Numerik - Formelsammlung

Jan-Cornelius Molnar, Version: 10. September 2009 18:37

1 Darstellung von Zahlen

1.1 Allgemeines

- *Ganze Zahlen lassen sich als b-a-dische Brüche darstellen,*

$$\pm a_n a_{n-1} \dots a_0 \mathrel{\widehat{=}} \sum_{j=0}^{n} a_j b^j, \quad b \in \{2,3,\dots\},\ a_j \in \{0,1,\dots,b-1\}.$$

- *Reelle Zahlen lassen sich als Fließkommazahlen darstellen,*

$$\underbrace{\pm a_0.a_1 \dots a_n}_{\text{Mantisse}} \mathbf{E} \underbrace{\pm c_m c_{m-1} \dots c_0}_{\text{Exponent}} \mathrel{\widehat{=}} \left(\sum_{j=0}^{n} a_j b^{-j}\right) b^{\sum_{n=0}^{m} c_j b^j}.$$

- *Absoluter und realtiver Fehler*

$$e_A = |z - \tilde{z}|, \quad e_R = \frac{e_A}{|z|} = \frac{|z-\tilde{z}|}{z}.$$

- *Approximation reeller Zahlen,* $e_R \leq \varepsilon = \frac{1}{2} b^{-n}$.

1.2 Fehlerfortpflanzung

- *Addition*

$$e_A = |\Delta x + \Delta y| \leq |\Delta x| + |\Delta y|, \quad e_R = \frac{|\Delta x + \Delta y|}{|x+y|}$$

- *Multiplikation*

$$e_A = |x \cdot \Delta y + \Delta x \cdot y + \Delta x \cdot \Delta y|$$
$$e_R = \frac{|x \cdot \Delta y + \Delta x \cdot y + \Delta x \cdot \Delta y|}{|xy|} \leq \underbrace{\frac{|\Delta y|}{|y|} + \frac{|\Delta x|}{|x|}}_{\text{rel. Fehler von } x \text{ und } y} + \underbrace{\frac{|\Delta x|}{|x|}\frac{|\Delta y|}{|y|}}_{\text{Verstärkung}}.$$

- *Funktionsauswertung*

$$e_A = |f(\tilde{x}) - f(x)| = |f'(x)|\,|\Delta x|.$$
$$e_R = \frac{|f(\tilde{x}) - f(x)|}{|f(x)|} = \frac{|f'(x)|\,|x|}{|f(x)|}\frac{|\Delta x|}{|x|}.$$

- *Numerische Differentiation*

$$\left|f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}\right| = \frac{h}{2}|f''(\xi)| \leq \frac{h}{2} C_{f''}$$
$$e_A \leq \frac{h}{2} C_{f''} + \frac{3\varepsilon}{h} + \varepsilon, \qquad h_{opt} = \sqrt{\frac{6\varepsilon}{C_{f''}}}, \quad e_{A_{min}} = \sqrt{2\varepsilon C_{f''}}.$$

2 LGS

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- *LU-Zerlegung für A*

$$A = (L/U) = \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & \cdots & u_{1,n} \\ l_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & \dots & l_{n,n-1} & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

- *A heißt positiv definit, falls* $x^{\perp} A x \geq 0, \ \forall\ x \in \mathbb{R}^n$.
- *A heißt streng diagonaldominant, falls* $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \ \ \forall\ i \leq n$.
- *Spaltenmaximums-Strategie. Wähle p so, dass* $|a_{pi}| \geq |a_{ji}| \ \ \forall\ j \geq i$.
- *Relatives Spaltenmaximums-Strategie. Wähle p so, dass* $\frac{|a_{pi}|}{\sum_{j=i}^{n} |a_{pj}|}$ *maximal.*
- *Die Hülle von A ist*

$$H(A) := \{1,\dots,n\}^2 \setminus \Big\{(i,j) : a_{ik} \text{ für } k = 1,\dots,j \text{ oder } a_{kj} = 0 \text{ für } k = 1,\dots,i\Big\}. \quad \rtimes$$

- *A heißt Bandmatrix mit Bandweite* $m = m_1 + m_2 + 1$, *falls*

$$a_{ij} = 0, \quad \text{für } j < i - m_1 \text{ oder } j > i + m_2.$$

Als Band bezeichnet man

$$B(A) = \left\{(i,j) \in \{1,\dots,n\}^2 \,:\, i - m_1 \le j \le i + m_2\right\}$$

- *Eine Abbildung $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ heißt Norm, falls positiv definit, homogen und dreiecksungleich.*
- *Seien $\|\cdot\|_n$ und $\|\cdot\|_m$ Normen, die Matrixnorm ist gegeben durch,*

$$\|A\|_{n,m} := \max_{\substack{x\in\mathbb{R}^m \\ x\neq 0}} \frac{\|Ax\|_n}{\|x\|_m} = \max_{\|x\|_m=1} \|Ax\|_n \,.$$

