
Mathematik 3 (Numerik)

Zusammenfassung
Fabian Damken



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	5
1.1	Vektornorm	5
1.2	Induzierte Matrixnormen	5
1.3	Konditionszahl	6
1.4	Spezielle Matrizen	6
1.5	Eigenwerte und Eigenvektoren	6
1.5.1	Charakteristisches Polynom	6
1.5.2	Eigenschaften	7
1.5.3	Diagonalisierbarkeit	7
1.6	\mathcal{O} -Notation	7
2	Interpolation	8
2.1	Polynominterpolation	8
2.1.1	Eindeutigkeit	8
2.1.2	Naiver Lösungsansatz	8
2.1.3	Lagrange-Interpolation	9
2.1.4	Newtonsche Interpolationsformel	9
2.1.5	Fehlerabschätzungen	10
2.1.6	Runges Phänomen	10
2.1.7	Tschebyscheff-Abszissen	10
2.2	Spline-Interpolation	11
2.2.1	Lineare Splines	11
2.2.2	Kubische Splines	12
3	Integration	15
3.1	Geschlossene Newton-Cotes-Quadratur	15
3.1.1	Spezielle geschlossene Newton-Cotes-Formeln	15
3.2	Offene Newton-Cotes-Quadratur	16
3.2.1	Spezielle offene Newton-Cotes-Formeln	16
3.3	Vergleich Geschlossene vs. Offene Newton-Cotes-Quadratur	16
3.4	Summierte Newton-Cotes-Formeln	16
3.4.1	Summierte Trapezregel (geschlossen)	17
3.4.2	Summierte Simpson-Regel (geschlossen)	17
3.4.3	Summierte Rechteck-Regel (offen)	17
4	Gewöhnlichen Differentialgleichungen	18
4.1	Existenz- und Eindeutigkeit	18
4.2	Numerische Verfahren	18
4.2.1	Explizites Euler-Verfahren	18
4.2.2	Implizites Euler-Verfahren	18
4.2.3	Verfahren von Heun	18
4.2.4	Modifiziertes Euler-Verfahren	18
4.2.5	Klassisches Runge-Kutta-Verfahren	18
4.2.6	Explizite Runge-Kutta-Verfahren und Butcher-Schema	18
4.2.7	Implizite Runge-Kutta-Verfahren und Butcher-Schema	18

4.3	Konvergenz und Konsistenz	18
4.3.1	Konsistenzordnungen	19
4.3.2	Konvergenzsatz	19
4.4	Steife Differentialgleichungen	19
4.4.1	Modellgleichung	19
4.4.2	Stabilität	19
4.4.3	Stabilitätsgebiete	19
5	Lineare Gleichungssysteme	20
5.1	Lösungstheorie	20
5.2	Gaußsches Eliminationsverfahren, Dreieckszerlegung	20
5.2.1	Lösung gestaffelter Gleichungssysteme	20
5.2.2	Gaußsches Eliminationsverfahren	20
5.2.3	LR-Zerlegung	20
5.2.4	Matrixdarstellung	21
5.2.5	Matrixklassen ohne Pivotsuche	21
5.3	Cholsky-Verfahren	21
5.3.1	Cholsky-Verfahren \leftrightarrow LR-Zerlegung	21
5.3.2	Verfahren	21
5.3.3	Eigenschaften	21
5.4	Fehlerabschätzungen und Rundungsfehlereinfluss	21
5.4.1	Fehlerabschätzungen für gestörte Gleichungssysteme	21
5.4.2	Rundungsfehleranalyse	21
6	Nichtlineare Gleichungssysteme	22
6.1	Newton-Verfahren	22
6.1.1	Lokales Newton-Verfahren	22
6.1.2	Globalisierung	22
7	Eigenwert- und Eigenvektorberechnung	24
7.1	Störungstheorie	24
7.2	Gershgorin-Kreise	24
7.3	Numerische Verfahren	24
7.3.1	Vektoriteration	24
7.3.2	QR-Verfahren	24



Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 24

Content 25

Content 25

Content 25

Content 25

Content 25

1 Grundlagen

1.1 Vektornorm

Eine *Vektornorm* ist eine Abbildung $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit folgenden Eigenschaften:

Definitheit $\|c\| = 0 \iff c = 0$

Homogenität $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$ (für alle $\alpha \in \mathbb{R}$ und alle $x \in \mathbb{R}^n$)

Dreiecksungleichung $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (für alle $x, y \in \mathbb{R}^n$)

Wichtige Normen

p -Norm $\|x\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i|^p}$

Summennorm $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
(1-Norm)

Euklidische Norm $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} = \sqrt{x^T x}$
(2-Norm)

Maximumsnorm $\|x\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|$
(∞ -Norm)

1.2 Induzierte Matrixnormen

Sei $\|\cdot\|$ eine beliebige Norm auf \mathbb{R}^n . Dann ist auf $\mathbb{R}^{n \times n}$ eine dazugehörige Matrixnorm definiert durch:

$$\|A\| := \sup_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

für jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Diese Norm wird *induzierte Matrixnorm* genannt.

