

Nichtlineare Gleichungssysteme

Funktionen mit mehreren Variablen

auch multivariat genannt, hier nur skalarwertige Funktionen (keine Komplexen Zahlen).
Definition:

Explizite Darstellung Funktionsgleichung ist nach einer variablen aufgelöst.

$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$

Implizite Darstellung nicht nach einer Variablen aufgelöst(nur n-1 unabhängige Variablen)

$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$

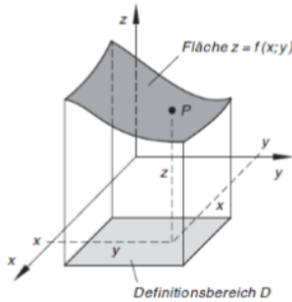
für vektorwertige funktionen

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

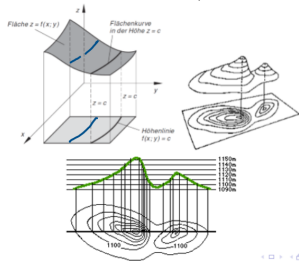
Graphische Darstellungsformen

Funktionen mit 2 Variablen können 3D dargestellt werden.
Interpretieren als $z = f(x, y)$

Fläche Punkte $(x, y, f(x, y))$

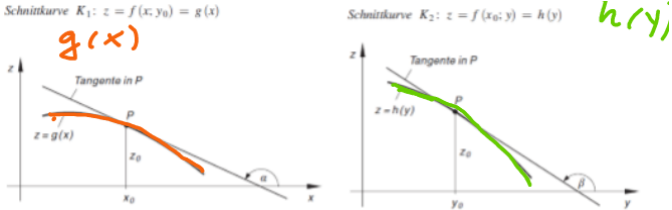
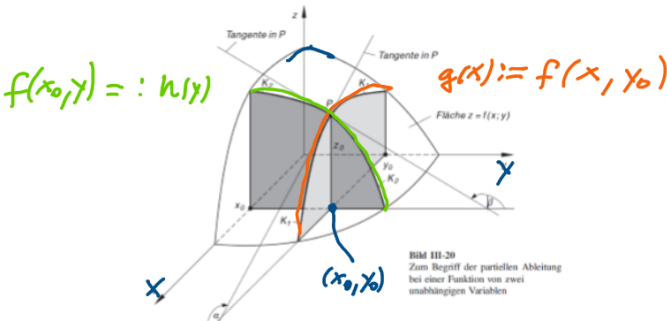


Schnittkurve bei konstanter Höhe z, auch Höhen-/Contour-Plot



Partielle Ableitungen

Nur eine der Variablen wird abgeleitet, der Rest als Konstante behandelt. Visuell entspricht dies der Steigung an einer Flächentangente.



Partielle Ableitungen 1. Ordnung

Beispiel nach x abgeleitet(normale Ableitungsregeln, andere Variablen als Konstanten betrachten):

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

$f(x, y) = 3xy^3 + 10x^2y + 5y + 3y * \sin(5xy)$

$\frac{\partial f}{\partial x} = 3 * 1 * y^3 + 10 * 2x + 0 + 3y * \cos(5xy) * 5 * 1 * y$

Linearisierung

Repetition Tangentengleichung

Dient als Annäherung für eindimensionale $f(x)$ in der Nähe von x_0 (Linearisierung):
 $g(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$

Jacobi-Matrix

Sozusagen wie Tangentengleichung aber für mehrere Variablen

$$\vec{y} = \vec{f}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ y_m = f_m(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

Die Jacobi-Matrix enthält sämtliche Partielle Ableitungen 1. Ordnung von \vec{f} .
Auf jeder Spalte bleibt die funktion f_j die gleiche und in den Zeilen $x_i \rightarrow \frac{\partial f_j}{\partial x_i}$

$$D\vec{f}(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(x) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

verallgemeinerte Tangentengleichung

$$\vec{g}(\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}^{(0)}) + D\vec{f}(\vec{x}^{(0)}) * (\vec{x} - \vec{x}^{(0)})$$

ist eine lineare Funktion und für \vec{x} in der Umgebung von $\vec{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ gilt $\vec{f}(\vec{x}) \approx \vec{g}(\vec{x})$

Df entspricht der obigen Funktion zur Erzeugung einer Jacobi-Matrix.

