2}{b} = 1,$$

soll mit dem Newton-Verfahren mit $\mathbf{x}^{(0)} = (x^{(0)}, y^{(0)})^T = (2, -1)^T$ gelöst werden.

a) (5 Punkte) Führen Sie den ersten Iterationsschritt *manuell* aus und bestimmen Sie $\mathbf{x}^{(1)}$.

$f(x,y) = \begin{pmatrix} 1 - x^2 - y^2 \\ \frac{(x-2)^2}{a} + \frac{(y-1)^2}{b} - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$, $f(2,-1) = \begin{pmatrix} -4 \\ \frac{4}{b} - 1 \end{pmatrix}$

$Df(x,y) = \begin{pmatrix} -2x & -2y \\ \frac{2(x-2)}{a} & \frac{2(y-1)}{b} \end{pmatrix}$ $\quad Df(2,-1) = \begin{pmatrix} -4 & 2 \\ 0 & \frac{-4}{b} \end{pmatrix}$

$Df^{-1} = \frac{1}{-4 \cdot \frac{-4}{b} - 2 \cdot 0} \begin{pmatrix} \frac{-4}{b} & -2 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}$

$x^{(1)} = x^{(0)} - (Df(x^{(0)}))^{-1} f(x^{(0)})$ $\quad Df^{-1} = \frac{b}{16} \begin{pmatrix} \frac{-4}{b} & -2 \\ 0 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & -\frac{b}{8} \\ 0 & -\frac{b}{4} \end{pmatrix}$

$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & -\frac{b}{8} \\ 0 & -\frac{b}{4} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -4 \\ \frac{4}{b} - 1 \end{pmatrix}$

$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} (-\frac{1}{4} \cdot -4) + (-\frac{b}{8} \cdot (\frac{4}{b} - 1)) \\ (0 \cdot -4) + (-\frac{b}{4} \cdot (\frac{4}{b} - 1)) \end{pmatrix}$

$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 - \frac{4}{8} + \frac{b}{8} \\ -1 + \frac{b}{4} \end{pmatrix}$ $\quad x^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.5 + \frac{b}{8} \\ -1 + \frac{b}{4} \end{pmatrix}$

$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1.5 - \frac{b}{8} \\ -\frac{b}{4} \end{pmatrix}$

Satz 5.1: Quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens für Systeme[1]

Das Newton-Verfahren konvergiert quadratisch für nahe genug an einer Nullstelle $\overline{\boldsymbol{x}}$ liegende Startvektoren, wenn $\boldsymbol{Df}(\overline{\boldsymbol{x}})$ regulär und $\boldsymbol{f}$ dreimal stetig differenzierbar ist.

Das Newtonverfahren für das nichtlineare System

$$\boldsymbol{f}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1,x_2) \\ f_2(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^3 - x_2 - 1 \\ x_1^2 - x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

konvergiert für den Startvektor $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ gegen $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \end{pmatrix}$. Da aber $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \neq 0$ ist das keine Nullstelle. Man sieht entsprechend, dass $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ nicht regulär ist.

a) $f(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} 5x_1x_2 \\ x_1^2x_2^2 + x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

$\partial \left(\frac{f_1}{x_1}\right) = 5x_2$ $\quad \partial \left(\frac{f_2}{x_1}\right) = 2x_1x_2^2 + 1$

$\partial \left(\frac{f_1}{x_2}\right) = 5x_1$ $\quad \partial \left(\frac{f_2}{x_2}\right) = 2x_2x_1^2 + 2$

$Df(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{x_1} & \frac{\partial f_1}{x_2} \\ \frac{\partial f_2}{x_1} & \frac{\partial f_2}{x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5x_2 & 5x_1 \\ 2x_1x_2^2 + 1 & 2x_2x_1^2 + 2 \end{pmatrix}$

Einsetzen $(x_1,x_2) = (1,2)$

$\partial \left(\frac{f_1}{x_1}\right) = 5 \cdot 2 = 10$ $\quad \partial \left(\frac{f_2}{x_1}\right) = 2 \cdot 1 \cdot 2^2 + 1 = 9$

$\partial \left(\frac{f_1}{x_2}\right) = 5 \cdot 1 = 5$ $\quad \partial \left(\frac{f_2}{x_2}\right) = 2 \cdot 2 \cdot 1^2 + 2 = 6$

$Df(1,2) = \begin{pmatrix} 10 & 5 \\ 9 & 6 \end{pmatrix}$

Vereinfachtes Newton-Verfahren für Systeme [1]:

Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f}: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle. Das vereinfachte Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, \ldots$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

  - Setze

$$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

Bsp. Vereinfachtes Newton-Verfahren:

$$\boldsymbol{f}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1,x_2) \\ f_2(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 8x_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Gedämpftes Newton-Verfahren für Systeme [6]:
Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f}: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle, $k_{max} \in \mathbb{N}$ sei vorgegeben. Das gedämpfte Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, \ldots$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems
  $$D\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$
  - Finde das minimale $k \in \{0, 1, \ldots, k_{max}\}$ mit
  $$\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}\right) \|_2 < \| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \|_2$$
  - Falls kein minimales k gefunden werden kann, rechne mit $k = 0$ weiter
  - Setze
  $$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}$$

Lösung: Wir wählen als Startvektor wieder $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$. Der erste Schritt des vereinfachten Newton-Verfahrens ist identisch mit dem ersten Schritt des Newton-Verfahrens. Im zweiten Schritt verwenden wir erneut die Jacobi-Matrix aus dem ersten Schritt; es ist also zu lösen

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)})\,\boldsymbol{\delta}^{(1)} = \boldsymbol{Df}(4,2)\,\boldsymbol{\delta}^{(1)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(1)}) = -\boldsymbol{f}(-2.09, 1.45)$$
$$\Longleftrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 96 \end{pmatrix} \boldsymbol{\delta}^{(1)} = -\begin{pmatrix} 6 \cdot 10^{-9} \\ -12.98 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \boldsymbol{\delta}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.2951 \\ -0.1475 \end{pmatrix}$$

Damit haben wir nach einem Newton-Schritt

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{\delta}^{(1)} = \begin{pmatrix} -2.614 \\ 1.307 \end{pmatrix}$$

Einige weitere Iterierte:

i	0	1	2	5	10
$\boldsymbol{x}^{(i)}$	$\begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.909 \\ 1.455 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.614 \\ 1.307 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.258 \\ 1.129 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.0817 \\ 1.041 \end{pmatrix}$

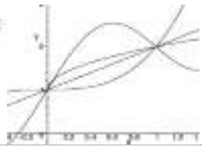
Offensichtlich konvergiert die Folge gegen $(-2, 1)^T$, jedoch deutlich langsamer als das Newton-Verfahren. ■

Definition 6.1: Interpolationsproblem [1]

- Gegeben sind $n+1$ Wertepaare (x_i, y_i), $i = 0, \ldots, n$, mit $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$. Gesucht ist eine stegige Funktion g mit der Eigenschaft $g(x_i) = y_i$ für alle $i = 0, \ldots, n$.

Bsp Interpolationsproblem

Es soll eine Interpolierende für die beiden Stützpunkte (0, 1) und (1, 2) gefunden werden.
Lösung: im einfachsten Fall könnte man eine Gerade durch die beiden Punkte legen, also $g(x) = x + 1$. Aber auch $g(x) = \sqrt{x} + 1$, $g(x) = x^3 + 1$ oder $g(x) = \sin(\pi x) + x + 1$ sind Lösungen, wie in der folgenden Abbildung[3] dargestellt.



Satz 6.1: Lagrange Interpolationsformel [2]

- Durch $n+1$ Stützpunkte mit verschiedenen Stützstellen (d.h. $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$) gibt es genau ein Polynom $P_n(x)$ vom Grade $\leq n$, welches alle Stützpunkte interpoliert, d.h. wo gilt
$$P_n(x_i) = y_i, \; i = 0, 1, \ldots, n$$
- $P_n(x)$ lautet in der Lagrangeform
$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) y_i,$$
dabei sind die $l_i(x)$ die Lagrangepolynome vom Grad n definiert durch
$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

Satz 6.2: Fehlerabschätzung [2]

- Sind die y_i Funktionswerte einer genügend oft stetig differenzierbaren Funktion f (also $y_i = f(x_i)$), dann ist der Interpolationsfehler an einer Stelle x gegeben durch
$$| f(x) - P_n(x) | \leq \frac{|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|}{(n+1)!} \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} | f^{(n+1)}(\xi) |$$

Von der Funktion $y = f(x) = 2^x$ seien die folgenden drei Stützpunkte gegeben:

x	-1	1	3
y	0.5	2	8

Wie gross ist der Interpolationsfehler im Punkt $x = 2$, wenn diese Punkte durch ein Polynom interpoliert werden?

- $n + 1 = 3$, also benötigen wir die dritte Ableitung von $f(x) = 2^x = e^{x\ln 2}$. Diese ist $f'''(x) = (\ln 2)^3 e^{x \ln 2} = (\ln 2)^3 2^x$ und steigt monoton im Intervall $[-1, 3]$ und daher gilt $\max | f^{(n+1)}(\xi) | = (\ln 2)^3 2^3 = 8 \cdot (\ln 2)^3$
- Damit haben wir $| f(2) - P_n(2) | \leq \frac{|(2+1)(2-1)(2-3)|}{6} 8 \cdot (\ln 2)^3 = 1.3321$
- Man sieht, dass das eine recht grobe Abschätzung ist.