Eine solche Norm hat folgende Eigenschaften:

Definitheit $\|A\| = 0 \iff A = 0$

Homogenität $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$ (für alle $\alpha \in \mathbb{R}$ und alle $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

Dreiecksungleichung $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ (für alle $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

Verträglichkeit $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$ (für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und alle $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

Submultiplikativität $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ (für alle $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

Wichtige Normen

Spaltensummennorm $\|A\|_1 = \max_{j=1, \dots, n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$
(1-Norm)

Euklidische Norm $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ (mit λ Eigenwert von A)
(2-Norm)

Zeilensummennorm $\|A\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$
(∞ -Norm)

1.3 Konditionszahl

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und sei $\|\cdot\|$ eine induzierte Matrixnorm.

Dann ist

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

die *Konditionszahl* von A bzgl. der Matrixnorm $\|\cdot\|$.

1.4 Spezielle Matrizen

- $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ist *hermitesch* gdw. $A^H = A$, wobei $A^H := \overline{A}^T$.
- $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ist *unität* gdw. $A^H = A^{-1}$.
- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist *orthogonal* gdw. $A^T = A^{-1}$, bzw. $A^T A = A A^T = I$

1.5 Eigenwerte und Eigenvektoren

Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt *Eigenwert* einer Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ gdw. es einen Vektor $x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$ gibt mit:

$$Ax = \lambda x$$

Ein solcher Vektor wird *Eigenvektor* genannt. Die Menge aller Eigenwerte $\sigma(A)$ heißt *Spektrum* von A .
Der Unterraum

$$\text{Eig}_A(\lambda) := \{x \in \mathbb{C}^n \mid (A - \lambda I)x = 0\}$$

wird *Eigenraum* von A zum Eigenwert λ genannt. Die Dimension

$$\gamma(\lambda) := \dim(\text{Eig}_A(\lambda)) = n - \text{Rang}(A - \lambda I)$$

ist die *geometrische Vielfachheit* von λ und gibt die maximale Anzahl linear unabhängiger Eigenvektoren zu λ an.

1.5.1 Charakteristisches Polynom

λ ist ein Eigenwert von $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ gdw. gilt

$$\mathcal{X}(\lambda) := \det(A - \lambda I) = 0$$

also wenn λ eine Nullstelle des *charakteristischen Polynoms* \mathcal{X} von A ist.

Das charakteristische Polynom hat die Linearfaktorzerlegung

$$\mathcal{X}(\mu) = (-1)^n \cdot (\mu - \lambda_1)^{v_1} \cdot \dots \cdot (\mu - \lambda_k)^{v_k}$$

wobei $v(\lambda_i) = v_i \in \mathbb{N}$ die *algebraische Vielfachheit* von λ_i genannt wird.

1.5.2 Eigenschaften

Sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ eine beliebige Matrix, dann gilt:

- $\lambda \in \sigma(A) \implies \lambda \in \sigma(A^T) \wedge \bar{\lambda} \in \sigma(A^H)$
- Für jede reguläre Matrix A hat die zu A ähnliche Matrix $B = T^{-1}AT$ das selbe charakteristische Polynom und die selben Eigenwerte wie A . Ist x ein Eigenvektor von A , dann ist $y = T^{-1}x$ ein Eigenvektor von B .
- Ist A hermitesch, dann hat A nur reelle Eigenwerte.
Ist A unitär, dann gilt $|\lambda| = 1$ für jeden Eigenwert λ .

1.5.3 Diagonalisierbarkeit

Eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ heißt *diagonalisierbar* gdw. sie n linear unabhängige Eigenvektoren besitzt.

1.6 \mathcal{O} -Notation

Für eine Funktion $g : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ bezeichnet $\mathcal{O}(g(n))$ die Menge aller Funktionen, die asymptotische nicht schneller wachsen als g , d.h.:

$$\mathcal{O}(g(n)) := \{f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R} \mid \exists n_0 \in \mathbb{N} : \exists c \in \mathbb{R} : \forall n \in \mathbb{N}, n \geq n_0 : f(n) \leq c \cdot g(n)\}$$

2 Interpolation

Gegeben Funktionaler Zusammenhang $y = f(x)$, $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}, a < b \in \mathbb{R}$

Bekannt Werte $y_i = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$ (*Stützstellen*)

Ziel Annäherung für $f(x)$ für beliebige $x \in [a, b]$

Interpolationsproblem Suche einfache Ersatzfunktion $\Phi(x)$ mit $\Phi(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$

Wunsch Der Fehler $|f(x) - \Phi(x)|$ sollte auf $[a, b]$ möglichst gering sein.