Hochgestellte Zahlen in Klammern $(x^{(n)})$ stehen wie zuvor für eine Variable nach n Iterationsschritten.

Tangentialebene

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

$$Df(\mathbf{x}^{(0)}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) \quad \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) \right).$$

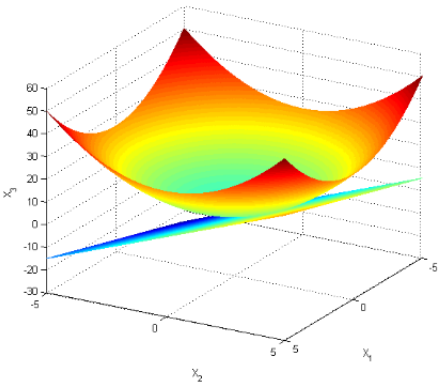
Dann liefert die Linearisierung

$$\begin{aligned} g(x_1, x_2) &= f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) & \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 - x_1^{(0)} \\ x_2 - x_2^{(0)} \end{pmatrix} \\ &= f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) \cdot (x_1 - x_1^{(0)}) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}_1^{(0)}, \mathbf{x}_2^{(0)}) \cdot (x_2 - x_2^{(0)}) \end{aligned}$$

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.

Graphische Darstellung der Fläche $x_3 = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ sowie Tangentialebene durch den Flächenpunkt $(x_1^{(0)} = 1, x_2^{(0)} = 2, f(x^{(0)}) = 5)$



Nullstellenbestimmung für nichtlineare Systeme

- Gegeben: $n \in \mathbb{N}$ und eine Funktion $\vec{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
- Gesucht: $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $\vec{f}(\vec{x}) = 0$

$$\vec{f}(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix} = \vec{0}$$

Newton-Verfahren für Systeme

Herleitung

Repetition 1-Dimensional: (nur für $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$)

Aus der Linearisierung der Funktion f mittels der Tangente g an der Stelle x_n

$$f(x) \approx g(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

folgte die Iteration

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots).$$

Mit der Jacobi-Matrix $Df(x)$ kann das analog für Vektor-wertige Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ angewendet werden.

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} - (Df(\vec{x}^{(n)}))^{-1} * \vec{f}(\vec{x}^{(n)})$$

Das Inverse der Jacobi-Matrix wird aber nie berechnet sondern die obige Gleichung via Substitution als lineares Gleichungssystem aufgefasst.

$$\delta^{(n)} := - \left(Df(\mathbf{x}^{(n)}) \right)^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)})$$

als lineares Gleichungssystem auffasst gemäss

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

und so δ^n bestimmen und anschliessend

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

Quadratisch-konvergentes Newton-Verfahren für Systeme

Gesucht: Nullstellen von $\vec{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit Startvektor $\vec{x}^{(0)}$ Nahe der Nullstelle.
es kann passieren, dass das Newton-Verfahren Statt einer Nullstelle ein lokales Minimum $x_{min}! = 0$ findet, in diesem Fall ist $Df(x_{min})$ aber immer nicht regulär.

für $n = 0, 1, \dots$:

1. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungsystems

$$D\vec{f}(\vec{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\vec{f}(\vec{x}^{(n)})$$

2. Setze

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

mögliche Abbruchkriterien

- $n \geq n_{max}, n_{max} \in \mathbb{N}$
- $||x^{(n+1)} - x^{(n)}|| \leq \epsilon \iff ||\delta^{(n)}|| \leq \epsilon$
- $||x^{(n+1)} - x^{(n)}|| \leq \epsilon * ||x^{(n+1)}||$
- $||\vec{f}(x^{(n+1)})|| \leq \epsilon$

Konvergenz

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

Vereinfachtes Newton-Verfahren für Systeme

Gesucht: Nullstellen von $\vec{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit Startvektor $\vec{x}^{(0)}$ Nahe der Nullstelle.