- *Sei A invertierbar. $\kappa(A) = ||A^{-1}||\,\|A\|$ heißt Konditionszahl.*

2.1 Sätze allgemein

- *A positiv definit $\Rightarrow$ A regulär und jede HU-Matrix positiv definit.*
- *Vertauschen von Spalten/Zeilen allein zerstört idR die Symmetrie.*
- *A streng diagonaldominant $\Rightarrow$ jeder Schritt der Gauß-Elimination ist Diagonaldominant.*

2.2 Sätze LU-Zerlegung

- *Die LU-Zerlegung von A existiert (und ist dann eindeutig) $\Leftrightarrow$ alle sind Hauptuntermatritzen regulär.*
- *A streng diagonaldominant $\Rightarrow$ LU-Zerlegung ist ohne Pivotisierung anwendbar und die relative Spaltenmaximumsstrategie liefert sofort das aktuelle Diagonalelement als Pivotelement.*
- *A streng diagonaldominant $\Rightarrow$ $A^{(k)}$ Matrix nach $k-1$-Schritten ist streng diagonaldominant.*
- *Die LU-Zerlegung vergrößert weder die Hülle noch das Band einer Matrix.*

2.3 Beispiele für Matrixnormen

(a) Matrixnorm zur $\|\cdot\|_1$-Norm heißt Spaltensummennorm,

$$\|A\|_1 := \max_{j=1,\dots,m} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

(b) Matrixnorm zur $\|\cdot\|_\infty$-Norm heißt Zeilensummennorm,

$$\|A\|_\infty := \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^{m} |a_{ij}| \,.$$

(c) Matrixnorm zur $\|\cdot\|_2$-Norm heißt Spektralnorm,

$$\|A\|_2 := \max_{\substack{x\in\mathbb{R}^m \\ \|x\|=1}} \|Ax\|_2 \,.$$

2.4 Sätze Matrixnorm

- *A invertierbar, λ EW von $A \Rightarrow 1/\lambda$ EW von A^{-1}.*
- *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch, so ist $\|A\|_2 = \max\{|\lambda_A|\}$.*
- *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$, so ist $\|A\|_2 = \sqrt{\|A^\top A\|_2}$.*
- *Sei A invertierbar und $||A^{-1}||\,\|B\| < 1$. Dann ist $A+B$ invertierbar und*

$$\left\|(A+B)^{-1}\right\| = \frac{||A^{-1}||}{1 - \|A^{-1}\|\,\|B\|}\,.$$

- *Sei A invertierbar, $b \neq 0$ und $||A^{-1}||\,\|\Delta A\| < 1$. Dann gilt für $\tilde{x} = x + \Delta x$ die Fehlerabschätzung*

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right). \quad \rtimes$$

- *A invertierbar $\Rightarrow \kappa(A) \ge 1$.*
- *A symmetrisch $\Rightarrow \kappa(A) = \dfrac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|}$.*
- *$\|A\| \ge |\lambda|$ für jede Norm und jeden Eigenwert.*

2.5 Cholesky Zerlegung

- *Sei A symmetrisch und positiv definit, dann existiert eine eindeutige Zerlegung $A = LL^\top$, wobei L linke untere Dreiecksmatrix mit $l_{ii} > 0$.*

3 Interpolation

- *Raum der Polynome vom Grad $\leq n$.*

$$\mathcal{P}_n = \left\{ p : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \,:\, p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j,\ a_j \in \mathbb{R} \right\}$$

- *Lagrangedarstellung zu den Daten (x_i, y_i)*

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j L_j(x), \qquad L_j(x) = \frac{1}{\prod\limits_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} (x_j - x_k)} \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} (x - x_k), \quad L_j(x_i) = \delta_{ij}.$$

- *Newtondarstellung zu den Daten (x_i, y_i)*

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j q_j(x), \qquad q_j(x) = \prod_{k=0}^{j-1} (x - x_k).$$

- *Idee Spline-Interpolation. Man bestimmt n Polynome vom Grad m mit $m << n$ auf den Teilintervallen $[x_{i-1}, x_i]$ für $i = 1, \ldots, n$.*
- *Eine Funktion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ mit $f \in C^{m-1}([a,b])$ und*

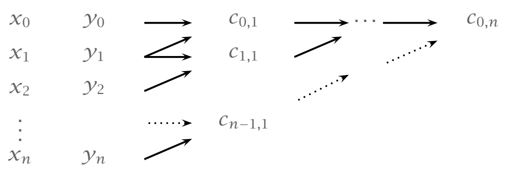
$$f\Big|_{[x_{i-1},x_i]} \in \mathcal{P}_m, \quad \text{für } i = 1, \ldots, n,$$

heißt Spline der Ordnung m zum Datensatz $X = (x_0, \ldots, x_n)$. Der Raum der Splines heißt S_m.

