Stoffliste Numerik I

- Fehlerbetrachtung
  - Fehlergrößen, Fehlertypen
  - Grundlagen der Floating-Point Arithmetik, Maschinengenauigkeit
  - relative, absolute Kondition, Abschätzung über Mittelwertsatz
- Direkte Löser für lineare Gleichungssysteme
  - Gaußelimination
  - LU-Zerlegung mit Spalten-Pivot
  - Cholesky (Formel wird angegeben)
  - Satz von Prager-Öttli (Formel wird angegeben, Anwendung)
  - Orthonormale Matrizen (Drehmatrizen für Givens und Jacobi)
- Iterative Löser für lineare Gleichungssysteme
  - Grundlagen und Konvergenzaussagen
  - Jacobi, Gauß-Seidel, Nachiteration
  - Steepest Descent
- Eigenwerte
  - Theorie, Vektoriteration
  - Jacobi-Verfahren (Formel für c, s wird angegeben)
  - QR-Verfahren ohne Shift
  - Hessenberg-Form
- Nichtlineare Gleichungen
  - ganzes Kapitel
- Interpolation
  - Polynominterpolation (Formel für dividierte Differenzen wird angegeben)
  - Splines (Formel wird angegeben)
- Approximation
  - Lineare Ausgleichsprobleme (Normalgleichungen)
  - Pseudoinverse (von Hand)
  - Singulärwerte (von Hand)
  - Regularisierung schlecht konditionierter Probleme
    - TSVD
    - Tikhonov
- Numerische Integration

    - komplett (Newton-Cotes, einfach und summiert, Gauß, Extrapolation, adaptiv)
    - Formeln für Trapez-, Simpson-Verfahren sowie Gauß-Integration G_0 werden vorausgesetzt, alle anderen werden angegeben (auch Extrapolationsschema, Fehlerschätzer bei adaptiver Integration)

- Optimierung
    - Theorie (stationäre Punkte, Klassifikation)
    - Steepest Descent mit exakter Liniensuche

Wichtige Begriffe und Formeln

- Fehler:
  - $e = \tilde{y} - y$ Fehler
  - $e_a = \|\tilde{y} - y\|_Y$ absoluter Fehler
  - $e_r = \frac{\|\tilde{y}-y\|_Y}{\|y\|_Y}$ für $\|y\|_Y \neq 0$ relativer Fehler
  - Eine Fließkommazahl zur Basis b hat die Darstellung
    $$v \cdot m \cdot b^e$$
  - Die normalisierte Darstellung
    $$\pm(m_0 \,.\, m_1 \ldots m_l) b^e = \pm(\sum_{i=0}^{l} m_i b^{-i}) b^e, \qquad m_0 \neq 0$$
    ist für Zahlen $\neq 0$ eindeutig
  - Betrachten wir normierte Fließkommazahlen zur Basis b mit Mantissenlänge m, so bezeichnet
    $$\varepsilon_M = \frac{1}{2} b^{-l}$$
    die Maschinengenauigkeit
  - Sei $f : X \to Y$. Die kleinsten Konstanten $\varkappa_a, \varkappa_r$ mit
    $$\begin{aligned} \|f(x') - f(x)\|_Y &\leq \varkappa_a \, \|x' - x\|_X \\ \frac{\|f(x') - f(x)\|_Y}{\|f(x)\|_Y} &\leq \varkappa_r \frac{\|x' - x\|_X}{\|x\|_X}, \end{aligned} \qquad \|x' - x\|_X \leq \delta$$
    heißen absolute Kondition bzw. relative Kondition von f in x und hängen von den benutzten Normen, x und δ ab.
  - nach dem Mittelwertsatz gilt
    $$f(x') = f(x) + f'(\xi)(x' - x), \qquad \xi \in \mathrm{co}(x, x') = [\min(x, x'), \max(x, x')]$$
    und damit
    $$|f(x') - f(x)| = |f'(\xi)| \, |x' - x| \leq \sup_{\xi \in \mathrm{co}(x,x')} |f'(\xi)| \, |x' - x|,$$
    d.h. wir erhalten die Abschätzungen
    $$\varkappa_a \leq \sup_{\xi \in \mathrm{co}(x,x')} |f'(\xi)|, \qquad \varkappa_r \leq \sup_{\xi \in \mathrm{co}(x,x')} |f'(\xi)| \frac{|x|}{|f(x)|}$$
  - Fehlerfortpflanzungsformeln der differentiellen Fehleranalyse
    $$|f(x') - f(x)| \approx |f'(x)||x' - x|, \qquad \text{für} \quad f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
  - $\varkappa(A) = \|A\| \, \|A^{-1}\|$ heißt Konditionszahl der Matrix A
- direkte Löser:
  - Gaußelimination, LU-Zerlegung mit Pivot
  - orthonormale Matrizen