Der Unterschied zum Quadratisch-konvergenten Newton-Verfahren liegt darin, dass nur einmal die Jacobi-Matrix für den Startvektor berechnet werden muss (rot) \rightarrow weniger Aufwand aber konvergiert langsamer (linear).

für $n = 0, 1, \dots$:

1. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungsystems

$$D\vec{f}(\vec{x}^{(0)})\delta^{(n)} = -\vec{f}(\vec{x}^{(n)})$$

2. Setze

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

Gedämpftes Newton-Verfahren

Die Idee ist bei jedem Iterationsschritt zu überprüfen ob es sich um eine Verbesserung handelt und falls nicht, es stattdessen mit einem gedämpften Schritt zu versuchen.

Die gewählte Dämpfungsgrösse k_{max} ist stark vom Problem abhängig. $k_{max} = 4$ ist ein vernünftiger Standard Wert.

für $n = 0, 1, \dots$:

1. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$D\vec{f}(\vec{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\vec{f}(\vec{x}^{(n)})$$

2. Finde das minimale $k \in 0, 1, \dots, k_{max}$ mit

$$\|\vec{f}(\vec{x}^{(n)}) + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}\|_2 < \|\vec{f}(\vec{x}^{(n)})\|_2$$

3. Setze (falls kein minimales $k \rightarrow k = 0$)

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}$$

Ausgleichsrechnung / Interpolation

Zur Auswertung Datenpunkte mit Streuung durch eine Funktion annähern.

Interpolation eine Funktion die exakt durch die Messpunkte geht. Geeignet falls:

- wenig Datenpunkte
- (fast) keine Messfehler

Ausgleichsrechnung eine Funktion die summiert die kleinste Abweichung von den Messpunkten hat. Zwischen den Messpunkten oftmals stabiler als Interpolation

- typischerweise viele Datenpunkte
- fehlerbehaftet

Interpolation

- Gegeben: $n + 1$ Wertepaare (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n$ mit $x_i \neq x_j \mid i \neq j$
- Gesucht: stetige Funktion $g(x)$ mit $g(x_i) = y_i \forall i = 0, 1, \dots, n$
(was zwischen diesen Punkten für Resultate herauskommen kann stark variieren)

Polynominterpolation

Zu den $n + 1$ Stützpunkten ist ein Polynom $P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ vom Grad n gesucht.

Weil das Polynom vom Grad n ist lässt sich zusammen mit den Stützpunkten ein lineares Gleichungssystem dazu aufstellen.

$$\begin{matrix} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n & = & y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n & = & y_1 \\ & \vdots & \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n & = & y_n \end{matrix}$$

bzw.

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

Lagrange Interpolationsformel

Durch $n + 1$ Stützpunkte mit verschiedenen Stützstellen gibt es genau EIN Polynom $P_n(x)$ vom Grade $\leq n$ welches alle Stützpunkte interpoliert.

Lagrangeform für $P_n(x)$:

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

Die Lagrangepolynome vom Grad n ($l_i(x)$) sind definiert durch:

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Beispiel:

t	08.00	10.00	12.00	14.00	Uhr
T	11.2	13.4	15.3	19.5	°C
	y_0	y_1	y_2	y_3	

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

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

Fehlerabschätzung

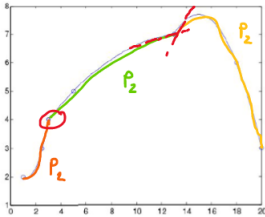
Rein theoretisch weil man die tatsächliche Funktion f kennen müsste.
Gegeben $y_i = f(x_i)$ und f genügend oft stetig differenzierbar:

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{|(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)|}{(n+1)!} * \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} |f^{(n+1)}(\xi)|$$

Spline-Interpolation

Kontext (hoffentlich nicht Prüfungsrelevant)

Die Annäherung durch ein einziges Polynom ist zwischen den Messpunkten oft hoch instabil. Als Alternative kann stattdessen stückweise interpoliert werden.