3.1 Sätze Polynominterpolation

- *Für (x_i, y_i), $i = 0, \ldots, n$ und $x_i \neq x_j$ hat die Interpolationsaufgabe genau eine Lösung.*
- *Formel der dividierten Differenzen, $c_{i,0} = y_i \Rightarrow c_k = c_{0,k}$,*

$$c_{i,j} = \frac{c_{i+1,j-1} - c_{i,j-1}}{x_{i+j} - x_i}.$$



1 Schema der Rekursionsformel für die Koeffizenten.

3.2 Approximationseigenschaften

- *Sei $p \in \mathcal{P}_n$ das Interpolationspolynom mit $p(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$, $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$ und $f \in C^{n+1}(\mathbb{R})$. Dann gilt*

$$\left| p(x) - f(x) \right| = \frac{1}{(n+1)!} \left| f^{n+1}(\xi)(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \right|$$

mit $\xi = \xi(x) \in [\min\{x, x_0, \ldots, x_n\}, \max\{x, x_0, \ldots, x_n\}]$.

3.3 Splines

- *Lineare Splines $(m = 1)$*

$$p_j(x) = y_j \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} + y_{j-1} \frac{x - x_j}{x_{j-1} - x_j}, \quad j = 1, \ldots, n$$

- *Kubische Splines $(m = 3)$*
  (a) *Natürlche Splines $p_1''(x_0) = 0$, $p_n''(x_n) = 0$.*
  (b) *Eingespannter Spline (Hermitsche Randb.) $p_1'(x_0) = \alpha$, $p_n'(x_n) = \beta$.*
  (c) *Periodische Splines. $p_1'(x_0) = p_n'(x_n)$, $p_1''(x_0) = p_n''(x_n)$.*

- *Natürliche Splines*

$$
\begin{aligned}
s(x) &= p_j(x) = a_j(x - x_{j-1})^3 + b_j(x - x_{j-1})^3 + c_j(x - x_{j-1}) + d_j,\\
M_j &= s''(x_j), \quad j = 0, \ldots, n\\
h_j &= x_j - x_{j-1}\\
a_j &= \frac{M_j - M_{j-1}}{6h_j}\\
b_j &= \frac{M_{j-1}}{2}\\
c_j &= \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - h_j\left(\frac{M_j}{6} + \frac{M_{j-1}}{3}\right)\\
d_j &= y_{j-1}.
\end{aligned}
$$

Da natürlich $M_0 = M_n = 0$,

$$
\begin{pmatrix}
2(h_1+h_2) & h_2 & & & \\
h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \ddots & \ddots & h_{n-1}\\
 & & & h_{n-1} & 2(h_{n-1}+h_n)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} M_1\\ \vdots\\ \vdots\\ \vdots\\ M_{n-1}\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\frac{6}{h_2}(y_2 - y_1) - \frac{6}{h_1}(y_1 - y_0)\\
\vdots\\
\vdots\\
\vdots\\
\frac{6}{h_n}(y_n - y_{n-1}) - \frac{6}{h_{n-1}}(y_{n-1} - y_{n-2})
\end{pmatrix}
$$

ist strikt diagonaldominant. Für äquidistante Stützstellen

$$
\begin{pmatrix}
4 & 1 & & \\
1 & \ddots & \ddots & \\
 & \ddots & \ddots & 1\\
 & & 1 & 4
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} M_1\\ \vdots\\ \vdots\\ M_{n-1}\end{pmatrix}
= \frac{6}{h^2}
\begin{pmatrix}
y_2 - 2y_1 + y_0\\
y_3 - 2y_2 + y_1\\
\vdots\\
y_n - 2y_{n-1} + y_{n-2}
\end{pmatrix}.
$$

3.4 Approximationseigenschaften von Splines

- *Interpolationsaufgabe: Finde $s \in S_3 \cap V_j$ mit*

$$
\begin{aligned}
& s''(a) = s''(b) = 0, && \text{(R1)}\\
& s'(a) = \alpha, (b) = \beta, \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \textit{ gegeben}, && \text{(R2)}\\
& s'(a) = s'(b),\ s''(a) = s''(b), && \text{(R3)}\\
& V_1 = \left\{ f \in C^2([a,b]) : f(x_j) = y_j, \quad \text{für } j = 0, \ldots, n \right\},\\
& V_2 = \{ f \in V_1 : f'(a) = \alpha,\ f'(b) = \beta \},\\
& V_3 = \{ f \in V_1 : f'(a) = f'(b),\ f''(a) = f''(b) \}.
\end{aligned}
$$