- Drehmatrizen
$$Q = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$
- Spiegelmatrizen
$$Q_+ = I - 2ww^T, \qquad w = \frac{v}{\|v\|_2}, \qquad v = a - \|a\|_2 e_1$$
(wird angegeben)
- Anwendung bei Givens/Householder

- iterative Löser:
  - Ein *einstufiges, stationäres lineares Iterationsverfahren* ist gegeben durch
  $$x_{k+1} = \Phi(x_k) = Bx_k + d$$
  wobei B die Iterationsmatrix und d der Iterationsvektor ist.
  - Die Konvergenz eines stationären linearen Verfahrens ist *unabhängig* von der benutzten *Matrix- und Vektornorm*
  - Sei A regulär, $x_{k+1} = \Phi(x_k) = Bx_k + d$. Φ konvergiert genau dann wenn $\rho(B) < 1$
  - Jacobi-Verfahren oder Gesamtschritt-Verfahren
  $$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\big(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)}\big), \qquad i = 1, \ldots, n$$
  $$B_J = D^{-1}(E + F)$$
  - Ist A regulär und streng diagonaldominant, d.h.
  $$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad \forall\, i = 1, \ldots, n$$
  dann konvergiert das Jacobi-Verfahren
  - Gauß-Seidel-Verfahren bzw. Einzelschritt-Verfahren
  $$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\big(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)}\big), \qquad i = 1, \ldots, n$$
  $$B_{GS} = (D - E)^{-1} F$$
  - Nachiteration:
    - bestimme mit LU-Zerlegung $\tilde{x}, L, U$
    - setze $x_0 = \tilde{x}$ und wiederhole:
      - $r_k = b - Ax_k$
      - $p_k = M^{-1} r_k \quad$ d.h. $\quad LUp_k = r_k$
      - $x_{k+1} = x_k + p_k$

    bis $\frac{\|p_k\|}{\|x_{k+1}\|} < \varepsilon$

- Eigenwerte:
  - Vektoriteration:
    - wähle $x^{(0)}$ mit $\|x^{(0)}\|_2 = 1, \quad x_1^{(0)} \neq 0$

- wiederhole

$$y^{(k+1)} = Ax^{(k)}$$
$$x^{(k+1)} = \frac{y^{(k+1)}}{\|y^{(k+1)}\|_2}$$
$$\mu^{(k+1)} =< x^{(k)}, y^{(k+1)} >$$

- $x^{(k)}$ ist eine Näherung von $c \cdot v_1$, $\mu^{(k)}$ eine Näherung von λ_1

- Jacobi-Rotation (Eigenwerte)

$$A^{(k)} = Q_k^T \cdot \ldots \cdot Q_1^T A Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k,$$

  Q_i geeignete Drehmatrizen (Formel für c, s wird angegeben)

- QR-Verfahren (Eigenwerte)
  - starte mit $A^{(0)} = A$
  - wiederhole:
    - zerlege $A^{(k)} = Q_k R_k$
    - berechne $A^{(k+1)} = R_k Q_k$
- Hessenberg-Form

- Nichtlineare Gleichungen:

  - Bisektion, Regula-Falsi, Sekantenverfahren
  - Newton-Verfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