- hier stören die Knicke(Ableitung verschieden von beiden Seiten) an den Übergängen
- die Spline-Interpolation versucht durch Polynome niederen Grades zu interpolieren und damit Schwingungen unterdrücken → keine Knicke
- Polynome müssen dazu an den Messpunkten nicht nur selben Funktionswert sondern auch selbe Ableitung haben (1. und 2. Ableitung).

Man kann so für jedes Intervall $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ genau ein Polynom s_i ansetzen (i Bezeichnet die Nummer des Intervalls).

Dieses Polynom muss folgende Bedingungen erfüllen:

Interpolation $s_i(x_i) = y_i$, $s_{i+1}(x_{i+1}) = y_{i+1}$

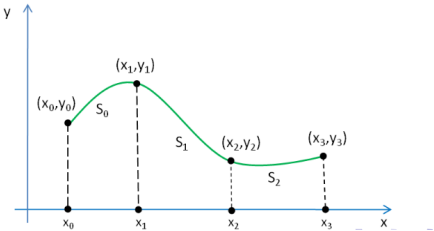
stetiger Übergang $s_i(x_{i+1}) = s_{i+1}(x_{i+1})$, $s_{i+1}(x_{i+2}) = s_{i+2}(x_{i+2})$

keine Knicke $s'_i(x_{i+1}) = s'_{i+1}(x_{i+1})$, $s'_{i+1}(x_{i+2}) = s'_{i+2}(x_{i+2})$
gleiche Krümmung $s''_i(x_{i+1}) = s''_{i+1}(x_{i+1})$, $s''_{i+1}(x_{i+2}) = s''_{i+2}(x_{i+2})$

Zusatzbedingungen Damit es genug Gleichungen für ein reguläres System sind müssen noch Zusatzbedingungen gesetzt werden, diese unterscheiden sich je nach Art des gewählten Splines

Beispiel (6.5 in Folien):

Gegeben sind die vier Stützpunkte (x_i, y_i) für $i = 0, \dots, 3$. 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 .



Mit dem Ansatz

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

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:

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

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:

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

natürliche kubische Splinefunktion

Gegeben $n + 1$ Stützpunkte (x_i, y_i) mit monoton aufsteigenden Stützstellen $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ | und $n \geq 2$

Gesucht natürliche kubische Splinefunktion $S(x)$, in jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, n - 1$ definiert durch das Polynom

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

Als Gleichungssystem $Ac = z$ (nur für c_i , entspricht 4. aus Algorithmus)

$$A = \begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \\ & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & h_{n-3} & 2(h_{n-3} + h_{n-2}) & h_{n-2} \\ & & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{pmatrix}$$
$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} 3 \frac{y_2 - y_1}{h_1} - 3 \frac{y_1 - y_0}{h_0} \\ 3 \frac{y_3 - y_2}{h_2} - 3 \frac{y_2 - y_1}{h_1} \\ \vdots \\ 3 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - 3 \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} \end{pmatrix}$$

Beispiel als Tabelle für manuelle Berechnung:

i	0	1	2	3
x_i	0	1	2	3
y_i	2	1	2	2
a_i	2	1	2	-
h_i	1	1	1	-
c_i	0	?	?	0

Kompletter Algorithmus

Die Koeffizienten a_i, b_i, c_i und d_i der Polynome $S_i(x)$ für $i = 0, 1, \dots, n - 1$ berechnen sich wie folgt:

- 1 $a_i = y_i$
- 2 $h_i = x_{i+1} - x_i$
- 3 $c_0 = 0, c_n = 0$
- 4 Berechnung der Koeffizienten c_1, c_2, \dots, c_{n-1} aus dem Gleichungssystem
 - 1 $i = 1$:
$$2(h_0 + h_1)c_1 + h_1c_2 = 3 \frac{y_2 - y_1}{h_1} - 3 \frac{y_1 - y_0}{h_0}$$
 - 2 falls $n \geq 4$ gilt für $i = 2, \dots, n - 2$:
$$h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_ic_{i+1} = 3 \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - 3 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}$$
 - 3 $i = n - 1$:
$$h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})c_{n-1} = 3 \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - 3 \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}}$$
- 5 $b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} + 2c_i)$
- 6 $d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)$

Ausgleichsrechnung

Unterschied zur Interpolation: Funktion soll nicht exakt durch alle Messpunkte gehen sondern möglichst gut approximieren \rightarrow stabileres Verhalten abseits der Messpunkte. Besonders sinnvoll bei vielen Daten (meist zusätzlich fehlerbehaftet)

Ausgleichsproblem

Gegeben Wertepaare (x_i, y_i) $i = 1, \dots, n$ mit $x_i \neq x_j$ | $i \neq j$

Gesucht stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die bestmöglich Annähert. Heisst $f(x_i) \approx y_i$

Ansatzfunktionen/Ausgleichsfunktion/Fehlerfunktional/ kleinste Fehlerquadrate

Gegeben:

- Menge F von stetigen **Ansatzfunktionen** f
- n Wertepaare (x_i, y_i)

Eine Funktion $f \in F$ heisst **Ausgleichsfunktion** von F zu den Wertepaaren, falls das **Fehlerfunktional** E minimal wird.

Das f mit dem minimum nennt man optimal im Sinne der **kleinsten Fehlerquadrate**

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

lineare Ausgleichsrechnung

Gesuchte Funktion f ist Linearkombination vom m Basisfunktionen f_i , $i = 1, 2, \dots, m$ | $m \leq n$ und den gesuchten Parametern λ_i

Wenn $m \leq n$ ist das Gleichungssystem überbestimmt und es existiert keine Lösung $E(f) = 0$, ist $m = n$ gibt es diese Lösung jedoch und wir sind wieder beim Spezialfall der Interpolation

$$f(x) = \lambda_1 f_1(x) + \dots + \lambda_m f_m(x)$$

Lineares Ausgleichsproblem

- 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 Ausgleichsproblem** vor mit dem Fehlerfunktional

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

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

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

Normalengleichung

Um das Fehlerfunktional zu minimieren müssen alle partiellen Ableitungen von $E(f)$ verschwinden, also $\frac{\partial E(f)}{\partial \lambda_j} = 0$

- Die Gleichungen

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

heissen **Normalgleichungen** des linearen Ausgleichsproblems.

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

$$A^T A \lambda = A^T y$$

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

Weil $A^T A$ aber oft **schlecht konditioniert** ist wird A mittels **QR-Verfahren** zerlegt

$$A^T A \lambda = A^T y \rightarrow A = QR \rightarrow R\lambda = Q^T y$$

nichtlineare Ausgleichsrechnung

Parameter λ treten verweben in der Funktion f auf

$$f = f(\lambda_1, \dots, \lambda_m, x)$$

nichtlineare Ausgleichsprobleme

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

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

$$= \|y - f(\lambda)\|_2^2$$

minimal wird unter allen zulässigen Parameterbelegungen.