Interpolationsaufgabe

Zu einer gegebenen Ansatzfunktion $\Phi(x; a_0, \dots, a_n)$, $x \in \mathbb{R}$ mit Parametern $a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ sollen zu gegebenen Paaren (x_i, y_i) $i = 0, \dots, n$ mit $x_i, y_i \in \mathbb{R}$ und $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$ sollen die Parameter a_0, \dots, a_n so bestimmt werden, dass die Interpolationsbedingungen $\Phi(x_i; a_0, \dots, a_n) = y_i$, $i = 0, \dots, n$ erfüllt sind. Die Paare (x_i, y_i) werden als *Stützpunkte* bezeichnet.

2.1 Polynominterpolation

Ansatzfunktion: Polynome vom Grad $\leq n$, also

$$p_n(x) = \Phi(x, a_0, \dots, a_n) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

Interpolationsaufgabe: Finde ein Polynom $p_n(x)$ vom Grad $\leq n$, sodass die Interpolationsbedingungen $p_n(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$ erfüllt sind.

Anwendungen hierfür sind z.B.:

- Approximation einer Funktion auf einem Intervall
- Inverse Interpolation (Approximation von f^{-1} bei einer gegebenen Funktion f)
- Numerische Integration (siehe Kapitel 3)
- Numerische Differentiation

2.1.1 Eindeutigkeit

Es existiert genau ein Polynom vom Grad $\leq n$, welches die Interpolationsbedingungen erfüllt, und zwar $p_n(x)$. Die Lösung einer Interpolationsaufgabe ist also eindeutig.

2.1.2 Naiver Lösungsansatz

Die Interpolationsbedingungen liefern $n + 1$ Gleichungen, womit sich mit Koeffizienten a_0, \dots, a_n ein lineares Gleichungssystem aufstellen lässt:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Nachteile

- Hoher Rechenaufwand: Das Auflösen des Gleichungssystem benötigt $\mathcal{O}(n^3)$ Rechenoperationen.
- Die Koeffizientenmatrix (*Vandermonde-Matrix*) ist invertierbar, aber extrem schlecht konditioniert → Rundungsfehler werden dramatisch verstärkt.

2.1.3 Lagrange-Interpolation

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k L_{k,n}(x) \quad L_{k,n}(x) = \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

Die Lagrange-Polynome $L_{k,n}$ sind so gewählt, dass:

$$L_{k,n}(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{falls } k = i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} =: \delta_{ki}$$

wobei δ_{ki} das Kronecker-Symbol ist.

Bewertung

- Vorteile
 - Rechenaufwand: $\mathcal{O}(n^2)$ zur Koeffizientenberechnung, $\mathcal{O}(n)$ zur Auswertung von $p_n(x)$
 - Intuitive Darstellung
- Nachteile
 - Hinzunahme von Stützstellen ist aufwendig.

2.1.4 Newtonsche Interpolationsformel

$$p_n(x) = y_0 + \sum_{i=1}^n \gamma_i (x - x_0) \cdots (x - x_{i-1}) \quad \gamma_i = f_{[x_0, \dots, x_i]}$$

Die Berechnung der Parameter erfolgt über die *dividierten Differenzen* $f_{[x_0, \dots, x_i]} := \gamma_i$ zu den Stützstellen x_0, \dots, x_i , wobei $f_{[x_0]} = \gamma_0 = y_0$. Allgemein werden die dividierten Differenzen über Rekursion berechnet (die Reihenfolge der x_i ist dabei irrelevant):

$$j = 0, \dots, n : f_{[x_j]} = y_j$$
$$k = 1, \dots, n, j = 0, \dots, n - k : f_{[x_j, \dots, x_{j+k}]} = \frac{f_{[x_{j+1}, \dots, x_{j+k}]} - f_{[x_j, \dots, x_{j+k-1}]}}{x_{j+k} - x_j}$$

Die Berechnung der dividierten Differenzen kann z.B. mit folgendem Schema erfolgen:

$$\begin{array}{l|l} x_0 & f_{[x_0]} = y_0 \\ & \searrow \\ x_1 & f_{[x_1]} = y_1 \\ & \swarrow \quad \searrow \\ x_2 & f_{[x_2]} = y_2 \\ & \swarrow \quad \searrow \\ \vdots & \vdots \end{array} \quad \begin{array}{l} \\ f_{[x_0, x_1]} \\ \\ f_{[x_1, x_2]} \\ \\ \vdots \end{array} \quad \begin{array}{l} \\ \\ f_{[x_0, x_1, x_2]} \\ \\ \vdots \end{array}$$

Vorteile

- Rechenaufwand: $\mathcal{O}(n^2)$ zur Berechnung der dividierten Differenzen, $\mathcal{O}(n)$ zur Auswertung von $p_n(x)$
- Hinzunahme neuer Stützstellen erfordert nur die Berechnung von n zusätzlichen dividierten Differenzen.