  - Picard-Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

  - Φ heißt Kontraktion bezüglich $\|\cdot\|$ auf $X \subset \mathbb{R}^n$ falls

    (1) $\Phi : X \to X$
    (2) $\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \alpha \|x - y\| \quad \forall x, y \in X$ und $\alpha < 1$ unabhängig von x, y

  - Banachscher Fixpunktsatz: $X \subset \mathbb{R}^n$ abgeschlossen, $\Phi : X \to X$ eine Kontraktion auf X mit

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \alpha \|x - y\| \quad \forall x, y \in X$$

    $\alpha < 1$ unabhängig von x, y. Dann hat Φ genau einen Fixpunkt $x = \Phi(x)$ in X. Die Picard-Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

    konvergiert $\forall x_0 \in X$ gegen x. Es gelten die Abschätzungen

$$\|x - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\| \qquad \text{a-priori Abschätzung}$$
$$\|x - x_k\| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \|x_k - x_{k-1}\| \qquad \text{a-posteriori Abschätzung}$$

  - Die Iteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ heißt
    - linear konvergent falls es eine Konstante $0 \leq c < 1$ unabhängig von k gibt mit

$$\|e_{k+1}\| \leq c \, \|e_k\| \quad \forall \, k$$

    - konvergent mit Ordnung m falls es eine Konstante $0 \leq c$ unabhängig von k gibt mit

$$\lim_{k \to \infty} \|e_k\| = 0 \qquad \text{und} \qquad \|e_{k+1}\| \leq c \, \|e_k\|^m \quad \forall \, k$$

- $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sei zweimal stetig differenzierbar mit $f(x) = 0$, $f'(x) \neq 0$, d.h. x ist eine einfache Nullstelle von f. Liegt x_0 nahe genug an x, dann konvergiert das Newton-Verfahren quadratisch gegen x.
- Für mehrfache Nullstellen ist das Newton-Verfahren wohldefiniert und konvergiert nur *linear* in einer Umgebung von x
- erhalte quadratische Konvergenz für $q-$fache Nullstelle durch
  - Variante 1: setze
    $$\tilde{\Phi}(y) = y - q\frac{f(y)}{f'(y)}$$
    und iteriere
    $$x_{k+1} = \tilde{\Phi}(x_k)$$
  - Variante 2: setze
    $$\tilde{f}(y) = \frac{f(y)}{f'(y)}$$
    und iteriere
    $$\Phi(y) = y - \frac{\tilde{f}(y)}{\tilde{f}'(y)}$$

- Interpolation
  - Lagrange-Polynom
    $$L_j(x) = \frac{x - x_0}{x_j - x_0} \cdot \ldots \cdot \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \cdot \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} \cdot \ldots \cdot \frac{x - x_n}{x_j - x_n}$$
  - Lagrange-Interpolationspolynom
    $$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j L_j(x)$$
  - Das Interpolationspolynom in Newton-Darstellung lautet
    $$p_n(x) = d_{00} + d_{10}(x - x_0) + \ldots + d_{n0}(x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}),$$
    wobei d_{k0} dividierte Differenzen sind
  - kubische Splines:
    - Interpolation:
      $$s_3(x_i) = y_i, \qquad i = 0, \ldots, n$$
    - die Glattheitsbedingungen an den inneren Punkten x_i, $i = 1, \ldots, n-1$ liefern
      $$\begin{aligned} C^0 : \quad & s_3(x_i)_- = s_3(x_i)_+ \\ C^1 : \quad & s_3'(x_i)_- = s_3'(x_i)_+ \\ C^2 : \quad & s_3''(x_i)_- = s_3''(x_i)_+ \end{aligned}$$
    - die natürliche Abschlussbedingung
      $$s''(x_0) = s''(x_n) = 0,$$

- Ausgleichsproblem:
  - quadratischer Fehler:
    $$\tilde{e} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} e_i^2} = \|e\|_2, \qquad e_i = f(x_i) - y_i, \qquad f(x) = p_1 + p_2 x + \ldots + p_m x^{m-1}$$