- Dabei ist

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

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

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

Quadratmittelpunktproblem

Gegeben Funktion $\tilde{g}: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ und zugehöriges Fehlerfunktional $E: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R} = \|\tilde{g}(x)\|_2^2$. Das Problem $\tilde{x} \in \mathbb{R}^m$ zu finden für den $E(x)$ minimal wird heisst Quadratmittelpunktproblem.

nichtlineare Ausgleichsprobleme sind Quadratmittelpunktprobleme mit $\tilde{g}(x) = \tilde{g}(\lambda)$. Als Fehlerfunktional dient die Differenz zwischen dem tatsächlichen Wert und dem Wert der Funktion \tilde{f} .

$$\tilde{g}(\vec{\lambda}) = \vec{y} - \vec{f}(\vec{\lambda}), \vec{y} \in \mathbb{R}^n, \vec{\lambda} \in \mathbb{R}^m$$

Gauss-Newton-Verfahren

- Kombination aus linearer Ausgleichsrechnung und Newton-Verfahren
- In $\|\tilde{g}(\lambda)\|_2^2$ wird $\tilde{g}(\lambda)$ ersetzt durch folgende Linearkombination

$$\tilde{g}(\lambda) \approx \tilde{g}(\lambda^{(0)}) + D\tilde{g}(\lambda^{(0)}) * (\lambda - \lambda^{(0)})$$

- $Dg(\dots)$ entspricht hierbei der Jacobi-Matrix von \tilde{g}
- Durch folgende Substitutionen haben wir die Form einer linearen Ausgleichsrechnung $E(\lambda) = \|y - A\delta\|_2^2$
 $y = \tilde{g}(\lambda^{(0)})$
 $A = -D\tilde{g}(\lambda^{(0)})$
 $\delta = \lambda - \lambda^{(0)}$

mögliches Abbruchkriterium: $\|\delta^{(k)}\|_2 < TOL$

- Startvektor $\vec{\lambda}^{(0)}$ in der Nähe des Minimums des Fehlerfunktionals E der Ausgleichsfunktion $f(\lambda)$
- berechne Funktion $g(\lambda) = y - f(\lambda)$
- und zugehörige Jacobi-Matrix $Dg(\lambda)$
- Für $k = 0, 1, \dots$
 - $\delta^{(k)}$ aus linearen Ausgleichsproblems (Substitutionen von vorherigem Abschnitt)

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

d.h. konkret wieder wie linear **ACHTUNG Unterschied resultat ist hierbei aber nur $\delta^{(k)}$ NICHT direkt λ wie bei linear. Das resultierende $\lambda^{(k+1)}$ wird im Schritt c) berechnet**

$$A^T A \delta^{(k)} = A^T y$$

- stabilere Berechnung durch Verwendung von QR:

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

- auflösen nach $\delta^{(k)}$

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

- erhalte λ für nächsten Iterationsschritt

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

gedämpftes Gauss-Newton-Verfahren

Konvergiert in der Regel für einen grösseren Bereich an Startvektoren, immer noch keine Garantie für Konvergenz.

Mögliches Abbruchkriterium (keine Garantie für richtige Lösung)

$$\left\| \frac{\delta^{(k)}}{2^P} \right\|_2 < TOL$$

Im regulären Gauss-Newton-Verfahren kommt unter b) noch ein zusätzlicher Dritter schritt.

- iii. Finde minimales $p \in [0, p_m ax]$ mit: (sonst $p = 0$)

$$\|g(\lambda^{(k)} + \frac{\delta^{(k)}}{2^P})\|_2^2 < \|g(\lambda^{(k)})\|_2^2$$

- Berechnung von $\lambda^{(k+1)}$ wird auch dementsprechend angepasst

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

Beispiel 6.10 (bis zum ersten Iterationsschritt)