2.1.5 Fehlerabschätzungen

Sei $f \in C^{n+1}([a, b])$ und $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ verschiedene Punkte und sei $p_n(x)$ das eindeutige Interpolationspolynom vom Grad $\leq n$ zu den Stützwerten $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \dots, n$. Dann existiert zu jedem $x \in [a, b]$ ein $\xi_x \in [a, b]$ mit

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} (x - x_0) \cdots (x - x_n)$$

Mit dem Knotenpolynom

$$\omega(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

gilt für den maximalen Fehler:

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - p_n(x)| \leq \max_{x \in [a, b]} \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!} \max_{x \in [a, b]} |\omega(x)| \leq \max_{x \in [a, b]} \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!} (b-a)^{n+1}$$

Werden keine äquidistanten Stützstellen verwendet sondern Tschebyscheff-Abszissen, so verschärft sich die Fehlerabschätzung zu:

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - p_n(x)| \leq \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} 2^{-n}$$

2.1.6 Runges Phänomen

Bei äquidistanter Wahl der Stützpunkte, d.h. $x_i = a + ih$, $h = \frac{b-a}{n}$, ist i.A. nicht gewährleistet, dass gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f(x) - p_n(x) = 0 \quad \text{für alle } x \in [a, b]$$

Runges Phänomen beschreibt das Überschwingen des Interpolanten am Rand des Intervalls.

2.1.7 Tschebyscheff-Abszissen

Tschebyscheff-Abszissen dienen der Vermeidung von Runges Phänomen, in dem die Stützstellen nicht äquidistant gewählt werden:

$$x_i = \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{2i+1}{n+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right) + \frac{b+a}{2} \quad i = 0, \dots, n$$

Dies liefert den minimalen Wert für $\max_{x \in [a, b]} |\omega(x)|$, und zwar:

$$\max_{x \in [a, b]} |\omega(x)| = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} 2^{-n}$$

2.2 Spline-Interpolation

- Motivation: Höhere Anzahl an Stützstellen ergibt nicht immer eine bessere Approximation bei der Polynominterpolation.
- Lösung: Zerlegung von $[a, b]$ in Teilintervalle und Polynominterpolation auf den Teilintervallen mit $\text{Grad} \leq k$.
- Problem: Die Polynome passen an den Intervallgrenzen mglw. nicht zusammen.
→ Spline-Interpolation: Die Polynome gehen $k - 1$ -mal stetig ineinander über.

Splinefunktion

Sei $\Delta = \{x_i \mid a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$ eine Zerlegung des Intervalls $[a, b]$, wobei die x_i *Knoten* genannt werden.

Dann ist eine *Splinefunktion* der Ordnung k zur Zerlegung Δ eine Funktion $s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mit folgenden Eigenschaften:

- Es gilt $s \in C^{k-1}([a, b])$
- s stimmt auf jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit einem Polynom s_i vom Grad $\leq k$ überein.

Die Menge dieser Splinefunktionen wird mit $S_{\Delta, k}$ bezeichnet.

Splinefunktionen mit $k = 1$ werden *Lineare Splines* genannt, Splinefunktionen mit $k = 3$ werden *Kubische Splines* genannt.

Interpolationsaufgabe

Bestimme zu einer Zerlegung $\Delta = \{x_i \mid a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$ und Werten $y_i \in \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$ eine Funktion $s \in S_{\Delta, k}$ mit $s(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$.

2.2.1 Lineare Splines

- Ein linearer Spline $s \in S_{\Delta, 1}$ ist stetig.
- s ist ein Polynom vom Grad ≤ 1 auf jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$.
- Die Interpolationsbedingungen ergeben $s_i(x_i) = y_i$ und $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$.
- Dies legt s_i fest (Lagrange-Interpolation):

$$s(x) = s_i(x) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} y_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} y_{i+1} \quad \text{für alle } x \in [x_i, x_{i+1}]$$

Eindeutigkeit

Zu einer Zerlegung Δ von $[a, b]$ und Werten y_i , $i = 0, \dots, n$ existiert genau ein interpolierender linearer Spline.