- Für das Interpolationspolynom gilt
$$P_2(x) = \sum_{i=0}^{2} l_i(x) y_i = 0.5 \cdot l_0(x) + 2 \cdot l_1(x) + 8 \cdot l_2(x)$$

Die Lagrangepolynome berechnen sich zu

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{(x-1)(x-3)}{(-2)(-4)} = \frac{1}{8}x^2 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}$$
$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{(x+1)(x-3)}{(2)(-2)} = -\frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{4}$$
$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{(x+1)(x-1)}{(4)(2)} = \frac{1}{8}x^2 - \frac{1}{8}$$

Damit erhalten wir
$P_2(x) = 0.5 \cdot l_0(x) + 2 \cdot l_1(x) + 8 \cdot l_2(x) = \frac{9}{16}x^2 + \frac{3}{4}x + \frac{11}{16}$ bzw.
$P_2(2) = 4.4375$ und für den Fehler damit
$| f(2) - P_2(2) | = | 4 - 4.4375 | = 0.4375$

Natürliche kubische Splinefunktion

Bsp. Polynominterpolation

Wir nehmen die Temperaturmessung aus Beispiel 6.1 und bestimmen die Temperatur um 11 Uhr. Um die Rechnung etwas zu vereinfachen, benutzen wir nur die ersten vier Messwerte

t	08.00	10.00	12.00	14.00	Uhr
T	11.2	13.4	15.3	19.5	°C

Zur Demonstration bestimmen wir das Interpolationspolynom vollständig (d.h. für beliebige x-Werte).
Wir haben $n+1 = 4$ Stützpunkte, also ist $n = 3$ und das Interpolationspolynom hat die Form

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{3} l_i(x) y_i = 11.2 \cdot l_0(x) + 13.4 \cdot l_1(x) + 15.3 \cdot l_2(x) + 19.5 \cdot l_3(x).$$

Die Lagrangepolynome berechnen sich zu

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} = \frac{(x-10)(x-12)(x-14)}{(-2)(-4)(-6)} = -\frac{1}{48}x^3 + \frac{3}{4}x^2 - \frac{107}{12}x + 35$$
$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{(x-8)(x-12)(x-14)}{(2)(-2)(-4)} = +\frac{1}{16}x^3 - \frac{17}{8}x^2 + \frac{47}{2}x - 84$$
$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{(x-8)(x-10)(x-14)}{(4)(2)(-2)} = -\frac{1}{16}x^3 + 2x^2 - \frac{83}{4}x + 70$$
$$l_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{(x-8)(x-10)(x-12)}{(6)(4)(2)} = +\frac{1}{48}x^3 - \frac{5}{8}x^2 + \frac{37}{6}x - 20$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} P_n(x) &= 11.2 \cdot l_0(x) + 13.4 \cdot l_1(x) + 15.3 \cdot l_2(x) + 19.5 \cdot l_3(x) \\ &= +\frac{13}{240}x^3 - \frac{133}{80}x^2 + \frac{2137}{120}x - \frac{263}{5} \end{aligned}$$

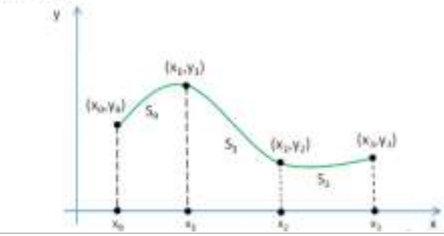
bzw. $P_n(11) = 14.225°C$
Falls man wirklich nur den einen Wert bei $x = 11$ sucht, wäre die Rechnung einiges einfacher:

$$l_0(11) = \frac{(11-10)(11-12)(11-14)}{(-2)(-4)(-6)} = \frac{(1)(-1)(-3)}{(-2)(-4)(-6)} = -\frac{1}{16}$$
$$l_1(11) = \frac{(11-8)(11-12)(11-14)}{(2)(-2)(-4)} = \frac{(3)(-1)(-3)}{(2)(-2)(-4)} = \frac{9}{16}$$
$$l_2(11) = \frac{(11-8)(11-10)(11-14)}{(4)(2)(-2)} = \frac{(3)(1)(-3)}{(4)(2)(-2)} = \frac{9}{16}$$
$$l_3(11) = \frac{(11-8)(11-10)(11-12)}{(6)(4)(2)} = \frac{(3)(1)(-1)}{(6)(4)(2)} = -\frac{1}{16}$$

und damit
$P_n(11) = 11.2 \cdot l_0(11) + 13.4 \cdot l_1(11) + 15.3 \cdot l_2(11) + 19.5 \cdot l_3(11) = 14.225,$

Spline-Interpolation

Gegeben sind die vier Stützpunkte (x_i, y_i) für $i = 0, \ldots, 3$. Wir suchen nun die Splinefunktion S, die durch diese vier Punkte geht und sich zusammensetzt aus den drei kubischen Polynomen S_0, S_1 und S_2.



$$S_i(x)=a_i+b_i(x-x_i)+c_i(x-x_i)^2+d_i(x-x_i)^3$$

dargestellt wird, also $S(x)=S_i(x)$ mit $x\in[x_i,x_{i+1}]$.

c_0 & c_n ist immer = 0

$$Ac=z$$

mit

$$A=\begin{pmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & & & \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & \\ & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & h_{n-3} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-2} \\ & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{pmatrix}$$

$$c=\begin{pmatrix} c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_{n-1}\end{pmatrix},\quad z=\begin{pmatrix} 3\frac{y_2-y_1}{h_1}-3\frac{y_1-y_0}{h_0}\\ 3\frac{y_3-y_2}{h_2}-3\frac{y_2-y_1}{h_1}\\ \vdots\\ 3\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}-3\frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}}\end{pmatrix}$$

die Koeffizienten a_i, b_i, c_i, d_i der kubischen Polynome S_i für $i=0,1,2$ und geben Sie die $S_i(x)$ explizit an.

x_i	4	6	8	10
y_i	6	3	9	0

$\to n = 3$

$(x_0,y_0)=(4,6)$, $(x_1,y_1)=(6,3)$, $(x_2,y_2)=(8,9)$, $(x_3,y_3)=(10,0)$

$S_i(x)=a_i+b_i(x-x_i)+c_i(x-x_i)^2+d_i(x-x_i)^3$, $i=0,1,2$

$\frac{c_2-c_1}{h_1}-\frac{c_1-c_0}{h_0}=\frac{3}{h_1}\left(\frac{y_2-y_1}{h_1}-\frac{y_1-y_0}{h_0}\right)$ $\quad h_0=x_1-x_0=6-4=2$

$\frac{c_3-c_2}{h_2}-\frac{c_2-c_1}{h_1}=\frac{3}{h_2}\left(\frac{y_3-y_2}{h_2}-\frac{y_2-y_1}{h_1}\right)$ $\quad h_1=x_2-x_1=8-6=2$, $h_2=x_3-x_2=10-8=2$

$$\left.\begin{array}{l}\frac{c_2-c_1}{2}-\frac{c_1-c_0}{2}=\frac{3}{2}\left(\frac{9-3}{2}-\frac{3-6}{2}\right)\\ \frac{c_3-c_2}{2}-\frac{c_2-c_1}{2}=\frac{3}{2}\left(\frac{0-9}{2}-\frac{9-3}{2}\right)\end{array}\right\}\text{nach Lösung der Gleichung}\Rightarrow$$

$c_0=0$, $c_1=2.55$, $c_2=-1.45$, $c_3=0$ — der natürlichen Spline

$b_i=\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}-\frac{h_i}{3}(2c_i+c_{i+1})$ $\quad b_0=\frac{3-6}{2}-\frac{2}{3}(2\cdot 0+2.55)=-3.2$

$b_1=\frac{9-3}{2}-\frac{2}{3}(2\cdot 2.55+(-1.45))=1.5$ $\quad b_2=\frac{0-9}{2}-\frac{2}{3}(2\cdot(-1.45)+0)=0.7$

$d_i=\frac{c_{i+1}-c_i}{3h_i}$ $\quad d_0=\frac{2.55-0}{3\cdot 2}=0.425$ $\quad d_1=\frac{-1.45-2.55}{3\cdot 2}=-1.0$ $\quad d_2=\frac{0-(-1.45)}{3\cdot 2}=0.575$

$S_0(x)=6+(-3.25)(x-4)+0.000(x-4)^2+0.425(x-4)^3$

$S_1(x)=3+1.5(x-6)+2.55(x-6)^2+(-1.0)(x-6)^3$

$S_2(x)=9+0.7(x-8)+(-1.45)(x-8)^2+0.575(x-8)^3$

$$S(x)=\begin{cases}S_0(x)=a+2x+cx^2+0.5x^3 & \text{für } 0\le x\le 2\\ S_1(x)=6+b(x-2)+2(x-2)^2+d(x-2)^3 & \text{für } 2\le x\le 3\end{cases}\qquad \underbrace{0,2,3}_{n=3}$$

Bestimmen Sie, für welche Werte von a, b, c und d die Funktion $S(x)$ eine kubische Splinefunktion mit der "not-a-knot" Bedingung ist (d.h. dass die dritten Ableitungen von S_0 und S_1 an der Stelle $x=2$ identisch sind).

$S_0'=2+2cx+1.5x^2$ $\quad S_1'(x)=b+4(x-2)+3d(x-2)^2$

$S_0''=2c+3x$ $\quad S_1''(x)=4+6d(x-2)$

$S_0'''=3$ $\quad S_1'''(x)=6d$

$S_0=S_1$

$a+2(2)+c(2)^2+0.5(2)^3=6+b(2-2)+2(2-2)^2+d(2-2)^3$

$a+8+4c=6$

$S_0(2)=S_1(2)$ $\quad a=-2-4c \Rightarrow \underline{\underline{-2-4(-1)=2}}$

$2+2c(2)+1.5(2)^2=b+4(2-2)+3d(2-2)^2$

$8+4c=b \to \underline{\underline{8+4(-1)=4}}$

$S_0'(2)=S_1'(2)$

$S_0''(2)=S_1''(2)$ $\quad S_0'''(2)=S_1'''(2)$

$2c+3(2)=4+6d(2-2)$ $\quad 3=6d$

$2c+6=4$ $\quad \frac{3}{6}=d$

$2c=-2$ $\quad \underline{\frac{1}{2}=d}$

$\underline{\underline{c=-1}}$

Problemstellung:

- Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}S_0&=a_0+b_0(x-x_0)+c_0(x-x_0)^2+d_0(x-x_0)^3,\ x\in[x_0,x_1]\\ S_1&=a_1+b_1(x-x_1)+c_1(x-x_1)^2+d_1(x-x_1)^3,\ x\in[x_1,x_2]\\ S_2&=a_2+b_2(x-x_2)+c_2(x-x_2)^2+d_2(x-x_2)^3,\ x\in[x_2,x_3]\end{aligned}$$

müssen wir $3\cdot 4=12$ Koeffizienten berechnen, wofür wir 12 Bedingungen benötigen.

- Diese lauten:

1. Interpolation der Stützpunkte:

$$\begin{aligned}S_0(x_0)&=y_0\\ S_1(x_1)&=y_1\\ S_2(x_2)&=y_2\\ S_2(x_3)&=y_3\end{aligned}$$

2. Stetiger Übergang an den Stellen x_1 und x_2:

$$\begin{aligned}S_0(x_1)&=S_1(x_1)\\ S_1(x_2)&=S_2(x_2)\end{aligned}$$

3. Erste Ableitung an den Übergangsstellen muss übereinstimmen (keine Knicke):

$$\begin{aligned}S_0'(x_1)&=S_1'(x_1)\\ S_1'(x_2)&=S_2'(x_2)\end{aligned}$$

4. Zweite Ableitung an den Übergangsstellen muss übereinstimmen (gleiche Krümmung):

$$\begin{aligned}S_0''(x_1)&=S_1''(x_1)\\ S_1''(x_2)&=S_2''(x_2)\end{aligned}$$

Jetzt haben wir allerdings erst 10 Bedingungen für die 12 Koeffizienten. Das heisst, wir brauchen noch zwei zusätzliche. Diese können, in Abhängigkeit der Problemstellung, 'frei' gewählt werden und beziehen sich häufig auf die beiden Randstellen, hier x_0 und x_3.
Man unterscheidet zum Beispiel:

- die *natürliche kubische Splinefunktion*:

$$\boxed{\begin{aligned}S_0''(x_0)&=0\\ S_2''(x_3)&=0\end{aligned}}$$

mit einem möglichen Wendepunkt im Anfangs- und Endpunkt.