Wir wollen also eine Ansatzfunktion $f(x) = ae^{bx}$ bestmöglich im Sinn der kleinsten Fehlerquadrate an die gegebenen Daten anpassen und vergleichen die Resultate des ungedämpften und des gedämpften Gauss-Newton-Verfahrens, einmal für den Startvektor $\lambda^{(0)} = (a^{(0)}, b^{(0)})^T = (1, -1.5)^T$ und dann nochmals für den Startvektor $\lambda^{(0)} = (a^{(0)}, b^{(0)})^T = (2, 2)^T$

$$\begin{array}{c|cccc} x_i & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline y_i & 3 & 1 & 0.5 & 0.2 & 0.05 \end{array}$$

$$g(a, b) := y - f(a, b) = \begin{pmatrix} g_1(a, b) \\ \vdots \\ g_5(a, b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 - ae^{bx_1} \\ \vdots \\ y_5 - ae^{bx_5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 - ae^{b \cdot 0} \\ 1 - ae^{b \cdot 1} \\ 0.5 - ae^{b \cdot 2} \\ 0.2 - ae^{b \cdot 3} \\ 0.05 - ae^{b \cdot 4} \end{pmatrix}$$

$$Dg(a, b) := \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial a}(a, b) & \frac{\partial g_1}{\partial b}(a, b) \\ \frac{\partial g_2}{\partial a}(a, b) & \frac{\partial g_2}{\partial b}(a, b) \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial g_5}{\partial a}(a, b) & \frac{\partial g_5}{\partial b}(a, b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -ae^{b \cdot 1} & -ae^{b \cdot 1} \\ -e^{b \cdot 2} & -2ae^{b \cdot 2} \\ -e^{b \cdot 3} & -3ae^{b \cdot 3} \\ -e^{b \cdot 4} & -4ae^{b \cdot 4} \end{pmatrix}$$

Für den ersten Schritt des ungedämpften Verfahrens erhalten wir also

$$Dg(1, -1.5) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -e^{-1.5} & -e^{-1.5} \\ -e^{-3} & -2e^{-3} \\ -e^{-4.5} & -3e^{-4.5} \\ -e^{-6} & -4e^{-6} \end{pmatrix}, g(1, -1.5) = \begin{pmatrix} 3 - 1 \\ 1 - e^{-1.5} \\ 0.5 - e^{-3} \\ 0.2 - e^{-4.5} \\ 0.05 - e^{-6} \end{pmatrix}$$

...weiter mit Algorithmus

numerische Integration

Eine Funktion durch aufteilen in Teilintervalle + Approximation angenähert integrieren.

Rechteck-/Trapezregel

Zur Approximation von Integral

I = \int_a^b f(x)dx

durch ein Rechteck/Trapez

Rechteckregel

Rf = f(\frac{a+b}{2}) * (b-a)

Trapezregel

Tf = \frac{f(a) + f(b)}{2} * (b-a)

summierte Rechteck-/Trapezregel

- f : [a, b] → ℝ stetig
- n ∈ ℕ Anzahl Subintervalle [xi, xi+1]
- i ∈ [0, n - 1] und xn = b
- Subintervalle von konstanter Breite h = xi+1 - xi = \frac{b-a}{n} → xi = a + i * h

Rf(h) = h * \sum_{i=0}^{n-1} f(xi + \frac{h}{2})

Tf(h) = h * (\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(xi))

Simpson-Regel

Annäherung durch ein Polynom 2. Grades anstatt Rechteck/Trapez

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

summierte Simpson-Regel

Ausgangslage identisch zu summierte Rechteck-/Trapezregel

Sf(h) \equiv \frac{h}{3} (\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(xi) + 2 \sum_{i=1}^n f(\frac{xi-1 + xi}{2}) + \frac{1}{2}f(b))

Kann auch als gewichtetes Mittel von Trapez- & Rechteckregel geschrieben werden:

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

Fehlerabschätzung der summierten Formeln (Rechteck/Trapez/Simpson)

Die summierte Rechteckregel ist erwartungsweise doppelt so genau wie die Trapezregel, Simpson mit Abstand am genauesten. (h = \frac{b-a}{n})

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

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

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

Gaussformeln

Bisher wurden Stützstellen xi mit konstanter Schrittweite gewählt. Sie können aber auch so gewählt werden, dass das Integral "optimal" approximiert wird.