Fehlerabschätzung

Sei $f \in C^2([a, b])$. Dann gilt für jede Zerlegung $\Delta = \{x_i \mid a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$ von $[a, b]$ und den interpolierenden Spline $s \in S_{\Delta, 1}$ von f :

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - s(x)| \leq \frac{1}{8} \max_{x \in [a, b]} |f''(x)| h_{\max}^2 \quad \text{mit } h_{\max} := \max_{i=0, \dots, n-1} x_{i+1} - x_i$$

2.2.2 Kubische Splines

- Ein kubischer Spline $s \in S_{\Delta,3}$ ist zweimal stetig differenzierbar.
- s'' ist stetig und stückweise linear, d.h. $s'' \in S_{\Delta,1}$.
- s wird durch Integration von s'' bestimmt.

Mit den *Momenten* $M_i = s''_i(x_i)$ ergibt sich der Ansatz:

$$s_i(x) = \frac{1}{6} \left(\frac{(x_{i+1} - x)^3}{x_{i+1} - x_i} M_i + \frac{(x - x_i)^3}{x_{i+1} - x_i} M_{i+1} \right) + c_i(x - x_i) + d_i$$

mit zwei Konstanten $c_i, d_i \in \mathbb{R}$:

$$c_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} (M_{i+1} - M_i)$$

$$d_i = y_i - \frac{h_i^2}{6} M_i$$

Zu Berechnung der Momente M_i , $i = 0, \dots, n$ müssen zusätzliche Randbedingungen verwendet werden, die alle eindeutige Lösungen für M_0, \dots, M_n liefern:

$$\text{Natürliche } s''(a) = s''(b) = 0, \text{ d.h. } M_0 = M_n = 0$$

Randbedingungen

$$\text{Hermite-Randbedin- } s'(a) = f'(a) \text{ und } s'(b) = f'(b) \\ \text{gungen}$$

Diese Randbedingungen ergeben mit obigem Ansatz ein lineares, diagonaldominantes, tridiagonales Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} \mu_0 & \lambda_0 & & & & & & \\ \frac{h_0}{6} & \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & \frac{h_{i-1}}{6} & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & \frac{h_i}{6} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \frac{h_{n-2}}{6} & \frac{h_{n-2}+h_{n-1}}{3} & \frac{h_{n-1}}{6} & \\ & & & & & \lambda_n & \mu_n & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ \frac{y_2-y_1}{h_1} - \frac{y_1-y_0}{h_0} \\ \vdots \\ \frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - \frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} \\ \vdots \\ \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} \\ b_n \end{bmatrix}$$

Mit folgenden Werten für $\mu_0, \lambda_0, \lambda_n, \mu_n, b_0, b_n$:

- Natürliche Randbedingungen:

$$\lambda_0 = \lambda_n = b_0 = b_n = 0$$

$$\mu_0 = \mu_n = 1$$

- Hermite Randbedingungen:

$$\begin{aligned}
 \mu_0 &= \frac{h_0}{3} \\
 \mu_n &= \frac{h_{n-1}}{3} \\
 \lambda_0 &= \frac{h_0}{6} \\
 \lambda_n &= \frac{h_{n-1}}{6} \\
 b_0 &= \frac{y_1 - y_0}{h_0} - f'(a) \\
 b_n &= f'(b) - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}
 \end{aligned}$$

Natürliche Randbedingungen:

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & & & & & & & & \\
 \frac{h_0}{6} & \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & & & & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \\
 & & \frac{h_{i-1}}{6} & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & \frac{h_i}{6} & & & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\
 & & & & \frac{h_{n-2}}{6} & \frac{h_{n-2}+h_{n-1}}{3} & \frac{h_{n-1}}{6} & & & \\
 & & & & & 0 & 1 & & &
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 M_0 \\
 M_1 \\
 \vdots \\
 M_n
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 0 \\
 \frac{y_2-y_1}{h_1} - \frac{y_1-y_0}{h_0} \\
 \vdots \\
 \frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - \frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} \\
 \vdots \\
 \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} \\
 0
 \end{bmatrix}$$

Hermite Randbedingungen:

$$\begin{bmatrix}
 \frac{h_0}{3} & \frac{h_0}{6} & & & & & & & & \\
 \frac{h_0}{6} & \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & & & & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \\
 & & \frac{h_{i-1}}{6} & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & \frac{h_i}{6} & & & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\
 & & & & \frac{h_{n-2}}{6} & \frac{h_{n-2}+h_{n-1}}{3} & \frac{h_{n-1}}{6} & & & \\
 & & & & \frac{h_{n-1}}{6} & \frac{h_{n-1}}{3} & & & &
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 M_0 \\
 M_1 \\
 \vdots \\
 M_n
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \frac{y_1-y_0}{h_0} - f'(a) \\
 \frac{y_2-y_1}{h_1} - \frac{y_1-y_0}{h_0} \\
 \vdots \\
 \frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - \frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} \\
 \vdots \\
 \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} \\
 f'(b) - \frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}
 \end{bmatrix}$$

Fehlerabschätzung

Seien $h_{\min} := \min_{i=0,\dots,n-1} h_i$ und $h_{\max} := \max_{i=0,\dots,n-1} h_i$.