- die *periodische kubische Splinefunktion*

$$\begin{aligned}S_0'(x_0)&=S_2'(x_3)\\ S_0''(x_0)&=S_2''(x_3)\end{aligned}$$

wenn man die Periode $p=x_3-x_0$ hat und damit $y_0=y_3$ bzw. $S_0(x_0)=S_2(x_3)$ gilt.

- die kubische Splinefunktion mit *not-a-knot Bedingung*:

$$\begin{aligned}S_0'''(x_1)&=S_1'''(x_1)\\ S_1'''(x_2)&=S_2'''(x_2)\end{aligned}$$

- Übersetzt man alle 12 Gleichungen in ein 12×12 Gleichungssystem, erhält man im Falle der natürlichen kubischen Splinefunktion:

- Durch eine Verallgemeinerung des Gleichungssystems für beliebig viele Stützpunkte erhält man den folgenden Algorithmus zur Berechnung der Koeffizienten für die natürliche kubische Splinefunktion:

Lineare Ausgleichsprobleme:

Definition 6.4: Lineares Ausgleichproblem [1]

- Gegeben seien n Wertepaare $(x_i,y_i), i=1,\dots,n$, und m Basisfunktionen $f_1,\dots,f_m$ auf einem Intervall $[a,b]$. Wir wählen F als die Menge der Ansatzfunktionen $f:=\lambda_1 f_1+\dots+\lambda_m f_m$ mit $\lambda_j\in\mathbb{R}$, also $F=\{f=\lambda_1 f_1+\dots+\lambda_m f_m \mid \lambda_j\in\mathbb{R}, j=1,\dots,m\}$.
- Es liegt dann ein **lineares Ausgleichproblem** vor mit dem Fehlerfunktional

$$\begin{aligned}E(f)&=\|y-f(x)\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}(y_i-f(x_i))^2\\ &=\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\sum_{j=1}^{m}\lambda_j f_j(x_i)\right)^2=\|y-A\lambda\|_2^2\end{aligned}$$

$$A=\begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_m(x_1)\\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_m(x_2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ f_1(x_n) & f_2(x_n) & \cdots & f_m(x_n)\end{pmatrix},\quad y=\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_n\end{pmatrix},\quad \lambda=\begin{pmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \vdots\\ \lambda_m\end{pmatrix}$$

- Das System $A\lambda=y$ heisst **Fehlergleichungssystem**.

Definition 6.2: Ausgleichproblem [1]

- Gegeben sind n Wertepaare (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$ mit $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$.
- Gesucht ist eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, die die Wertepaare in einem gewissen Sinn bestmöglich annähert, d.h. dass möglichst genau gilt

$$f(x_i) \approx y_i$$

für alle $i = 1, \dots, n$.

Definition 6.3: Ansatzfunktionen / Ausgleichsfunktion / Fehlerfunktional / kleinste Fehlerquadrate [1]

- Gegeben sei eine Menge F von stetigen **Ansatzfuntkionen** f auf dem Intervall $[a, b]$ sowie n Wertepaare (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$.
- Ein Element $f \in F$ heisst **Ausgleichsfunktion** von F zu den gegebenen Wertepaaren, falls das **Fehlerfunktional**

$$E(f) := \| \mathbf{y} - f(\mathbf{x}) \|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

für f minimal wird, d.h. $E(f) = \min\{E(g) \mid g \in F\}$.

- Man nennt das so gefundene f dann optimal im Sinne der **kleinsten Fehlerquadrate** (least squares fit).

Lineare Ausgleichsprobleme

Ausgehend von der Wertetabelle

x_i	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_i	y_1	y_2	$\dots$	y_n

suchen die Ausgleichsgerade der Form $f(x) = ax + b$, also $F := \{a_1 f_1 + a_2 f_2 \mid a_1, a_2 \in \mathbb{R}\}$ mit den Basisfunktionen $f_1(x) = x$ und $f_2(x) = 1$.

Das Fehlerfunktional hat dann die Form

$$E(f)(a, b) := E(f) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2 .$$

$$\begin{aligned}
0 &\overset{!}{=} \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b)) \cdot (x_i) = \sum_{i=1}^{n} (x_i y_i - a x_i^2 - b x_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} a x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} b x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - a \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - b \sum_{i=1}^{n} x_i \\
0 &\overset{!}{=} \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b)) = \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} a x_i - \sum_{i=1}^{n} b \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} a x_i - \sum_{i=1}^{n} b = \sum_{i=1}^{n} y_i - a \sum_{i=1}^{n} x_i - b \sum_{i=1}^{n} 1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b \sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
a \sum_{i=1}^{n} x_i + b \underbrace{\sum_{i=1}^{n} 1}_{=n} &= \sum_{i=1}^{n} y_i
\end{aligned}$$

oder in Matrixschreibweise erhalten wir das lineare Gleichungssystem für die Unbekannten (a, b)

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{pmatrix}$$

und können dieses nach a, b auflösen.

Bsp:

Wir bestimmen die Ausgleichsgerade $f(x) = ax + b$ für die folgende Wertetabelle:

x_i	1	2	3	4
y_i	6	6.8	10	10.5

Mit $n = 4$ und

$$\sum_{i=1}^{4} x_i^2 = 30, \ \sum_{i=1}^{4} x_i = 10, \ \sum_{i=1}^{4} x_i y_i = 91.6, \ \sum_{i=1}^{4} y_i = 33.3$$

erhalten wir das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 91.6 \\ 33.3 \end{pmatrix}$$

mit der Lösung

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.67 \\ 4.15 \end{pmatrix}.$$

Also ist die gesuchte Ausgleichsgerade $f(x) = 1.67x + 4.15$ (siehe folgende Abb.).

Definition 6.5: Normalgleichungen / Normalgleichungssystem [1]

- Die Gleichungen

$$\frac{\partial E(f)(\lambda_1, \dots, \lambda_m)}{\partial \lambda_j} = 0, \quad j = 1, \dots, m$$

heissen **Normalgleichungen** des linearen Ausgleichproblems.

- Das System sämtlicher Normalgleichungen heisst **Normalgleichungssystem** und lässt sich als lineares Gleichungssystem schreiben

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \lambda = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$$

- Die Lösung $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ des Normalgleichungssystems beinhaltet die gesuchten Parameter des linearen Ausgleichproblems.

Normalgleichung:

Aus

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$$

folgt für das Normalgleichungssystem

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \lambda = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$$

das äquivalente, häufig aber besser konditionierte Gleichungssystem

$$\mathbf{R} \lambda = \mathbf{Q}^T \mathbf{y}$$

Bsp:

x_i	1	2	3	4
y_i	6	6.8	10	10.5

Mit $f_1(x) = x$ und $f_2(x) = 1$ erhalten wir

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) \\ f_1(x_3) & f_2(x_3) \\ f_1(x_4) & f_2(x_4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \mathbf{A}^T \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 4 \end{pmatrix} \\
\mathbf{A}^T \mathbf{y} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ 6.8 \\ 10 \\ 10.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 91.6 \\ 33.3 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Damit entspricht $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \lambda = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$ aus Bsp. 9.1.

Bsp:

Funktion der Form $f(x) = ae^{bx}$, die die folgenden Daten möglichst gut approximiert:

x_i	0	1	2	3	4
y_i	3	1	0.5	0.2	0.05

Auf den ersten Blick liegt hier kein lineares Ausgleichproblem vor, da wir $f(x)$ nicht als Summe $af_1(x) + bf_2(x)$ schreiben können.

Wir können aber durch beidseitiges Logarithmieren einen linearen Ansatz erreichen:

$$\ln f(x) = \ln\left(ae^{bx}\right) = \ln(a) + b \cdot \ln(e^x) = \ln(a) \cdot \underbrace{1}_{f_1(x)} + b \cdot \underbrace{x}_{f_2(x)}$$

Wir werden durch die Lösung des Normalgleichungssystems also $\ln(a)$ und b berechnen können, wenn wir die y_i logarithmieren.

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^T \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix} \\
\mathbf{A}^T \cdot \tilde{\mathbf{y}} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ln 3 \\ \ln 1 \\ \ln 0.5 \\ \ln 0.2 \\ \ln 0.05 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4.1997 \\ -18.1975 \end{pmatrix} \\
\mathbf{A}^T \mathbf{A} \lambda &= \mathbf{A}^T \tilde{\mathbf{y}} \Rightarrow \lambda = \begin{pmatrix} \ln a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.11968\ldots \\ -0.97981\ldots \end{pmatrix} \\
\Rightarrow f(x) &= e^{\ln a} \cdot e^{bx} = 3.06388\ldots \cdot e^{-0.97981\ldots x}
\end{aligned}$$

$(x_1, y_1) = (1, 6), \quad (x_2, y_2) = (2, 6.8), \quad (x_3, y_3) = (3, 10), \quad (x_4, y_4) = (4, 10.5)$

1. Berechnung der Summen:

$$\sum x_i = 1 + 2 + 3 + 4 = 10$$

$$\sum y_i = 6 + 6.8 + 10 + 10.5 = 33.3$$

$$\sum x_i^2 = 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 = 1 + 4 + 9 + 16 = 30$$

$$\sum x_i y_i = (1 \cdot 6) + (2 \cdot 6.8) + (3 \cdot 10) + (4 \cdot 10.5) = 6 + 13.6 + 30 + 42 = 91.6$$

2. Aufstellen des Gleichungssystems:

Das lineare Gleichungssystem basiert auf den Formeln:

$$nb + \left(\sum x_i\right) a = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i\right) b + \left(\sum x_i^2\right) a = \sum x_i y_i$$

Einsetzen der berechneten Werte mit $n = 4$:

$$4b + 10a = 33.3$$

$$10b + 30a = 91.6$$

3. Lösung des Gleichungssystems:

Zunächst eliminieren wir b, indem wir die erste Gleichung mit 3 multiplizieren:

$$12b + 30a = 99.9$$

Nun subtrahieren wir die zweite Gleichung:

$$(12b + 30a) - (10b + 30a) = 99.9 - 91.6$$

$$2b = 8.3$$

$$b = \frac{8.3}{2} = 4.15$$

Nun setzen wir $b = 4.15$ in die erste Gleichung ein:

$$4(4.15) + 10a = 33.3$$

$$16.6 + 10a = 33.3$$

$$10a = 16.7$$

$$a = \frac{16.7}{10} = 1.67$$

4. Ergebnis:

Die gesuchte Ausgleichsgerade lautet:

$$f(x) = 1.67x + 4.15$$

Nichtlineare Ausgleichprobleme:

Falls die Ansatzfunktionen f_p linear in den Parametern sind, haben wir den Spezialfall des linearen Ausgleichsproblems mit $\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{A}\lambda$ (vgl. Def. 6.4).

x_i	0	1	2	3	4
y_i	3	1	0.5	0.2	0.05

Wir haben also zwei Parameter a und b in der Ansatzfunktion $f_p(a, b, x) = ae^{bx}$ so zu bestimmen, dass

$$E(f) = \sum_{i=1}^{5} (y_i - f_p(a, b, x_i))^2 = \sum_{i=1}^{5} (y_i - ae^{bx_i})^2$$

minimal wird.