- *Sei $j \in \{1,2,3\}$, $s \in V_j \cap S_3$ die Splineinterpolation für $f \in V_j$ und $s''(a) = s''(b) = 0$ falls $j = 1$. Dann gilt*

$$
\int_a^b |s''(x)|^2 \, dx \le \int_a^b |f''(x)|^2 \, dx.
$$

D.h. s löst das Optimierungsproblem

$$
\min_{g \in V_j} \int_a^b |g''(x)|^2 \, dx.
$$

- *Sei $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$.*

$$
\begin{aligned}
& h = \max_{j=1,\ldots,n} |x_j - x_{j-1}|, \quad u \in C^k([a,b]) \textit{ mit } k < n,\\
& u(x_j) = 0, \quad j = 0, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

Dann gilt

$$
\begin{aligned}
& \left\| u^{(l)} \right\|_{L^2(a,b)} \le \frac{k!}{l!} h^{k-l} \left\| u^{(k)} \right\|_{L^2(a,b)}, && l = 0, 1, \ldots, k\\
& \left\| u^{(l)} \right\|_{L^\infty(a,b)} \le \frac{k!}{l!\sqrt{k}} h^{k-l-1/2} \left\| u^{(k)} \right\|_{L^2((a,b))}, && l = 0, 1, \ldots, k.
\end{aligned}
$$

- *Sei $s \in S_3(X)$ ein interpolierender Spline zu den Daten*

$$
(x_j, f(x_j)), \qquad j = 0, \ldots, n,
$$

mit $f \in C^2([a,b])$ und einer der Randbedingungen $(R1)$-$(R3)$.

Im Fall $(R2)$ *gelte,*

$$f'(a) = \alpha,\ f'(b) = \beta,$$

und im Fall $(R3)$,

$$f'(a) = f'(b),\ f''(a) = f''(b).$$

Dann gilt mit $h = \max\limits_{j=1,\dots,n} |x_j - x_{j-1}|$,

$$\left\|(s-f)^{(l)}\right\|_{L^2(a,b)} \le 2h^{2-l}\,\|f''\|_{L^2(a,b)}\,.$$

und

$$\left\|(s-f)^{(l)}\right\|_{L^\infty(a,b)} \le \sqrt{2}h^{2-l-1/2}\,\|f''\|_{L^2(a,b)}\,,$$

jeweils für $l = 0, 1$.

- *Die Spline-Interpolationsaufgabe, finde* $s \in S_3(X)$,

$$\begin{aligned} &\textit{mit } s(x_j) = y_j, \qquad \textit{für } j = 0, 1, \dots, n, \\ &\textit{mit } a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \end{aligned}$$

hat für jede der Randbedingungen $(R1)$-$(R3)$ *eine eindeutige Lösung.*

4 Numerische Integration

- *Quadraturformel mit Stützstellen* x_i *und Integrationsgewichten* ω_i,

$$\int\limits_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i).$$

- *Lagrange Darstellung*

$$\int\limits_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^n f(x_i) \underbrace{\int\limits_a^b L_i(x)\,\mathrm{d}x}_{\omega_i}, \qquad \omega_i = \int\limits_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\,\mathrm{d}x.$$

n	ω_i abgeschlossen		ω_i offen	
1	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	Trapezregel	1	Mittelpunktsregel
2	$\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}$	Simpson-Regel	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	
3	$\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$-Regel	$\frac{3}{8}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	

2 **Integrationsgewichte der abgeschlossenen und offenen Formeln für** $[a, b] = [0, 1]$

- *Man unterscheidet zwischen abgeschlossenen Newton-Cotes-Formeln*

$$x_0 = a,\ x_n = b,\ x_i = a + i \cdot h,\ h = \frac{b-a}{n},$$
$$Q(f) = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i),$$

und offenen Newton-Cotes-Formeln

$$x_1 = a + \frac{h}{2},\ x_n = b - \frac{h}{2},\ x_i = a + \frac{2i-1}{2}h,\ h = \frac{b-a}{n},$$
$$Q(f) = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i).$$

ω_i *siehe oben.*

- *Zusammengesetze Trapezregel.* $y_i = a + ih$, $i = 0, \dots, m$, $h = (b-a)/m$,

$$\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^m \int\limits_{y_{i-1}}^{y_i} p(x)\,\mathrm{d}x = \dots$$

- *Zusammengesetze Simpsonregel.* $y_i = a + 2ih$, $i = 0, \dots, m/2$, $h = (b-a)/m$,

$$\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^m \int\limits_{y_{i-1}}^{y_i} p(x)\,\mathrm{d}x = \dots$$