Dann gilt für $f \in C^4([a, b])$ mit $f''(a) = f''(b) = 0$ und jede Unterteilung Δ , $y_i = f(x_i)$ und dem kubischen Spline-Interpolanten $s \in S_{\Delta,3}$ zu den **natürlichen Randbedingungen** und $k = 1, 2$:

$$\begin{aligned}
 |f(x) - s(x)| &\leq \frac{h_{\max}}{h_{\min}} \sup_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| h_{\max}^4 \\
 |f^{(k)}(x) - s^{(k)}(x)| &\leq \frac{2h_{\max}}{h_{\min}} \sup_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| h_{\max}^{4-k}
 \end{aligned}$$

Für die **hermite Randbedingungen** gelten schärfere Fehlerabschätzungen (sei alles definiert wie oben):

$$|f(x) - s(x)| \leq \frac{5}{384} \sup_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| h_{\max}^4$$
$$|f^{(k)}(x) - s^{(k)}(x)| \leq \frac{2h_{\max}}{h_{\min}} \sup_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| h_{\max}^{4-k}$$

3 Integration

Gegeben Ein funktionaler Zusammenhang $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$.

Ziel Näherungsweise Bestimmung des Integrals $\int_a^b f(x) dx$.

Integrationsaufgabe: Zu einem gegebenen, integrierbarem, $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, berechne $I(f) = \int_a^b f(x) dx$.

Exakte Integrationsformel

Eine Integrationsformel $J(f) = \sum_{i=0}^n \beta_i f(x_i)$ heißt *exakt vom Grad n* gdw. sie alle Polynome bis mindestens Grad n exakt integriert.

3.1 Geschlossene Newton-Cotes-Quadratur

$$I_n(f) = h \sum_{k=0}^n \alpha_{k,n} f(x_k) \quad \alpha_{k,n} = \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{s-j}{k-j} ds \quad h = \frac{b-a}{n} \quad x_k = a + kh$$

- Die Werte $\alpha_{0,n}, \dots, \alpha_{n,n}$ heißen *Gewichte*.
- Diese sind unabhängig von f und $[a, b]$ und somit tabellierbar.
- Es gilt immer:

$$h \sum_{k=0}^n \alpha_{k,n} = b - a, \quad \text{also} \quad \sum_{k=0}^n \alpha_{k,n} = n$$

- Die geschlossene Newton-Cotes-Formel $I(f)$ ist exakt vom Grad n .

Fehlerabschätzung

Für ein $\xi \in [a, b]$ gilt für den Fehler $E_n(f) := I(f) - I_n(f)$:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b p_n(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - p_n(x)| dx \leq \frac{|f^{(n+1)}(\xi)|}{(n+1)!} (b-a)^{n+2}$$

3.1.1 Spezielle geschlossene Newton-Cotes-Formeln

n	h	$\alpha_{k,n}$				max. Fehler $E_n(f)$	Name	
1	$b-a$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			$-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12} h^3$	Trapezregel	
2	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$		$-\frac{f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$	Simpson-Regel	
3	$\frac{b-a}{3}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$	$-\frac{3f^{(4)}(\xi)}{80} h^5$	3/8-Regel	
4	$\frac{b-a}{4}$	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$	$-\frac{8f^{(6)}(\xi)}{945} h^7$	Milne-Regel

Tabelle 3.1: Geschlossene Newton-Cotes-Formeln

Ab $n \geq 7$ treten negative Gewichte auf, weshalb das Verfahren zunehmend numerisch instabil wird.

3.2 Offene Newton-Cotes-Quadratur

$$\tilde{I}_n(f) = h \sum_{k=1}^{n+1} \tilde{\alpha}_{k,n} f(x_k) \quad \tilde{\alpha}_{k,n} = \int_0^{n+2} \prod_{j=1, j \neq k}^{n+1} \frac{s-j}{k-j} ds \quad h = \frac{b-a}{n+2} \quad x_k = a + kh$$

3.2.1 Spezielle offene Newton-Cotes-Formeln

n	h	$\tilde{\alpha}_{k,n}$		max. Fehler $\tilde{E}_n(f)$	Name
0				$\frac{b-a}{2} \frac{f^{(2)}(\xi)}{3} h^3$	Rechteck-Regel
1	$b-a$	$-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12} h^3$	Trapezregel	$\frac{b-a}{3} \frac{3f^{(2)}(\xi)}{4} h^3$	
2	$\frac{b-a}{2}$	$-\frac{f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$	Simpson-Regel	$\frac{b-a}{4} \frac{28f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$	
3	$\frac{b-a}{3}$	$-\frac{3f^{(4)}(\xi)}{80} h^5$	3/8-Regel		
4	$\frac{b-a}{4}$	$-\frac{8f^{(6)}(\xi)}{945} h^7$	Milne-Regel		

Tabelle 3.2: Offene Newton-Cotes-Formeln

- Vorteil offener Formeln: kleineres h bei gleichem n .
- Die Fehlerordnung von $n = 1$ ist wie bei $n = 0$, also kein zusätzlicher Nutzen.
- Ab $n \geq 2$ können negative Gewichte auftreten \implies Numerisch instabil.
- Somit ist nur die Rechteck-Regel empfehlenswert.