- neue Form

$$\|e\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} f(x_1) - y_1 \\ \vdots \\ f(x_n) - y_n \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{m-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{m-1} \end{pmatrix}}_{A\in\mathbb{R}^{n\times m}} \underbrace{\begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_m \end{pmatrix}}_{p\in\mathbb{R}^m} - \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{y\in\mathbb{R}^n} \right\|_2 = \|Ap - y\|_2$$

- Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $n \geq m$, $rang(A) = m$ (also maximal), dann hat für jedes $b \in \mathbb{R}^n$ das Minimalproblem

$$\min_{x\in\mathbb{R}^m} \|Ax - b\|_2$$

genau eine Lösung $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$. Die Lösung $\hat{x}$ löst auch die Normalgleichungen

$$A^T A\,\hat{x} = A^T b$$

wobei $A^T A$ regulär ist.

- QR Zerlegung für lineare Ausgleichsprobleme:
  - $A \in \mathbb{R}^{n\times m},\ m \leq n,\ rang(A) = m,\ b \in \mathbb{R}^n$ gegeben
  - bestimme eindeutiges x mit $\|Ax - b\|_2$ minimal durch
    - Transformation aller m Spalten von A mit Householder- oder Givens-matrizen

$$A \to QA = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad b \to Qb = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

    - Lösung von $Rx = c$ durch rückwärts einsetzen
- Pseudoinverse:

$$x = A^+ b \qquad \Leftrightarrow \qquad x = \min_{z\in X} \|z\|_2, \qquad X = \left\{ z \,\middle|\, \|Az - b\|_2 \text{ minimal} \right\}$$

- Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$, Eigenschaften, Zusammenhang mit Pseudoinverse
- Schlecht konditionierte Probleme:
  - Konditionszahl für beliebige Matrizen

$$\varkappa_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}$$

  - Abgeschnittene Singulärwertzerlegung (TSVD)

$$A_\alpha = U\Sigma_\alpha V^T, \qquad \Sigma_\alpha = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k, 0, \dots, 0)$$

  mit

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_k} \leq \frac{1}{\alpha}, \qquad \frac{\sigma_1}{\sigma_{k+1}} \geq \frac{1}{\alpha}$$

  - Tikhonov Regularisierung: minimiere

$$J_\alpha(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \alpha^2\|x\|_2^2, \qquad \alpha > 0,$$

  d.h.

$$x_\alpha = (A^T A + \alpha^2 I)^{-1} A^T b$$

- Integration
  - Trapez-Regel

$$(b - a)\frac{1}{2}\big(f(a) + f(b)\big)$$

- Simpson-Regel
$$(b-a)\big(\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f(\frac{a+b}{2})+\frac{1}{6}f(b)\big),$$
- summierte Trapez-Regel
$$T_m(f)=\frac{l}{2}\big(f(a_0)+2f(a_1)+\ldots+2f(a_{m-1})+f(a_m)\big)$$
- summierte Simpson-Regel
$$S_{\tilde{m}}(f)=\frac{\tilde{l}}{3}\big(f(\tilde{a}_0)+4f(\tilde{a}_1)+2f(\tilde{a}_2)+4f(\tilde{a}_3)+\ldots+2f(\tilde{a}_{\tilde{m}-2})+4f(\tilde{a}_{\tilde{m}-1})+f(\tilde{a}_{\tilde{m}})\big)$$
- Gauß-Quadratur allgemein, insbesondere
$$G_0(f)=(b-a)f\Big(\frac{a+b}{2}\Big)$$
- Prinzip der Extrapolation (Romberg und Bulirsch) (ohne Aitken-Neville, bzw. Aitken-Neville wird angegeben)
- Prinzip der adaptiven Integration (Formeln für Trapez- oder Simpson-Verfahren werden vorausgesetzt, Formeln für Fehlerschätzer werden angegeben)

- Optimierung:
  - Gradient, Hesse-Matrix, Bedingungen für lokales Minimum
  - Grundprinzip für Abstiegsverfahren
  - Abstiegsrichtung
  - Liniensuche
  - Steepest-Descent