Nullsetzen der partiellen Ableitungen liefert

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial E(f)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{5} \frac{\partial}{\partial a}(y_i - ae^{bx_i})^2 \\ &= \sum_{i=1}^{5} 2 \cdot (y_i - ae^{bx_i}) \cdot (-e^{bx_i}) \\ &= -2\sum_{i=1}^{5} (y_i - ae^{bx_i}) \cdot e^{bx_i} \\ 0 &= \frac{\partial E(f)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{5} \frac{\partial}{\partial b}(y_i - ae^{bx_i})^2 \\ &= \sum_{i=1}^{5} 2 \cdot (y_i - ae^{bx_i}) \cdot (-ae^{bx_i}) \cdot x_i \\ &= -2\sum_{i=1}^{5} (y_i - ae^{bx_i}) \cdot ae^{bx_i} \cdot x_i \end{aligned}$$

Definition 9.5: Allgemeines Ausgleichproblem [1]

- Gegeben seien n Wertepaare $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$, und die Menge F der Ansatzfunktionen $f_p = f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x)$ mit m Parametern $\lambda_j \in \mathbb{R}$, $j = 1, ..., m$, also $F = \{f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x) \mid \lambda_j \in \mathbb{R}, j = 1, ..., m\}$.
- Das **allgemeine Ausgleichproblem** besteht darin, die m Parameter $\lambda_1, ..., \lambda_m$ zu bestimmen, so dass das Fehlerfunktional E

$$\begin{aligned} E(f) &= \sum_{i=1}^{n} (y_i - f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_i))^2 = \left\| \begin{pmatrix} y_1 - f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_1) \\ y_2 - f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_2) \\ \vdots \\ y_n - f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_n) \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \| y - f(\lambda) \|_2^2 \end{aligned}$$

minimal wird unter allen zulässigen Parameterbelegungen.

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{f}(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m) := \begin{pmatrix} f_1(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m) \\ f_2(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m) \\ \vdots \\ f_n(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_1) \\ f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_2) \\ \vdots \\ f_p(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m, x_n) \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_m \end{pmatrix}$$

Gauss-Newton-Verfahren

- Sei $\lambda^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe des Minimums des Fehlerfunktionals E der Ausgleichsfunktion $f(\lambda)$. Das Gauss-Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung des Minimums lautet:
- Berechne die Funktion

$$g(\lambda) := y - f(\lambda)$$

sowie deren Jacobi-Matrix

$$Dg(\lambda)$$

- Für $k = 0, 1, ...$:
  1. Berechne $\delta^{(k)}$ als Lösung des linearen Ausgleichproblems

  $$\min \| g(\lambda^{(k)}) + Dg(\lambda^{(k)}) \cdot \delta^{(k)} \|_2^2,$$

  d.h. löse konkret das Normalgleichungssystem

  $$Dg(\lambda^{(k)})^T Dg(\lambda^{(k)})\delta^{(k)} = -Dg(\lambda^{(k)})^T \cdot g(\lambda^{(k)})$$

  nach $\delta^{(k)}$ auf. Dies wird am stabilsten mit der QR–Zerlegung von $Dg(\lambda^{(k)})$ erreicht:

  (a) Berechne die QR–Zerlegung

  $$Dg(\lambda^{(k)}) = Q^{(k)} R^{(k)}$$

  (b) Löse nach $\delta^{(k)}$ auf:

  $$R^{(k)}\delta^{(k)} = -Q^{(k)T} g(\lambda^{(k)})$$

  2. Setze

  $$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \delta^{(k)}.$$

Gedämpftes Gauss-Newton-Verfahren

Sei $\lambda^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe des Minimums von E der Ausgleichsfunktion $f(\lambda)$. Das gedämpfte Gauss-Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung des Minimums lautet:

Berechne die Funktion

$$g(\lambda) := y - f(\lambda)$$

sowie deren Jacobi-Matrix

$$Dg(\lambda)$$

Für $k = 0, 1, ...$:

1. Berechne $\delta^{(k)}$ als Lösung des linearen Ausgleichproblems

$$\min \| g(\lambda^{(k)}) + Dg(\lambda^{(k)}) \cdot \delta^{(k)} \|_2^2,$$

d.h. löse konkret das Normalgleichungssystem

$$Dg(\lambda^{(k)})^T Dg(\lambda^{(k)})\delta^{(k)} = -Dg(\lambda^{(k)})^T \cdot g(\lambda^{(k)})$$

nach $\delta^{(k)}$ auf. Dies wird am stabilsten mit der QR–Zerlegung von $Dg(\lambda^{(k)})$ erreicht:

(a) Berechne die QR–Zerlegung

$$Dg(\lambda^{(k)}) = Q^{(k)} R^{(k)}$$

(b) Löse nach $\delta^{(k)}$ auf:

$$R^{(k)}\delta^{(k)} = -Q^{(k)T} g(\lambda^{(k)})$$

2. Finde das minimale $p \in \{0, 1, ..., p_{max}\}$ mit:

$$\| g\underbrace{\left(\lambda^{(k)} + \frac{\delta^{(k)}}{2^p}\right)}_{\lambda^{(k+1)}} \|_2^2 < \| g\left(\lambda^{(k)}\right) \|_2^2$$

3. Falls kein minimales p gefunden werden kann, rechne mit $p = 0$ weiter
4. Setze

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \frac{\delta^{(k)}}{2^p}$$

Dies sind zwei nichtlineare Gleichungen, die mit dem Newton-Verfahren für Systeme (vlg. Kap. 5) gelöst werden können.
Wegen der Länge der Ausdrücke verzichten wir hier an dieser Stelle auf die Details , ein funktionierendes Python Skript ist unten angegeben.
Für die Startwerte $a_0 = 3$ und $b_0 = -1$ und einer Fehlerschranke von 10^{-5} liefert es nach zweimaliger Iteration

$$a = 2.98165..., \; b = -1.00328...$$

Zum Vergleich: in Bsp. 6.8 hatten wir durch Logarithmieren das nichtlineare Ausgleichsproblem auf ein lineares zurückgeführt und erhielten die Parameter

$$a = 3.06388..., \; b = -0.97981...$$

Quadraturverfahren:

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i).$$

xi die Stützstellen,ai die Gewichte

Es soll $\int_2^4 \frac{1}{x}dx$ angenähert werden, indem $f(x) = \frac{1}{x}$ auf dem Intervall [2, 4] durch eine Konstante angenähert wird.
Lösung: Wir wählen den Funktionswert in der Mitte des Intervalls [2, 4], also $f(3) = \frac{1}{3}$ und erhalten damit als Näherungswert $\int_2^4 \frac{1}{x}dx \approx (4-2)\cdot\frac{1}{3} = \frac{2}{3}$ (vergleich Skizze unten).
Zum Vergleich: der exakte Wert ist $\int_2^4 \frac{1}{x}dx = \ln(4) - \ln(2) = 0.6931...$.

Definition 7.1 [1]: Rechteckregel / Trapezregel

- Die **Rechteckregel** (bzw. Mittelpunktsregel) Rf und die **Trapezregel** Tf zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

sind definiert als

$$\begin{aligned} Rf &= f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot(b-a) \\ Tf &= \frac{f(a)+f(b)}{2}\cdot(b-a) \end{aligned}$$

Definition 7.2 [1]: summierte Rechteckregel / summierte Trapezregel

- Sei $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ stetig, $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ mit der konstanten Breite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i\cdot h$ für $i = 0, ..., n-1$ und $x_n = b$.
Die **summierte Rechteckregel** (bzw. summierte Mittelpunktsregel) $Rf(h)$ und die **summierte Trapezregel** $Tf(h)$ zur Approximation von $\int_a^b f(x)\,dx$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} Rf(h) &= h\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) \\ Tf(h) &= h\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right) \end{aligned}$$

Simpson-Regel:

Wir erhalten die Mittelpunkts- bzw. Rechtecksregel, wenn wir $f(x)$ in $\int_a^b f(x)dx$ durch eine Konstante (Polynom 0. Grades) ersetzen.

Wenn wir $f(x)$ durch eine Gerade (Polynom 1. Grades) ersetzen, erhalten wir analog die Trapezregel.

Nun können wir noch einen Schritt weitergehen und $f(x)$ durch ein Polynom $p(x)$ 2. Grades ersetzen.

Definition 7.3 [1]: summierte Simpsonregel

- Sei $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ stetig, $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ mit der konstanten Breite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i\cdot h$ für $i = 0, ..., n-1$ und $x_n = b$.
Die **summierte Simpsonregel** $Sf(h)$ zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

ist gegeben durch

$$Sf(h) \equiv \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

Simpson-Regel Bsp:

Wir machen für $p(x)$ und $x \in [a,b]$ den Ansatz

$$p(x) = \alpha + \beta(x-a) + \gamma(x-a)(x-b)$$

und fordern, dass $p(x)$ an den Stellen $x_1 = a$, $x_2 = \frac{b+a}{2}$ und $x_3 = b$ exakt mit $f(x)$ übereinstimmt, also:

$$\begin{aligned} p(a) &= \alpha \overset{!}{=} f(a) \\ p\left(\frac{b+a}{2}\right) &= \alpha + \beta\left(\frac{b+a}{2} - a\right) + \gamma\left(\frac{b+a}{2} - a\right)\left(\frac{b+a}{2} - b\right) \\ &= \alpha + \beta\left(\frac{b-a}{2}\right) + \gamma\left(\frac{b-a}{2}\right)\left(\frac{a-b}{2}\right) \overset{!}{=} f\left(\frac{b+a}{2}\right) \\ p(b) &= \alpha + \beta(b-a) \overset{!}{=} f(b) \end{aligned}$$

Dies ist ein einfach lösbares lineares Gleichungssystem mit den unbekannten α, β, γ.
Die Lösung ist dann

$$\begin{aligned} \alpha &= f(a) \\ \beta &= \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \\ \gamma &= \frac{f\left(\frac{b+a}{2}\right) - f(a) - \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\cdot\left(\frac{b-a}{2}\right)}{-\left(\frac{b-a}{2}\right)^2} = \frac{f(a) - 2f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b)}{2\left(\frac{b-a}{2}\right)^2}. \end{aligned}$$

wobei wir $h = \frac{b-a}{2}$ gesetzt haben. Damit ist das Näherungspolynom $p(x)$ eindeutig bestimmt und wir können es mittels der Potenzregel einfach integrieren.

$$f(x) \approx p(x)$$

gilt also

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

Dies ist die *Simpson-Regel*.