3.3 Vergleich Geschlossene vs. Offene Newton-Cotes-Quadratur

n	geschlossen			offen		
	h	$\tilde{E}_n(f)$	Name	h	$E_n(f)$	Name
0				$\frac{b-a}{2}$	$\frac{f^{(2)}(\xi)}{3} h^3$	Rechteck-Regel
1	$b-a$	$-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12} h^3$	Trapezregel	$\frac{b-a}{3}$	$\frac{3f^{(2)}(\xi)}{4} h^3$	
2	$\frac{b-a}{2}$	$-\frac{f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$	Simpson-Regel	$\frac{b-a}{4}$	$\frac{28f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$	
3	$\frac{b-a}{3}$	$-\frac{3f^{(4)}(\xi)}{80} h^5$	3/8-Regel			
4	$\frac{b-a}{4}$	$-\frac{8f^{(6)}(\xi)}{945} h^7$	Milne-Regel			

Tabelle 3.3: Vergleich: Offene/Geschlossene Newton-Cotes-Quadratur

3.4 Summierte Newton-Cotes-Formeln

- Problematik: Die Newton-Cotes-Formeln liefern nur genaue Ergebnisse, wenn das Integrationsintervall klein und die Anzahl der Knoten nicht zu groß ist.
- Idee: Zerlege $[a, b]$ in m Teilintervalle der Länge $H = \frac{b-a}{m}$:

$$y_j = a + jH, \quad j = 0, \dots, m$$

- Es gilt:

$$I(f) = \sum_{j=0}^{m-1} \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x) dx$$

- Wende nun die Newton-Cotes-Formel vom Grad n einzeln auf die Teilintervalle an und summiere das Ergebnis.

$$S_N^{(n)}(f) = h \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^n \alpha_{i,n} f(x_{jn+i}) \quad x_k = a + kh \quad h = \frac{b-a}{N} \quad N = nm$$

Die Gewichte $\alpha_{i,n}$ sind die Gewichte der geschlossenen Newton-Cotes-Formel.
Der Quadraturfehler

$$R_N^{(n)}(f) = I(f) - S_N^{(n)}(f)$$

ergibt sich durch Summierung der Fehler auf den Teilintervallen.

3.4.1 Summierte Trapezregel (geschlossen)

$$S_N^{(1)}(f) = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{m-1} (f(x_j) + f(x_{j+1})) \quad x_j = a + jh \quad h = \frac{b-a}{m}$$

Fehler: $R_N^{(1)}(f) = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)h^2$

3.4.2 Summierte Simpson-Regel (geschlossen)

$$S_N^{(2)}(f) = \frac{h}{3} \sum_{j=0}^{m-1} (f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1}) + f(x_{2j+2})) \quad x_j = a + jh \quad h = \frac{b-a}{2m}$$

Fehler: $R_N^{(2)}(f) = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{180}(b-a)h^4$

3.4.3 Summierte Rechteck-Regel (offen)

$$\tilde{S}_N^{(0)}(f) = 2h \sum_{j=1}^m f(x_{2j-1}) \quad x_j = a + jh \quad h = \frac{b-a}{N}$$