- *Eine Quadraturformel* $Q(f) = \sum\limits_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ *heißt symmetrisch, wenn*

$$x_{m-j} - x_j = a + b, \quad \omega_{m-j} = \omega_j, \quad j = 0, \dots, m.$$

- Q *für* $[a, b]$ *heißt exakt auf* $\mathcal{P}_k$, *falls* $Q(f) = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x,\ \forall\ p \in \mathcal{P}_k$.
- *Legendre Polynome sind skalierte, orthogonale Polynome auf* $[-1, 1]$,

$$p_n(x) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + \dots + c_0, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
$$p_0 = 1, p_1 = x, p_2 = x^2 - \frac{1}{3}, p_3 = x^3 - \frac{3}{5}$$

m	x_i	ω_i
2	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}$	$1, 1$
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}}, 0, \sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9}$
4	$x_4 = -x_1 = 0.861136311,$	$\omega_1 = \omega_4 = 0.3478548451$
	$x_3 = -x_2 = 0.339981$	$\omega_2 = \omega_3 = 0.6521451549$

3 **Integrationsgewichte der Gauß-Quadratur auf $[-1,1]$.**

- *Qauß'sche Quadraturformel auf* $[-1,1]$

$$Q(f) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i f(x_i), \qquad \omega_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{m} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,\mathrm{d}x.$$

4.1 Sätze für interpolatorische QF

- *Sei* $Q(f) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i f(x_i)$ *eine Quadraturformel für alle* $p \in \mathcal{P}_m$ *auf* $[a,b]$*, dann gilt für* $f \in C^{m+1}([a,b])$

$$\left| \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - Q(f) \right| \leq \frac{1}{(m+1)!} \left\| f^{(m+1)} \right\|_\infty \int_a^b \prod_{j=0}^{m} (x - x_j)\,\mathrm{d}x.$$

- *Q integriert Polynome $p(x) = x^k$ mit $k \in \mathbb{N}$ ungerade exakt.*
- *Sei Q symmetrisch und exakt auf $\mathcal{P}_{2l}$, $l \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, so ist Q exakt auf $\mathcal{P}_{2l+1}$.*
- *Eine Newton-Cotes-Formel*

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i f(x_i)$$

der Stufe m ist symmetrisch und exakt auf $\mathcal{P}_m$, falls m ungerade bzw. $\mathcal{P}_{m+1}$ falls m gerade.

- *Transformation $\omega_i \mapsto (b-a)\omega_i$, $x_i \mapsto a + (b-a)x_i$.*

Fehlerdarstellung von Peano *Sei $Q(f) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i f(x_i)$ eine auf $\mathcal{P}_k$ exakte Integrationsformel für $[a,b]$. Dann gilt für $f \in C^{k+1}([a,b])$*

$$Q(f) - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b K(t) f^{(k+1)}(t)\,\mathrm{d}t\,,$$

$$K(t) = \frac{1}{k!}\left[\sum_{i=0}^{m} \omega_i (x_i - t)_+^k - \int_a^b (x-t)_+^k\,\mathrm{d}x \right]$$

$$= \frac{1}{k!}\left[\sum_{i=0}^{m} Q\left(x \mapsto (x-t)_+^k\right) - \int_a^b (x-t)_+^k\,\mathrm{d}x \right].$$

- *Sei Q zusammengesetzt mit Q_j exakt auf $\mathcal{P}_k$, so gilt*

$$\left| Q(f) - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \right| \leq \sum_{j=1}^{n} \left| Q_j(f) - \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)\,\mathrm{d}x \right| \leq nCh^{k+2} \left\| f^{(k+1)} \right\|_\infty$$

$$= (b-a) \left\| f^{(k+1)} \right\|_\infty h^{k+1}. \qquad C \leq \frac{2}{k!}.$$

4.2 Sätze Gauss-Quadratur

- *Die Legendre-Polynome $\{p_0, \dots, p_n\}$ sind eindeutig und bilden eine Basis von $\mathcal{P}_n$.*
- *Für $q \in \mathcal{P}_{n-1}$ ist $\langle p_n, q \rangle = 0$.*
- *p_n hat n verschiedene Nullstellen in $(-1,1)$.*
- $p_n(x) = \dfrac{n!}{(2n)!} \dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[(x^2-1)^n\right]$.
- *Die Gauß'sche Quadraturformel ist exakt auf $\mathcal{P}_{2m-1}$.*
- *Transformation $\omega_i \mapsto \frac{b-a}{2}\omega_i$, $x_i \mapsto \frac{a+b}{2} + x_i\frac{b-a}{2}$.*
- *Fehlerabschätzung*

$$\left| Q(f) - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \right| \leq c_m \left| b-a \right|^{2m+1} \left\| f^{(2m)} \right\|_\infty. \qquad c_m \leq \frac{2}{(2m)!}$$

Zusammengesetzt

$$\left| Q(f) - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \right| \leq c_m \left| b-a \right| h^{2m} \left\| f^{(2m)} \right\|_\infty.$$

5 NLGS

- *Bisektionsverfahren. Start:* $[a_0, b_0] = [a, b]$.