Summierte Simpsonregel Bsp:

Summierten Quadraturformeln

Satz 7.1 [1]: Fehlerabschätzung für summierte Quadraturformeln

Zeigen Sie, dass die summierte Simpsonregel als gewichtetes Mittel der summierten Trapez- und Rechteckregel interpretiert werden kann:

$$Sf(h) = \frac{1}{3}\left(Tf(h) + 2Rf(h)\right)$$

Berechnen Sie $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ näherungsweise mit der summierten Simpsonregel mit $n = 4$.

LSG ergänzen

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Rf(h) \right| \leq \frac{h^2}{24}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Tf(h) \right| \leq \frac{h^2}{12}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - Sf(h) \right| \leq \frac{h^4}{2880}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Trapez Bsp:

$$I = \int_0^\pi \sin(x)\,dx,$$

wobei x im Bogenmaß zu verstehen ist.

a) (1P) Berechnen Sie das Integral analytisch.

b) (2P) Nähern Sie das Integral von Hand mit der (einfachen) Trapezregel an.

c) (3P) Welche Schrittweite h dürfen Sie maximal wählen, damit Sie mit der summierten Trapezregel garantiert einen Fehler kleiner als 10^{-3} erhalten?

d) (3P) Approximieren Sie nun das Integral mit der summierten Trapezregel und der oben bestimmten Schrittweite. Schreiben Sie dazu ein passendes Python-Skript.

e) (1P) Vergleichen Sie den gemachten Fehler mit der vorgegebenen Schranke.

a) $-\cos(\pi) - (-\cos(0)) = 2$

b) $\int_0^\pi \sin(x) = \frac{f(0) - f(\pi)}{2}(\pi - 0) = \frac{0 - 0}{2}(\pi - 0) = 0$ $\quad \sin(0), \sin(\pi)$

c) $\left|\int_a^b f(x)\,dx - Tf(h)\right| \leq \frac{h^2}{12}(b-a) \cdot \max|f''(x)|$ $\quad a = 0,\ b = \pi$

$f''(x) = -\sin(x)$

$\frac{h^2}{12}(\pi - 0) \leq 10^{-3}$

$h \leq \sqrt{\frac{10^{-3} \cdot 12}{\pi}}$

$h \leq 0.0618$

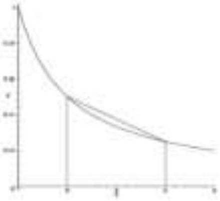
Trapez Methode:

Jetzt soll $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ durch ein Trapz angenähert werden. Zur Erinnerung: die Fläche eines Trapezes berechnet sich als

$$A = \frac{a+c}{2} \cdot h,$$

wobei a und c die parallelen Grundseiten des Trapezes sind und h seine Höhe.

Lösung: $\int_2^4 \frac{1}{x} dx \approx \frac{f(2)+f(4)}{2}(4-2) = 0.75$



Mit Rhomberg Extrapolation:

Summierte Trapezregel:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

mit:

- $h = \frac{b-a}{n}$,
- $x_i = a + ih$ für $i = 0, 1, \ldots, n$.

b) (2 P) Berechnen Sie numerisch, welche Höhe

$$H = \int_0^T v(t)\,dt$$

die Rakete zur Zeit $T = 30$ hat. Machen Sie das mit der summierten Trapezregel unter Verwendung der Schrittweite $h = 10$. Notieren Sie die Rechnung von Hand. Geben Sie das Ergebnis auf eine Nachkommastelle genau an.

c) (3 P) Schätzen Sie ab, wie gross die Schrittweite h mindestens sein muss, damit der absolute Fehler bei Berechnung des Integrals aus b) mit der summierten Trapezregel höchstens 0.1 beträgt. Sie können dabei verwenden, dass gilt

[illegible]

b) $t = 0, 10, 20, 30$

$v(t) = 2000 \ln(\ldots)$ [illegible]

$v(0) = 2000 \cdot \ln(1) - 0 = 0$

$H \approx \int_0^{30} v(t) \approx \frac{h}{2}\left(v(0) + \ldots + 2v(20) + v(30)\right)$ [illegible]

$H \approx 5727.0$

c) $0.1 \leq \frac{h^2}{12}(30 - 0)$ [illegible]

$\sqrt{\frac{0.1 \cdot 12}{(30) \cdot \ldots}} \leq h$

Summierten Wuadraturformeln Bsp.:

Sie wollen

$$I = \int_0^{0.5} e^{-x^2}\,dx$$

näherungsweise mit der summierten Trapezregel auf einen absoluten Fehler von maximal 10^{-5} genau berechnen.

Bestimmen Sie eine geeignete Schrittweite h und berechnen Sie entsprechend den Wert der summierten Trapezregel.

Mit $f(x) := e^{-x^2}$ haben wir gemäß (7.20) h so zu bestimmen, dass

$$|I - Tf(h)| \leq \frac{h^2}{12}(0.5 - 0) \max_{x\in[0,0.5]} |f''(x)| \leq 10^{-5}$$

gilt. Wir haben auf $[0, 0.5]$

$$|f''(x)| = 2\underbrace{e^{-x^2}}_{\leq 1}|1 - 2x^2| \leq 2(1 - 2x^2) \leq 2.$$

Unsere Forderung an h lautet also $\frac{h^2}{12} \leq 10^{-5}$, d. h. $h \leq 0.01095\ldots$ Wegen $N = (0.5 - 0)/h$ macht demnach $N = 46$ Sinn. Mit $h = 0.5/46$ erhalten wir $Tf(h) = 0.4612733200$.

Berechnen Sie das Integral

$$\int_0^{\pi} \cos(x^2)dx$$

manuell mit der Trapezregel $Tf(h)$ für die Schrittweiten $h_j = \frac{b-a}{2^j}$, $(j = 0, \ldots, 4)$ (Achtung: die erste Spalte enthält also fünf Werte) und extrapolieren Sie diese mittels Romberg-Extrapolation so weit wie möglich. Schreiben Sie die Summen für die T_{j0} komplett mit allen Summanden auf soweit nötig, also z.B.

$$T_{20} = h_2 \left(\frac{\cos(\ldots) + \cos(\ldots)}{2} + \cos(\ldots) + \cos(\ldots) + \cos(\ldots) \right),$$

aber

$$T_{40} = h_4 \left(\frac{\cos(\ldots) + \cos(\ldots)}{2} + \cos(\ldots) + \cos(\ldots) + \ldots + \cos(\ldots) \right).$$

$$\boxed{T(h) = h\left(\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)}$$

$j = 0$, $h_0 = \frac{\pi - 0}{2^0} = \pi$, $x_0 = 0$, $x_n = \pi$

$T_{00} = \pi\left(\frac{\cos(0^2) + \cos(\pi^2)}{2}\right) = \pi\left(\frac{1 + \cos(\pi^2)}{2}\right) = 0.7529$

$j = 1$, $h_1 = \frac{\pi}{2}$, punkte $x = 0, \frac{\pi}{2}, \pi$ $(2 + 1 = 3$ Pkt$)$

$T_{10} = \frac{\pi}{2}\left(\frac{\cos(0^2) + \cos(\pi^2)}{2} + \underbrace{\cos\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\right)}_{2-1=1}\right) = -1.1503$

$j = 2$, $h_2 = \frac{\pi}{4}$, punkte $x = 0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi$ $(4 + 1 = 5$ Pkt$)$

$T_{20} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{\cos(0^2) + \cos(\pi^2)}{2} + \underbrace{\cos\left(\left(\frac{\pi}{4}\right)^2\right) + \cos\left(\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\right) + \cos\left(\left(\frac{3\pi}{4}\right)^2\right)}_{n-1 = 4-1 = 3}\right) = 0.6498$

$j = 3$, $h_3 = \frac{\pi}{8}$, punkte $= 8 + 1 = 9$

$T_{30} = \frac{\pi}{8}\left(\frac{\cos(0^2) + \cos(\pi^2)}{2} + \underbrace{\sum_{i=1}^{7} f(x_i)}_{8-1=7}\right) = 0.6157$

$j = 4$, $h_4 = \frac{\pi}{16}$, punkte $= 16 + 1 = 17$

$T_{40} = \frac{\pi}{16}\left(\frac{\cos(0^2) + \cos(\pi^2)}{2} + \underbrace{\sum_{i=1}^{15} f(x_i)}_{16-1=15}\right) = 0.5745$

Definition 7.3 [1]: summierte Simpsonregel

- Sei $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ stetig, $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ auf $[a, b]$ mit der konstanten Breite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i \cdot h$ für $i = 0, \ldots, n-1$ und $x_n = b$.
  Die **summierte Simpsonregel** $Sf(h)$ zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

ist gegeben durch

$$Sf(h) \equiv \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

Satz 7.2 [1]: Gauss Formeln für $n = 1, 2, 3$:

- **Die Gauss Formeln für $n = 1, 2, 3$ für $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$ lauten:**
  - $n = 1$: $G_1 f = (b-a) \cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)$
  - $n = 2$: $G_2 f = \frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$
  - $n = 3$: $G_3 f = \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(-\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + \frac{8}{9} \cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)\right]$

$$+ \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$$

Satz 7.3 [1]: Romberg-Extrapolation

- Für die summierte Trapezregel $Tf(h)$ zur näherungsweisen Berechnung von $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$ gilt:
  Sei $T_{j0} = Tf\left(\frac{b-a}{2^j}\right)$ für $j = 0, 1, \ldots, m$. Dann sind durch die Rekursion

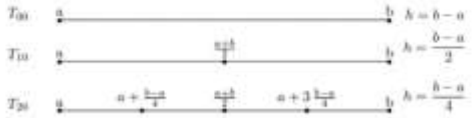
$$T_{jk} = \frac{4^k \cdot T_{j+1,k-1} - T_{j,k-1}}{4^k - 1}$$

für $k = 1, 2, \ldots, m$ und $j = 0, 1, \ldots, m-k$ Näherungen der Fehlerordnung $2k + 2$ gegeben. Diese Methode heisst **Romberg-Extrapolation**. Die verwendete Schrittweitenfolge $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ heisst auch Romberg-Folge.

$$\begin{aligned}
j = 0, h_0 = \frac{4-2}{2^0} = 2, n_0 = 2^0 = 1 \Rightarrow T_{00} &= h_0 \cdot \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{0} f(x_i)\right) \\
&= h_0 \cdot \frac{f(a) + f(b)}{2} \\
&= h_0 \cdot \frac{f(2) + f(4)}{2} \\
&= 2 \cdot \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}}{2} \\
&= 0.75
\end{aligned}$$

Romberg Extrapolation: Bemerkung

1. Bei der Berechnung der T_{j0} in der ersten Spalte kann man Auswertungen der zu integrierenden Funktion einsparen, wie im Folgenden erläutert:
   1. für T_{00} werden nur die Funktionsauswertungen $f(a)$ und $f(b)$ benötigt
   2. für T_{10} wird zusätzlich zu $f(a)$ und $f(b)$ noch $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ benötigt
   3. für T_{20} kommen zusätzlich zu $f(a)$, $f(b)$, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ noch $f\left(a + \frac{b-a}{4}\right)$ und $f\left(a + 3\frac{b-a}{4}\right)$
   4. etc.