Fehler: $\tilde{R}_N^{(0)}(f) = \frac{f''(\xi)}{6}(b-a)h^2$

4 Gewöhnlichen Differentialgleichungen

4.1 Existenz- und Eindeutigkeit

4.2 Numerische Verfahren

4.2.1 Explizites Euler-Verfahren

4.2.2 Implizites Euler-Verfahren

4.2.3 Verfahren von Heun

4.2.4 Modifiziertes Euler-Verfahren

4.2.5 Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

4.2.6 Explizite Runge-Kutta-Verfahren und Butcher-Schema

4.2.7 Implizite Runge-Kutta-Verfahren und Butcher-Schema

4.3 Konvergenz und Konsistenz

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

4.3.1 Konsistenzordnungen

Konsistenzordnungen von Runge-Kutta-Verfahren

4.3.2 Konvergenzsatz

4.4 Steife Differentialgleichungen

4.4.1 Modellgleichung

4.4.2 Stabilität

4.4.3 Stabilitätsgebiete

Explizites Euler-Verfahren

Implizites Euler-Verfahren

Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

Implizite Trapezregel

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

5 Lineare Gleichungssysteme

5.1 Lösungstheorie

5.2 Gaußsches Eliminationsverfahren, Dreieckszerlegung

5.2.1 Lösung gestaffelter Gleichungssysteme

5.2.2 Gaußsches Eliminationsverfahren

Grundkonzept

Pivotstrategie

Spaltenpivotsuche

Vollständige Pivotsuche

Algorithmen

5.2.3 LR-Zerlegung

Vollständige Pivotsuche

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

5.2.4 Matrixdarstellung

 Content

5.2.5 Matrixklassen ohne Pivotsuche

 Content

5.3 Cholsky-Verfahren

 Content

5.3.1 Cholsky-Verfahren \leftrightarrow LR-Zerlegung

 Content

5.3.2 Verfahren

 Content

5.3.3 Eigenschaften

 Content

5.4 Fehlerabschätzungen und Rundungsfehlereinfluss

 Content

5.4.1 Fehlerabschätzungen für gestörte Gleichungssysteme

 Content

5.4.2 Rundungsfehleranalyse

 Content

Spaltenpivotsuche

 Content

Vollständige Pivotsuche

 Content

6 Nichtlineare Gleichungssysteme

Gesucht ist eine Lösung $x \in D$ von

$$F(x) = 0$$

mit einer gegebenen Abbildung

$$F = \begin{bmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix} : D \rightarrow \mathbb{R}^n$$

wobei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer und abgeschlossen und F mindestens einmal stetig differenzierbar mit einer Jacobi-Matrix $F'(x)$.

Im Gegensatz zu linearen Gleichungssystemen können nichtlineare Gleichungssysteme mehrere oder unendliche viele (isolierte) Lösungen besitzen.

6.1 Newton-Verfahren

Angenommen es gilt $D = \mathbb{R}^n$, also $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

6.1.1 Lokales Newton-Verfahren

```
1 Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ 
2 for  $k = 0, 1, \dots$  do
3   if  $F(x^{(k)}) = 0$  then
4     return  $x^{(k)}$ 
5   else
6     Berechne Newton-Schritt  $s^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  durch Lösen der Newton-Gleichung
                                     
$$F'(x^{(k)})s^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

7     Setze  $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + s^{(k)}$ 
8   end
9 end
```

Konvergenz

Das Newton-Verfahren konvergiert i.d.R. nur für Startpunkte, die nahe genug an der Lösung liegen (lokale Konvergenz).

6.1.2 Globalisierung

Modifikation des Newton-Verfahrens, sodass für jeden Newton-Schritt eine Schrittweite von $\sigma_k \in (0, 1]$ verwendet wird:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k s^{(k)}$$

Die Schrittweite wird so bestimmt, dass

$$\|F(x^{(k+1)})\|_2 < \|F(x^{(k)})\|_2$$

gilt und die Abnahme „ausreichend groß“ ist.

Schrittweitenwahl nach Armijo

Sei $\delta \in (0, \frac{1}{2})$ fest gegeben (z.B. $\delta = 10^{-3}$). Dann wird als Schrittweite das größte $\sigma_k \in \{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots\} = \{\frac{1}{2^k} \mid k \in \mathbb{N}\}$ gewählt, sodass gilt:

$$\|F(x^{(k)} + \sigma_k s^{(k)})\|_2^2 \leq \|F(x^{(k)})\|_2^2 - 2\delta\sigma_k \|F(x^{(k)})\|_2^2$$

Globalisiertes Newton-Verfahren

```
1 Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ 
2 for  $k = 0, 1, \dots$  do
3   if  $F(x^{(k)}) = 0$  then
4     return  $x^{(k)}$ 
5   else
6     Berechne Newton-Schritt  $s^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  durch Lösen der Newton-Gleichung
                                     
$$F'(x^{(k)})s^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

7     Bestimme  $\sigma_k$  nach Armijo-Regel
8     Setze  $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \sigma_k s^{(k)}$ 
9   end
10 end
```

7 Eigenwert- und Eigenvektorberechnung

7.1 Störungstheorie

7.2 Gershgorin-Kreise

7.3 Numerische Verfahren

7.3.1 Vektoriteration

Konvergenz

Vektoriteration von Mises

Vektoriteration von Wiedlandt

Inverse Vektoriteration von Wiedlandt

7.3.2 QR-Verfahren

Grundlegende Eigenschaften

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content

Content



Konvergenz

 Content

Shift-Techniken

 Content

Verbreitete Shift-Strategie

 Content

Berechnung der Eigenvektoren

 Content

Householder-Verfahren zur Berechnung

 Content