Schritt $n \to n+1$*: Setze* $x_n = \frac{1}{2}(a_n + b_n)$

$$\begin{aligned}
&f(a_n)f(x_n) < 0 && \Rightarrow [a_{n+1}, b_{n+1}] = [a_n, x_n],\\
&f(a_n)f(x_n) = 0 && \Rightarrow x_n \text{ ist Lösung},\\
&\text{sonst} && \Rightarrow [a_{n+1}, b_{n+1}] = [x_n, b_n]
\end{aligned}$$

Für $x_n = \frac{1}{2}(b_n - a_n)$ *und jede Lösung* $x^* \in [a_n, b_n]$ *von* $f(x^*) = 0$ *gilt*

$$|x_n - x^*| \leq \frac{1}{2^{n+1}} |b_0 - a_0| .$$

- *Sekantenverfahren. Schritt* $n \to n+1$*. Bilde die Sekante* $s = s(x)$ *durch* $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$ *und* $(x_n, f(x_n))$ *und löse* $s(x) = 0 \Rightarrow x_{n+1}$.

Darstellung von $s(x)$*:*

$$\begin{aligned}
s(x) &= f(x_{n-1})\frac{x - x_n}{x_{n-1} - x_n} + f(x_n)\frac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} \stackrel{!}{=} 0,\\
\Rightarrow x_{n+1} &= \frac{f(x_n)x_{n-1} - f(x_{n-1})x_n}{f(x_n) - f(x_{n-1})}
\end{aligned}$$

- *Sei* $f \in C^2([a,b])$, $x^* \in (a,b)$ *Lösung von* $f(x) = 0$ *und* $f'(x^*), f''(x^*) \neq 0$.

Dann existiert ein $\delta > 0$*, so dass das Sekantenverfahren für alle Startwerte* $x_0,\ x_1 \in U_\delta(x^*)$ *konvergiert und es gilt*

$$|x_{n+1} - x^*| \leq C\,|x_n - x^*|^p, \qquad \text{für } n \geq 1$$

mit $p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$ *und* $C > 0$. ⋊

- *Newtonverfahren. Startwert sei* x_0*. Im Schritt* $n \mapsto n+1$ *konstruiere die Tangente des Graphen* $\{(x, f(x)) \in D\}$ *in* $(x_n, f(x_n))$*, Tangente* $\{(x, t(x)) : x \in D\}$ *und löse anschließend* $t(x_{n+1}) = 0$*. Es gilt*

$$\begin{aligned}
t(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) \stackrel{!}{=} 0\\
\Rightarrow x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}
\end{aligned}$$

Konvergenz des Newton-Verfahrens *Sei* $f \in C^2((a,b) \to \mathbb{R})$, $x^* \in (a,b)$, $f(x^*) = 0$, $f'(x^*) \neq 0$*. Dann existiert ein* $\delta > 0$ *so, dass das Newton-Verfahren für alle Startwerte* $x_0 \in U_\delta(x^*)$ *konvergiert und es gilt,*

$$|x_{n+1} - x^*| \leq C\,|x_n - x^*|^2, \quad \text{mit } C > 0.$$ ⋊

- *Fixpunktiteration.* $f(x) = 0 \Leftrightarrow x - \omega f(x) = x, \quad 0 \neq \omega \in \mathbb{R}$

Banachscher Fixpunktsatz *Sei* $D \subseteq \mathbb{R}^n$ *abgeschlossen,* $\phi : D \to D$ *eine Kontraktion, d.h.*

$$||\phi(x) - \phi(y)|| \leq L\,||x - y||, \qquad \forall\ x, y \in \mathrm{D},$$

mit $L < 1$*. Dann gilt*

(i) *Die Fixpunktgleichung* $x = \phi(x)$ *hat genau eine Lösung* $x^* \in D$.