Definition 8.1: Gewöhnliche Differentialgleichung n-ter Ordnung

- Eine Gleichung, in der Ableitungen einer unbekannten Funktion $y = y(x)$ bis zur n-ten Ordnung auftreten, heisst eine *gewöhnliche Differentialgleichung n-ter Ordnung*. Sie hat die explizite Form

$$y^{(n)}(x) = f\left(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(n-1)}(x)\right) \qquad (2)$$

Gesucht sind die Lösungen $y = y(x)$ dieser Gleichung, wobei die Lösungen y auf einem Intervall $[a, b]$ definiert sein sollen, $y : [a, b] \to \mathbb{R}$

$$j=1, h_1=\frac{4-2}{2^1}=1, n_1=2^1=2 \Rightarrow T_{10} = h_1\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{1} f(x_i)\right)$$
$$= h_1\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+f(x_1)\right)$$
$$= h_1\cdot\left(\frac{f(2)+f(4)}{2}+f(3)\right)$$
$$= 1\cdot\left(\frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{4}}{2}+\frac{1}{3}\right)$$
$$= 0.7083333...$$

Bis 2^3 rechnen

Lösung: Wir gehen also aus von

$$T_{i0} := Tf\left(\frac{4-2}{2^i}\right) = Tf\left(\frac{1}{2^{i-1}}\right),\ h_i = \frac{1}{2^{i-1}} \text{ für } i=0,1,2,3=n.$$

Mittels Romberg-Extrapolation erhalten wir das folgende Schema:

h	T_{i0}	T_{i1}	T_{i2}	T_{i3}
2	0.7500000000			
		0.6944444443		
1	0.7083333333		0.6931746033	
		0.6932539683		0.6931474775
0.5	0.6970238095		0.6931479013	
		0.6931545307		
0.25	0.6941218503			

Die zugehörigen Fehler $E_{ik} := |T_{ik} - I|$ sind:

h	E_{i0}	E_{i1}	E_{i2}	E_{i3}
2	0.0568528194			
		0.0012972637		
1	0.0151861527		0.0000274227	
		0.0001067877		0.0000002969
0.5	0.0038766289		0.0000007207	
		0.0000073501		
0.25	0.0009746697			

Aufgabe 4

a) (6 Punkte) Berechnen Sie das Integral

$f(4) = 6\cdot 4^2 - 2\cdot 4 = 88$
$f(2) = 6\cdot 2^2 - 2\cdot 2 = 20$
$f(0) = 6\cdot 0^2 - 2\cdot 0 = 0$

$$\int_0^4 (6x^2-2x)\,dx \Rightarrow \frac{6x^3}{3} - \frac{2x^2}{2} \Rightarrow 2x^3 - x^2 = 112$$

von Hand mit der summierten Trapezregel und entsprechender Romberg-Extrapolation für die Schrittweiten $h = 4, 2, 1$. $\Rightarrow T_{0,0}, T_{1,0}, T_{2,0}$

- Was fällt Ihnen auf?

b) (4 Punkte) Schreiben Sie ein Python-Script, welches Ihnen das obige Integral mit Hilfe der summierten Simpson-Regel berechnet. Verwenden Sie dabei nacheinander die Schrittweiten $h = 4$ und $h = 2$.

- Welche Eigenschaft der Simpson-Regel können Sie beobachten?
- Können Sie damit auch Ihre Beobachtung in Teilaufgabe a) begründen?

$T_{0,0}$, $h = 4$ (Schritte), $x = 0, 4$ (Grenzen)

$T_{0,0} = \frac{4}{2}\,(f(0)+f(4)) = 2\,(0+88) = 176$

$T_{1,0}$, $h = 2$, $x = 0, 2, 4$

$T_{1,0} = \frac{2}{2}\,(f(0)+f(4)+2f(2)) = 128$

$T_{2,0}$, $h = 1$, $x = 0, 1, 2, 3, 4$

$T_{2,0} = \frac{1}{2}\,(f(0)+f(4)+2(f(1)+f(2)+f(3))) = 116$

$T_{0,1} = \frac{4\cdot T_{1,0} - T_{0,0}}{4-1} = \frac{4\cdot 128 - 176}{3} = 112$

$T_{1,1} = \frac{4\cdot T_{2,0} - T_{1,0}}{3} = \frac{4\cdot 116 - 128}{3} = 112$

$T_{1,1} = \frac{4\cdot T_{2,0} - T_{1,0}}{3} = \frac{464 - 128}{3} = 112$

$T_{0,2} = \frac{4^2\cdot T_{1,1} - T_{0,1}}{4^2-1} = \frac{16\cdot 112 - 112}{15} = 112$

h	$T_{i,0}$	$T_{i,1}$	$T_{i,2}$
0	$T_{0,0}$	$T_{0,1}$	$T_{0,2}$
1	$T_{1,0}$	$T_{1,1}$	$T_{1,2}$
2	$T_{2,0}$	$T_{2,1}$	$T_{2,2}$

Definition 8.2: Anfangswertproblem

- Bei einem Anfangswertproblem (AWP) für eine Differentialgleichung n−ter Ordnung werden der Lösungsfunktion $y = y(x)$ noch n Werte vorgeschrieben, nämlich der Funktionswert an einer bestimmten Stelle x_0 sowie die Werte der ersten $n-1$ Ableitungen an der gleichen Stelle.
- Für die hier betrachteten Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung heisst das:
  - Differentialgleichung 1. Ordnung: Gesucht ist diejenige *spezifische* Lösungskurve $y = y(x)$, die durch den vorgegebenen Punkt $P = (x_0, y(x_0))$ verläuft. Gegeben ist beim AWP also die DGL 1. Ordnung $y'(x) = f(x, y(x))$ und der Anfangswert $y(x_0)$.
  - Differentialgleichung 2. Ordnung: Gesucht ist diejenige *spezifische* Lösungskurve $y = y(x)$, die durch den vorgegebenen Punkt $P = (x_0, y(x_0))$ verläuft und im Punkt x_0 die vorgegebene Steigung $y'(x_0) = m$ besitzt. Gegeben ist beim AWP also die DGL 2. Ordnung $y''(x) = f(x, y(x), y'(x))$ und die Anfangswerte $y(x_0)$ und $y'(x_0)$.

Richtungsfelder:

$y'(x) = f(x, y(x))$.

$$y'(x) = f(x, y(x)) = x^2 + 0.1\cdot y(x).$$

Wir erhalten das Richtungsfeld, indem wir für jeden Punkt in der (x, y)-Ebene die zugehörige Steigung einzeichnen.

- Zum Beispiel haben wir für den Punkt (-1, 1) die Steigung $y'(-1) = (-1)^2 + 0.1\cdot 1 = 1.1$, oder für den Punkt (0.5, 1) entsprechend $y'(0.5) = (0.5)^2 + 0.1\cdot 1 = 0.35$.
- Die Lösungskurven ergeben sich, wenn man von einem gegebenen Anfangspunkt den Richtungspfeilen folgt.
- Gezeigt sind die Lösungen für die Anfangswerte $y(-1.5) = 0$ und $y(0) = 0.5$:

Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} e^{-x^2}\,dx$$

mit der summierten Trapezformel und Extrapolation für die Schrittweiten $h_i = \frac{b-a}{2^i}$ $(i = 0, 1, 2, 3)$.

LSG ergänzen

Algorithmus: Mittelpunkt-Verfahren

- Gegeben sei für $x \in [a,b]$ das Anfangswerproblem

$$y' = f(x,y) \quad \text{mit } y(a) = y_0.$$

- Das Mittelpunkt-Verfahren zur numerischen Lösung lautet

$$\begin{aligned} x_{h/2} &= x_i + \frac{h}{2} \\ y_{h/2} &= y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i) \\ x_{i+1} &= x_i + h \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot f(x_{h/2}, y_{h/2}) \end{aligned}$$

wobei $x_0 = a$, $x_i = a + ih$ für $i = 0, \ldots, n-1$ ($n \in \mathbb{N}$) und $h = \frac{b-a}{n}$.

BSP:

Wir berechnen wie in Aufgabe 8.2 die numerische Lösung des Anfangswertproblems

$$y'(t) = f(t, y(t)) = t^2 + 0.1 \cdot y(t),$$

mit $y(-1.5) = 0$ auf dem Intervall $[a,b] = [-1.5, 1.5]$ und $n = 5$, diesmal aber mit dem Mittelpunkt-Verfahren.

$$\begin{aligned} n &= 5 \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = \frac{1.5-(-1.5)}{5} = 0.6 \\ t_i &= a + ih = -1.5 + i \cdot 0.6 \quad (i = 0, 1, \ldots, 5) \\ y_{i+1} &= y_i + hf(t_{h/2}, y_{h/2}) = y_i + h(t_{h/2}^2 + 0.1 y_{h/2}) \end{aligned}$$

i	t_i	y_i	$t_{h/2} = t_i + \frac{h}{2}$	$y_{h/2} = y_i + \frac{h}{2} \cdot (t_i^2 + 0.1 y_i)$	$t_{i+1} = t_i + h$	$y_{i+1} = y_i + h \cdot (t_{h/2}^2 + 0.1 y_{h/2})$
0	−1.5	0	−1.2	0.6750	−0.9	0.9045
1	−0.9	0.9045	−0.6	1.1746	−0.3	1.1910
2	−0.3	1.1910	0.0	1.2537	0.3	1.2662
3	0.3	1.2662	0.6	1.3312	0.9	1.5621
4	0.9	1.5621	1.2	1.8519	1.5	2.5372
5	1.5	2.5372	–	–	–	–

Algorithmus: Euler-Verfahren [1]:

- Gegeben sei für $x \in [a,b]$ das Anfangswerproblem

$$y' = f(x,y) \quad \text{mit } y(a) = y_0.$$

- Das Euler-Verfahren zur numerischen Lösung lautet

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + h \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \end{aligned}$$

wobei $x_0 = a$, $x_i = a + ih$ für $i = 0, \ldots, n-1$ ($n \in \mathbb{N}$) und $h = \frac{b-a}{n}$.

- Berechnen Sie mit dem Euler-Verfahren die numerische Lösung des Anfagswertproblems

$$y'(t) = f(t, y(t)) = t^2 + 0.1 \cdot y(t)$$

mit $y(-1.5) = 0$ auf dem Intervall $[a,b] = [-1.5, 1.5]$ und $n = 5$.