Die Idee ist die xi & ai aus I(f) = \sum_{i=1}^n ai f(xi) so zu wählen dass der Fehler möglichst klein wird.

Nach viel rechnen kommt man auf folgende Formeln(n Anzahl Stützstellen):

Die Gauss Formeln für n = 1, 2, 3 für \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n ai f(xi) lauten:

- n = 1: G1f = (b-a) * f(\frac{b+a}{2})
- n = 2: G2f = \frac{b-a}{2} [f(-\frac{1}{\sqrt{3}} * \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}} * \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2})]
- n = 3: G3f = \frac{b-a}{2} [\frac{5}{9} * f(-\sqrt{0.6} * \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}) + \frac{8}{9} * f(\frac{b+a}{2}) + \frac{b-a}{2} [\frac{5}{9} * f(\sqrt{0.6} * \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2})]

Romberg-Extrapolation

Für die summierte Trapezregel Tf(h) zur näherungsweisen Berechnung von I(f) = \int_a^b f(x)dx gilt:

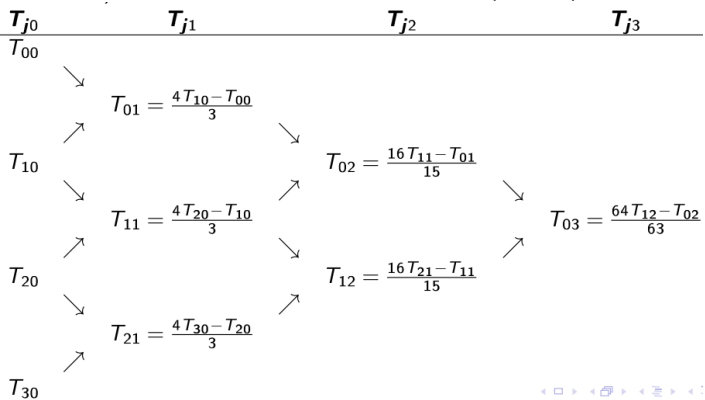
Sei Tj0 = Tf(\frac{b-a}{2^j}) für j = 0, 1, ..., m. Dann sind durch die Rekursion

Tjk = \frac{4^k * Tj+1,k-1 - Tj,k-1}{4^k - 1}

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

- Wir müssen also zuerst für k = 0 die Tj0 mit der summierten Trapezformel für die fortlaufend halbierten Schrittweiten hj = \frac{b-a}{2^j} (j = 0, 1, 2, ..., m) berechnen, z.B. h, \frac{h}{2}, \frac{h}{4}, \frac{h}{8} für m = 3.
- Damit erhalten wir T00, T10, T20, T30 in der ersten Spalte des Extrapolationsschemas (s.u.).
- Anschliessend können wir diese Werte extrapolieren und erhalten die Tjk (für k = 1, 2, ..., m) ohne grossen Rechenaufwand, wie im Schema dargestellt.

Die Extrapolation ergibt folgendes Schema (m = 3)



Bemerkungen zur Romberg-Extrapolation

- In der ersten Spalte Tj0 muss für die summierte Trapezregel Aufgrund von hj = \frac{b-a}{2^j} natürlich auch nj = 2^j verwenden
- Da in der ersten Spalte Tj0 die Trapezregel für immer kleiner werdende Schrittweiten hj angewandt wird, werden oft unnötig f(xi) doppelt ausgewertet. Stattdessen kann man diese spalte auch rekursiv definieren.

Tj0 = \frac{1}{2}Tj-1,0 + hj \sum_{i=1}^{nj-1} f(a + (2i-1)hj)

wobei: nj-1 = 2^{j-1} & hj = \frac{hj-1}{2}