(ii) *Die Fixpunktiteration ist gegeben durch*

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

und konvergiert für jeden Startwert $x^0 \in D$ *gegen* x^**. Es gelten die Fehlerabschätzungen,*

$$\begin{aligned}
||x^n - x^*|| &\leq \frac{L^n}{1-L}\left\|x^0 - x^1\right\|, && \text{a priori},\\
||x^n - x^*|| &\leq \frac{L}{1-L}\left\|x^n - x^{n-1}\right\|, && \text{a posteriori}.
\end{aligned}$$

- *Anwendung auf ein nichtlineares Gleichungssystem,*

$$f(x) = 0, \quad f : D \to \mathbb{R}^n, \quad D \subseteq \mathbb{R}^n.$$

Annahmen an f.

(i) f *ist lipschitz stetig, d.h.*

$$||f(x) - f(y)|| \leq L\,||x - y||, \quad \forall\ x, y \in D,\ L \in \mathbb{R}.$$

$L < 1$ *ist hier nicht verlangt.*

(ii) f *ist strikt monoton, d.h.*

$$(f(x) - f(y))(x - y) \geq \gamma\,||x - y||^2, \quad \forall\ x, y \in D,$$

mit $\gamma > 0$.

Transformiere

$$f(x) = 0 \Rightarrow x = x - \omega f(x) = \phi(x), \qquad \omega > 0.$$

ϕ ist Kontraktion,

$$||\phi(x) - \phi(y)||^2 \le \underbrace{\left(1 - 2\omega\gamma + \omega^2 L^2\right)}_{=:L_\omega^2} ||x - y||^2,$$

$$L_\omega < 1 \Leftrightarrow \omega < \frac{2\gamma}{L^2}.$$

L_ω minimal für $\omega_{opt} = \frac{\gamma}{L^2}$. Optimale Kontraktionsrate

$$L_{opt} = L_{\omega_{opt}} = \sqrt{1 - 2\frac{\gamma}{L^2}\gamma + \frac{\gamma^2}{L^4}L^2} = \sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{L^2}} < 1.$$

- *Sei $f \in C^1(D)$ und D offen. Dann ist f genau dann strikt monoton, wenn $\mathrm{D}f = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)_{i,j=1}^n$ gleichmäßig positiv definit ist, d.h.*

$$y^\top \mathrm{D}f(x) y \ge \gamma ||y||^2, \qquad \forall\ y \in \mathbb{R}^n\ \forall\ x \in D$$

mit γ unabhängig von x. $\rtimes$

- *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ lipschitzstetig mit Konstante L und strikt monoton mit Konstante $\gamma > 0$. Dann hat*

$$f(x) = 0$$

genau eine Lösung x^*. Das Iterationsverfahren

$$x^{n+1} = x^n - \omega f(x^n), \quad \text{mit } 0 < \omega < \frac{2\gamma}{L^2},$$

konvergiert für jedes $x^0 \in \mathbb{R}^n$ gegen x^* und es gilt

$$||x^n - x^*|| \le L_\omega^n \left|\left|x^0 - x^1\right|\right|$$

mit

$$L_\omega = \sqrt{1 - 2\omega\gamma + \omega^2 L^2}. \quad \rtimes$$

- *Ein Interationsverfahren,*

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

mit $\phi : D \to D$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt lokal konvergent gegen $x^* \in \mathbb{R}^n$ genau dann, wenn eine Umgebung U von x^* existiert, so dass die Folge $(x^n)_{n\ge 0}$ für jedes $x^0 \in U$ gegen x^* konvergiert.

Das Verfahren heißt global konvergent genau dann, wenn die Folge für jedes $x^0 \in D$ gegen x^* konvergiert.

Das Verfahren hat die Konvergenzordnung $p \ge 1$ genau dann, wenn

$$\exists\ c > 0 : \left|\left|x^{n+1} - x^*\right|\right| \le C\,||x^n - x^*||^p, \qquad \forall\ n \ge 0.$$

Dabei muss im Fall $p = 1$ auch $C < 1$ gelten. $\rtimes$

- *Global: Bisketion ($p = 1$), Fixpunkt ($p = 1$). Lokal: Sekanten ($p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$)), Newton ($p = 2$).*

- *Newtonverfahren im $\mathbb{R}^n$,*

$$f(x) = 0, \quad f : D \to \mathbb{R}^n, \quad D \subseteq D \subseteq \mathbb{R}^n.$$

Linearisierung

$$f(x) \approx f(x^n) + \mathrm{D}f(x^n)(x - x^n) =: T_f(x).$$

Berechnung von x^{n+1} aus

$$\begin{aligned} &T_f(x^{n+1}) = 0 \\ \Rightarrow &\mathrm{D}f(x^n)(x^{n+1} - x^n) = -f(x^n). \end{aligned}$$

Algorithmus für das Newton-Verfahren.