- Zeichnen Sie Ihre Lösung mit MATLAB in ein Koordinatensystem und vergleichen Sie mit der exakten Lösung

$$y(t) = -10t^2 - 200t - 2000 + 1722.5 \cdot e^{0.05(2t+3)}$$

$$\begin{aligned} n &= 5 \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = \frac{1.5-(-1.5)}{5} = 0.6 \\ t_i &= a + ih = -1.5 + i \cdot 0.6 \quad (i = 0, 1, \ldots, 5) \end{aligned}$$

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) = y_i + h(t_i^2 + 0.1 y_i)$$

$$\begin{aligned} y_0 &= y(t_0) = 0 \\ y_1 &= y_0 + h(t_0^2 + 0.1 y_0) = 0 + 0.6\left((-1.5)^2 + 0.1 \cdot 0\right) = 1.35 \\ y_2 &= y_1 + h(t_1^2 + 0.1 y_1) = 1.35 + 0.6\left((-0.9)^2 + 0.1 \cdot 1.35\right) = 1.917 \\ y_3 &= y_2 + h(t_2^2 + 0.1 y_2) = 1.917 + 0.6\left((-0.3)^2 + 0.1 \cdot 1.917\right) = 2.08602 \\ y_4 &= y_3 + h(t_3^2 + 0.1 y_3) = 2.08602 + 0.6\left((0.3)^2 + 0.1 \cdot 2.08602\right) = 2.2651812 \\ y_5 &= y_4 + h(t_4^2 + 0.1 y_4) = 2.2651812 + 0.6\left((0.9)^2 + 0.1 \cdot 2.2651812\right) = 2.887092072 \end{aligned}$$

Mittelpunkt Verfahren Bsp:

Gegeben ist das Anfangswertproblem

$$y'(x) = x^2 - y(x), \quad y(0) = y_0$$

a) (4 Punkte) Führen Sie von Hand einen Schritt des Mittelpunkt-Verfahrens durch. Verwenden Sie dabei die Schrittweite 1 und berechnen Sie y_1 in Abhängigkeit von y_0. Vereinfachen Sie den Term für y_1 soweit möglich.

$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i))$

$x_0 = 0$, $y_0 = y_0$, $h = 1$

$f(0, y_0) = 0^2 - y_0 = 0 - y_0$

$x_{h/2} = x_0 + \frac{1}{2} = 0 + \frac{1}{2} = 0.5$

$y_{h/2} = y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0, y_0) = y_0 + \frac{1}{2}(0 - y_0) = y_0 - \frac{y_0}{2} = \frac{y_0}{2}$

$x_{i+1} = x_i + h = 0 + 1 = 1$

$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_{h/2}, y_{h/2}) = y_0 + 1 \cdot (0.5^2 - \frac{y_0}{2}) = y_0 + 0.25 - \frac{y_0}{2}$

$= \frac{y_0}{2} + 0.25$

Algorithmus: Modifiziertes Euler-Verfahren für $y' = f(x,y)$ mit $y(a) = y_0$.

- **Führe das klassische Euler-Verfahren durch und speichere die erste Tangentensteigung in der Variable k_1:**

$$
\begin{aligned}
x_{i+1} &= x_i + h \\
y_{i+1}^{Euler} &= y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \\
k_1 &= f(x_i, y_i)
\end{aligned}
$$

- **Berechne die zweite Tangentensteigung am Punkt $(x_{i+1}, y_{i+1}^{Euler})$ und speichere sie in k_2:**

$$k_2 = f(x_{i+1}, y_{i+1}^{Euler})$$

- **Bilde den Durchschnitt der Steigungen $(k_1 + k_2)/2$ und mache einen Schritt h ausgehend vom ursprünglichen Punkt (x_i, y_i) zur Berechnung der Näherung (x_{i+1}, y_{i+1}):**

$$
\begin{aligned}
x_{i+1} &= x_i + h \\
y_{i+1} &= y_i + h \cdot \frac{(k_1 + k_2)}{2}
\end{aligned}
$$

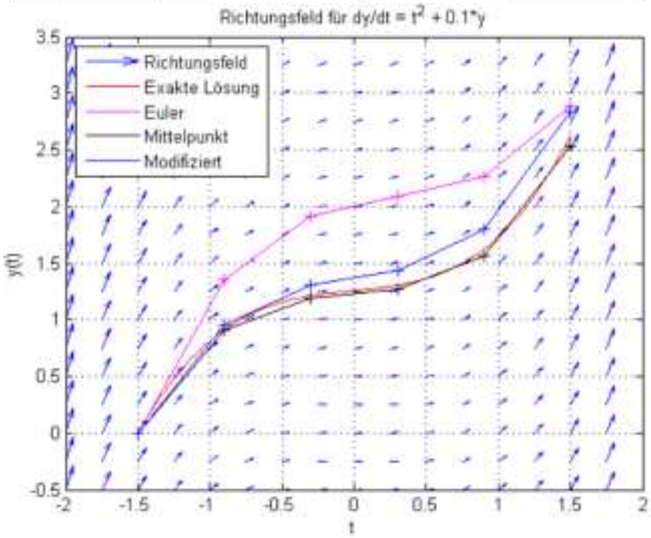
- **Wiederhole diese Schritte ausgehend von $x_0 = a$ für $x_i = a + ih$ mit $i = 0, \ldots, n-1$**

BSP:

$$
\begin{aligned}
n &= 5 \Rightarrow h = \frac{b-a}{n} = \frac{1.5-(-1.5)}{5} = 0.6 \\
t_i &= a + ih = -1.5 + i \cdot 0.6 \quad (i = 0, 1, \ldots, 5) \\
y_{i+1} &= y_i + h \cdot \frac{(k_1 + k_2)}{2}
\end{aligned}
$$

i	t_i	y_i	$k_1 = f(t_i, y_i)$	$y_{i+1}^{Euler} = y_i + h \cdot f(t_i, y_i)$	$t_{i+1} = t_i + h$	$k_2 = f(t_{i+1}, y_{i+1}^{Euler})$	$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{(k_1+k_2)}{2}$
0	−1.5	0	2.2500	1.3500	−0.9	0.9450	0.9585
1	−0.9	0.9585	0.9059	1.5020	−0.3	0.2402	1.3023
2	−0.3	1.3023	0.2202	1.4344	0.3	0.23345	1.4384
3	0.3	1.4384	0.2338	1.5787	0.9	0.9678	1.7989
4	0.9	1.7989	0.9899	2.3929	1.5	2.4893	2.8426
5	1.5	2.8426	-	-		-	

i	t	y_{exakt}	y_{euler}	$y_{\text{mittelpunkt}}$	$y_{\text{mod. euler}}$
0	−1.5	0	0	0	0
1	−0.9	0.9135	1.3500	0.9045	0.9585
2	−0.3	1.2133	1.9170	1.1910	1.3023
3	0.3	1.3069	2.0860	1.2662	1.4384
4	0.9	1.6267	2.2652	1.5621	1.7989
5	1.5	2.6318	2.8871	2.5372	2.8426



BSP:

Euler, Modifiziert, Mittelpunkt verfahren:

Aufgabe 2 (45 Minuten):

Betrachten Sie die folgende DGL

$$\boxed{\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{y}} \Rightarrow y(x) = \sqrt{\frac{2x^3}{3} + C}$$

auf dem Intervall $0 \le x \le 1.4$ mit $y(0) = 2$. Lösen Sie die DGL manuell mit

(a) dem Euler-Verfahren mit $h = 0.7$,

(b) dem Mittelpunkt-Verfahren mit $h = 0.7$,

(c) dem modifizierten Euler-Verfahren mit $h = 0.7$.

$\int dy \cdot y = \int x^2 \cdot dx \qquad y = \sqrt{\frac{2x^3}{3} + 2C_1 - C_2}$

$\frac{y^2}{2} + C_1 = \frac{x^3}{3} + C_2 \qquad 2 = \sqrt{\frac{2(0)^3}{3} + 2C_1 - C_2}$

$y^2 = \frac{2x^3}{3} + 2C_1 - C_2 \qquad 2 = \sqrt{C} \quad 4 = C$

Die exakte Lösung der DGL ist $y(x) = \sqrt{\frac{2x^3}{3} + 4}$. Berechnen Sie für (a) - (c) jeweils den absoluten Fehler $|y(x_i) - y_i|$ für jedes x_i.

$y(x) = \sqrt{\frac{2x^3}{3} + 4}$

$y(0.7) = 2.056 \quad , \quad y(1.4) = 2.474$

a) $x_0 = 0, \; y_0 = 2$

$\boxed{\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + h \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \end{aligned}} \quad \boxed{f(x,y) = \frac{x^2}{y}}$

1) $f(0,2) = \frac{0^2}{2} = 0$

$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 2 + 0.7 \cdot 0$

2) $x_1 = 0.7$

$f(0.7, 2) = 0.245$

$y_2 = 2 + 0.7 \cdot 0.245 = 2.1715$

Vgl. mit exakt. Lsg

$|y(0.7) - y_1| = |2.056 - 2| = 0.056$

$|y(1.4) - y_2| = |2.474 - 2.1715| = 0.2425$

b) $y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i))$

$x_0 = 0, \; y_0 = 2$

1) $f_0 = \frac{0^2}{2} = 0$

$x_i = 0 + 0.35 = 0.35$

$y_i = 2 + 0.35 \cdot 0 = 2$

$f_i = \frac{0.35^2}{2} = 0.06125$

$y_1 = 2 + 0.7 \cdot 0.06125 = 2.042875$

2) $f_1 = \frac{0.7^2}{2.042875} = 0.2399$

$x_i = 0.7 + 0.35 = 1.05$

$y_i = 2.042875 + 0.35 \cdot 0.2399 = 2.1768$

$f_i = \frac{1.05^2}{2.1768} = 0.5064$

$y_2 = 2.042875 + 0.7 \cdot 0.5064 = 2.40675$

Vgl. mit LSG $= |2.056 - 2.042875| = 0.0131$

$|2.474 - 2.40675| = 0.06725$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + h \cdot f(x_n, y_n))\right]$$

- Schritt 1:
  $f_0 = \frac{0^2}{2} = 0$
  $y^* = 2 + 0.7 \cdot 0 = 2$
  $f^* = \frac{0.7^2}{2} = 0.245$
  $y_1 = 2 + \frac{0.7}{2}(0 + 0.245) = 2.08575$
- Schritt 2:
  $f_1 = \frac{0.7^2}{2.08575} = \frac{0.49}{2.08575} \approx 0.2349$
  $y^* = 2.08575 + 0.7 \cdot 0.2349 = 2.25018$
  $f^* = \frac{1.4^2}{2.25018} = \frac{1.96}{2.25018} \approx 0.871$
  $y_2 = 2.08575 + \frac{0.7}{2}(0.2349 + 0.871) = 2.08575 + 0.7 \cdot 0.55295 = 2.47281$

Vergleich:

- $|2.056 - 2.08575| = 0.02975$
- $|2.414 - 2.47281| = 0.05881$

Definition 8.3 [1]: lokaler Fehler / Konsistenzordnung

- Sei $y'(x) = f(x, y(x))$ eine Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $y(x_i) = y_i$ und der exakten Lösung $y(x)$. Sei y_{i+1} der mit einem numerischen Näherungsverfahren mit der Schrittweite h berechnete Näherungswert für $y(x_{i+1})$, wobei $x_{i+1} = x_i + h$. Dann ist der ***lokale Fehler*** (also nach einer Iteration) definiert als die Differenz zwischen dem exakten Wert und der Näherung:

$$\varphi(x_i, h) := y(x_{i+1}) - y_{i+1}$$

- Ein numerisches Verfahren hat die ***Konsistenzordnung p*** falls gilt:

$$|\varphi(x_i, h)| \le C \cdot h^{p+1}$$

für genügend kleine h und einer Konstante $C > 0$, die von der Differentialgleichung abhängt.

- Tragen Sie für die DGL

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{1}{2} \cdot y \cdot t^2$$

die Steigung $\frac{dy}{dt}$ für die Punkte $(t_i, y_j) = (i, j)$ für $i, j = 0, 1, 2, 3$ in die untenstehende Tabelle ein und zeichnen Sie damit von Hand das entsprechende Richtungsfeld in untentstehendes Koordinatensystem.
- Zeichnen Sie anschliessend die (ungefähre) Lösungskurve für den Anfangswert $y(0) = 3$ ein.

Zeile $y_0 = 0$

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{1}{2} \cdot 0 \cdot t^2 = 0 \quad \text{(für alle } t\text{)}$$

→ Alle Werte: 0

Zeile $y_1 = 1$

$$t = 0 = -\frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 0^2 = 0$$
$$t = 1 = -\frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 1^2 = -0.5$$
$$t = 2 = -\frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 4 = -2$$
$$t = 3 = -\frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 9 = -4.5$$

Zeile $y_2 = 2$

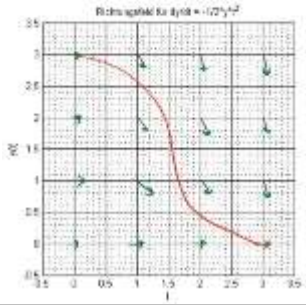
$$t = 0 = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 0^2 = 0$$
$$t = 1 = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 1^2 = -1$$
$$t = 2 = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 4 = -4$$
$$t = 3 = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 9 = -9$$

Zeile $y_3 = 3$

$$t = 0 = -\frac{1}{2} \cdot 3 \cdot 0^2 = 0$$
$$t = 1 = -\frac{1}{2} \cdot 3 \cdot 1^2 = -1.5$$
$$t = 2 = -\frac{1}{2} \cdot 3 \cdot 4 = -6$$
$$t = 3 = -\frac{1}{2} \cdot 3 \cdot 9 = -13.5$$

Ausgefüllte Tabelle (manuell):

$\frac{dy}{dt}$	$t_0 = 0$	$t_1 = 1$	$t_2 = 2$	$t_3 = 3$
$y_0 = 0$	0	0	0	0
$y_1 = 1$	0	-0.5	-2	-4.5
$y_2 = 2$	0	-1	-4	-9
$y_3 = 3$	0	-1.5	-6	-13.5



Algorithmus: klassisches vierstufiges Runge-Kutta Verfahren [1]

- **Gegeben sei für $x \in [a, b]$ das Anfangswertproblem**

$$y' = f(x, y) \quad \text{mit } y(a) = y_0.$$

- **Das klassische Runge-Kutta zur numerischen Lösung lautet**

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1) \\ k_3 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_2) \\ k_4 &= f(x_i + h, y_i + h k_3) \\ x_{i+1} &= x_i + h \\ y_{i+1} &= y_i + h \cdot \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned}$$

wobei $x_0 = a$, $x_i = a + ih$ für $i = 0, ..., n-1$ $(n \in \mathbb{N})$ und $h = \frac{b-a}{n}$.

$$y'(t) = f(t, y(t)) = t^2 + 0.1 \cdot y(t),$$

mit $y(-1.5) = 0$ auf dem Intervall $[a, b] = [-1.5, 1.5]$ und $n = 5$, diesmal aber mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren.

Klassisches Runge-Kutta Verfahren:

i	t_i	y_{exakt}	y_i	k_1	k_2	k_3	k_4	y_{i+1}
0	−1.5	0	0	2.2500	1.5075	1.485	0.8991	0.9135
1	−0.9	0.9135	0.9135	0.9013	0.4784	0.4657	0.2093	1.2133
2	−0.3	1.2133	1.2133	0.2113	0.1277	0.1252	0.2188	1.3069
3	0.3	1.3069	1.3069	0.2207	0.4973	0.5056	0.9710	1.6267
4	0.9	1.6267	1.6267	0.9727	1.6318	0.1651	2.512	2.6318
5	1.5	2.6318	2.6318	–	–		–	–

Der Vergleich mit den Werten der exakten Lösung y_{exakt} aus Bsp. 8.5 zeigt bei dieser Genauigkeit keinen Unterschied mehr.

Definition 8.4 [1]: globaler Fehler / Konvergenzordnung

- Sei $y'(x) = f(x, y(x))$ eine Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $y(x_0) = y_0$ und der exakten Lösung $y(x)$. Sei y_n der mit einem numerischen Näherungsverfahren mit der Schrittweite h berechnete Näherungswert für $y(x_n)$, wobei $x_n = x_0 + nh$. Dann ist der Gesamtfehler (also nach n Iterationen) bzw. der ***globale Fehler*** definiert als die Differenz zwischen dem exakten Wert und der Näherung:

$$y(x_n) - y_n$$

- Ein numerisches Verfahren hat die ***Konvergenzordnung p*** falls gilt:

$$| y(x_n) - y_n | \leq C \cdot h^p$$

für genügend kleine h und einer Konstante $C > 0$, die von der Differenzialgleichung abhängt.

DLG ind 1 Ordnung bringen

Führen Sie die folgenden linearen Differentialgleichung auf ein System erster Ordnung zurück:

$y^{(4)} + 1.1y''' - 0.1y'' - 0.3y = \sin x + 5$ mit
$y(0) = y''(0) = y'''(0) = 0$ und $y'(0) = 2$
$x^2 y'' + xy' + (x^2 - n^2)y = 0$ mit $y(1) = y'(1) = 2$

$$y^{(4)} = -1.1y''' + 0.1y'' - 0.3y + \sin(x) + 5$$

$$z_1 = y \quad z_2 = y' \quad z_3 = y'' \quad z_4 = y'''$$

$$\vec{z}' = \begin{pmatrix} z_1' \\ z_2' \\ z_3' \\ z_4' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \\ y''' \\ y^{(4)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ -1.1y''' + 0.1y'' + 0.3y + \sin(x) + 5 \end{pmatrix} = f(x, \vec{z})$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0.3 & 0 & 0.1 & -1.1 \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sin(x) + 5 \end{pmatrix} \quad \vec{z}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 2, \quad y''(0) = 0, \quad y'''(0) = 0$$

$$\vec{z}(0) = \begin{pmatrix} z_1(0) \\ z_2(0) \\ z_3(0) \\ z_4(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0) \\ y'(0) \\ y''(0) \\ y'''(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Definition 8.5 [1]: Allgemeines s−stufiges Runge-Kutta Verfahren

- Ein allgemeines (explizites) s−stufiges Runge-Kutta Verfahren ist gegeben durch die Formeln

$$\begin{aligned} k_n &= f\left(x_i + c_n h, y_i + h \sum_{m=1}^{n-1} a_{nm} k_m\right) \quad \text{für } n = 1, ..., s \\ y_{i+1} &= y_i + h \sum_{n=1}^{s} b_n k_n \end{aligned}$$

- Hierbei ist $s \in \mathbb{N}$ die Stufenzahl und a_{nm}, b_n, c_n sind Konstanten. Die Konsistenz- und Konvergenzordnung hängt von der Wahl dieser Konstanten ab.

3-Stufen Runge-Kutta-Verfahren:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(t_n, y_n) \\
k_2 &= f\left(t_n + \tfrac{1}{3}h, y_n + \tfrac{1}{3}hk_1\right) \\
k_3 &= f\left(t_n + \tfrac{2}{3}h, y_n + \tfrac{2}{3}hk_2\right) \\
y_{n+1} &= y_n + h\left(\tfrac{1}{4}k_1 + \tfrac{3}{4}k_3\right)
\end{aligned}
$$

$t = 2$

$$y' = \frac{t}{y}, \quad y(2) = 1$$

ist numerisch zu berechnen unter Verwendung des dreistufigen Runge-Kutta-Verfahrens mit dem Butcher-Tableau

$$
\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
1/3 & 1/3 & & \\
2/3 & 0 & 2/3 & \\
\hline
 & 1/4 & 0 & 3/4
\end{array}
$$

$t = 5$

a) (3P) Berechnen Sie von Hand $y(5)$ unter Verwendung der Schrittweite $h = 3$. Geben Sie alle Rechenausdrücke und Zwischenergebnisse an.

$t_0 = 2, \; y_0 = 1, \; h = 3$

$k_1 = f(t_n, y_n) \Rightarrow f(2, 1) = \frac{2}{1} = 2$

$k_2 = f\left(t_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{3}hk_1\right), \; t_n = 2 + \frac{1}{3} \cdot 3 = 3, \; y_n = 1 + \frac{1}{3} \cdot 3 \cdot 2 = 3$

$k_2 = f(3, 3) = \frac{3}{3} = 1$

$k_3 = f\left(t_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}hk_2\right), \; t_n = 2 + \frac{2}{3} \cdot 3 = 4, \; y_n = 1 + \frac{2}{3} \cdot 3 \cdot 1 = 3$

$k_3 = f(4, 3) = \frac{4}{3}$

$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_3\right)$

$y_1 = y_0 + h\left(\frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{4}k_3\right)$

$y_1 = 1 + 3\left(\frac{1}{4} \cdot 2 + \frac{3}{4} \cdot \frac{4}{3}\right) = 5.5 \Rightarrow \underline{\underline{y(5) = 5.5}}$

Verfahren (Runge-Kutta 1-4):

- Euler-Verfahren, $s = 1$:

$$
\begin{array}{c|c}
0 & \\
\hline
 & 1
\end{array}
$$

- Mittelpunkt-Verfahren, $s = 2$:

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
0.5 & 0.5 & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
$$

- Modifiziertes Euler-Verfahren, $s = 2$:

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1 & 1 & \\
\hline
 & 0.5 & 0.5
\end{array}
$$

- klass. Runge-Kutta Verfahren, $s = 4$:

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
0.5 & 0.5 & & & \\
0.5 & 0 & 0.5 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$