Start mit $x^0 \in D$
Schritt $n \to n+1$
 Löse
  $\mathrm{D}f(x^n)d^n = -f(x^n)$
 Setze
  $x^{n+1} = x^n + d^n$

Konvergenz des Newton Verfahrens im $\mathbb{R}^n$ *Sei $f \in C^2(D \to \mathbb{R}^n)$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f(x^*) = 0$ und $\det \mathrm{D}f(x^*) \ne 0$.*

Dann konvergiert das Newtonverfahren lokal gegen x^* mit Konvergenzordnung $p = 2$.

- *Dämpfung des Newtonverfahrens*

Schritt $n \to n+1$

Löse

$$Df(x^n)d^n = -f(x^n)$$

Wähle $\lambda \in (0,1]$ so, dass

$$\|f(x^n + \lambda_n d^n)\| \le \|f(x^n)\|.$$

Setze

$$x^{n+1} = x^n + \lambda_n d^n.$$

- Armijo-Regel zur Wahl von λ_n Seien $\alpha, \beta \in (0,1)$. Setze

$$\lambda_n = \alpha^k, \quad \text{mit } k = \min\left\{j \in \mathbb{N}_0 : \left\|f(x^n + x^j d^n)\right\| \le (1 - \beta\alpha^j)\,\|f(x^n)\|\right\} \quad \rtimes$$

- Abbruchkriterien

(i) $\|f(x^n)\| < \varepsilon$,

(ii) $\|x^{n+1} - x^n\| \le \varepsilon$,

(iii) $\|(Df(x^n))^{-1} f(x^n)\| < \varepsilon$. (Taylor)

6 Algorithmen

- Gauß-Elimination.

Für $i = 1 \dots n-1$ (Spalten)

Für $j = i+1, \dots, n$ (Zeilen)

$$l_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$$

Für $k = i+1, \dots, n$

$$a_{jk} = a_{jk} - l_{ji} \cdot a_{ik}$$

$$b_j = b_j + l_{ji} b_i$$

Rückwärtssubsitution.

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

Für $j = n-1, n-2, \dots, 1$

$$x_j = \tfrac{1}{a_{ji}}\left(b_j - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k\right)$$

Aufwand Mul/Div $\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$

Aufwand Rückwärtsauflösen $\frac{1}{2}(n^2 + n)$.

- LGS Lösung mit LU-Zerlegung.

1. LU-Zerlegung ($PAx = Pb$, bzw. $LUx = Pb$)

Für $i = 1, \dots, n-1$.

Bestimme einen Pivot-Index $p_i \in \{i, \dots, n\}$.

Falls $p_i \neq i$: Vertausche Zeilen i, p (*)

Für $j = i+1, \dots, n$

$$a_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$$

Für $k = i+1, \dots, n$

$$a_{jk} = a_{jk} - a_{ji} a_{ik}$$

Aufwand Mul/Div $\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$.

2. Berechnung von $Pb : b \mapsto Pb$.

Für $i = 1, \dots, n-1$

Falls $p_i \neq i$

vertausche b_i, b_{p_i}

3. Vorwärtssubstitution $Ly = Pb \Rightarrow y$.

$y_1 = b_1$

Für $i = 2, \dots, n$

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j$$

4. Rückwärtsauflösen $Ux = y \Rightarrow x$.

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$$

Für $i = n-1, \dots, 1$

$$x_i = \tfrac{1}{u_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j\right)$$

Aufwand Rückwärts/Vorwärts $\frac{n(n-1)}{2} + \frac{n(n+1)}{2} \approx n^2$.

- Bandmatritzen. Aufwand $\approx m_1 m_2 n$.
- Cholesky-Zerlegung

$l_{11} = \sqrt{a_{11}}$
Für $i = 2, \dots, n$
  Für $j = 1, \dots, i-1$
    $l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right)$
  $l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}.$

Aufwand Muldiv $\frac{1}{6} n^3 + \mathcal{O}(n^2) + n$ *Wurzeln.*
Zerlegung -> Vorwärtseinsetzen $Ly = b$ *-> Rückwärtsauflösen* $L^\top x = y$.

- *Newton Interpolation*

Für $i = 0, \dots, n$
  $c_i = y_i$
Für $j = 1, \dots, n$
  Für $i = n, n-1, \dots, j$
    $c_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{x_i - x_{i-j}}$

Aufwand Mul/Div $\frac{n(n-1)}{2}$.

- *Horner Schema*

$$p(x) = (\dots(c_n(x - x_{n-1}) + c_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots) + c_0$$

$p = c_n$
Für $k = n-1, n-2, \dots, 0$
  $p = p(x - x_k) + c_k$

Aufwand n *Mul/Div.*

- *Summenformeln*

$$\sum_{i=1}^{n-1} i^2 = \frac{(n-1)n(2n-1)}{6}$$
$$\sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{(n-1)n}{2}$$
$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^{n-k} y^k.$$