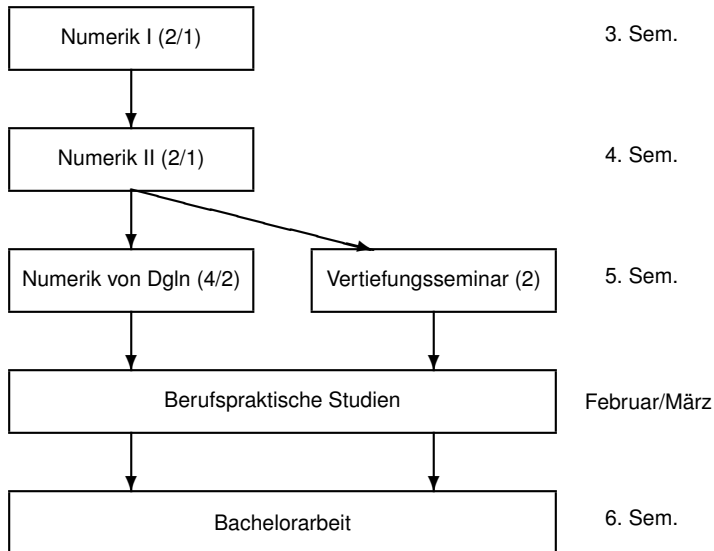


Begleitmaterial zur Vorlesung Numerik I

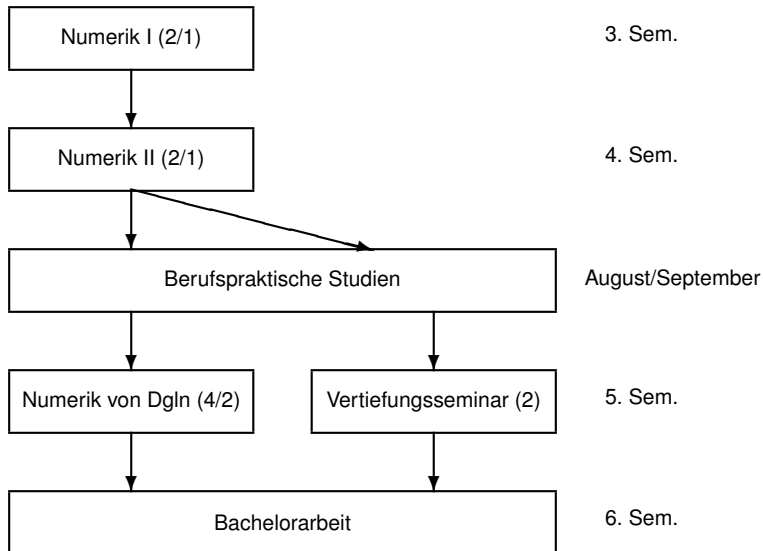
Andreas Meister

Universität Kassel, AG Analysis und Angewandte Mathematik

Studienplanung Bachelor Angewandte Mathematik, Version A



Studienplanung Bachelor Angewandte Mathematik, Version B



Numerik I

- 1 Grundlagen der linearen Algebra
- 2 Lineare Gleichungssysteme
- 3 Interpolation

Numerik II

- 1 Numerische Integration
- 2 Nichtlineare Gleichungen
- 3 Lineare Ausgleichsprobleme
- 4 Eigenwertprobleme

Definition 1.2:

Sei X ein komplexer beziehungsweise reeller linearer Raum. Eine Abbildung

$$\|\cdot\| : X \longrightarrow \mathbb{R}$$

mit den Eigenschaften

- (N1) $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ (Positivität)
- (N2) $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$ (Definitheit)
- (N3) $\|\alpha \cdot \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\| \quad \forall \mathbf{x} \in X, \forall \alpha \in \mathbb{C} \text{ (bzw. } \mathbb{R})$ (Homogenität)
- (N4) $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\| \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$ (Dreiecksungleichung)

nennt man eine Norm auf X . Ein linearer Raum X mit einer Norm heißt normierter Raum und wird mit $(X, \|\cdot\|)$ bezeichnet. Falls $X = \mathbb{C}^n$ beziehungsweise $X = \mathbb{R}^n$ gilt, so wird die Norm auch als Vektornorm bezeichnet.

Definition 1.4:

Eine Folge $\{\mathbf{x}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ von Elementen aus einem normierten Raum X heißt konvergent mit dem Grenzelement $\mathbf{x} \in X$, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ eine natürliche Zahl $N = N(\varepsilon)$ existiert, so dass

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}\| < \varepsilon \quad \forall n \geq N$$

gilt. Eine Folge, die nicht konvergiert, heißt divergent.

Definition 1.6:

Zwei Normen $\|\cdot\|_a$ und $\|\cdot\|_b$ auf einem linearen Raum X heißen äquivalent, wenn es reelle Zahlen $\alpha, \beta > 0$ gibt, so dass

$$\alpha\|\mathbf{x}\|_b \leq \|\mathbf{x}\|_a \leq \beta\|\mathbf{x}\|_b \quad \forall \mathbf{x} \in X \quad (1.1.1)$$

gilt. Die größte derartige Zahl α und die kleinste derartige Zahl β werden als Äquivalenzkonstanten bezeichnet.

Bemerkung 1.9:

Der Satz 1.8 ist für die Konvergenzuntersuchungen bei Iterationsverfahren sehr hilfreich. Sind wir in der Lage zu zeigen, dass ein Iterationsverfahren eine Vektorfolge $\{\mathbf{x}_m\}_{m \in \mathbb{N}}$ aus dem \mathbb{R}^n oder dem \mathbb{C}^n erzeugt, die in einer beliebigen Norm konvergiert, dann besagt der Satz, dass die Folge und somit das Verfahren in jeder Norm konvergiert und Korollar 1.7 liefert anschließend die Übereinstimmung der Grenzwerte.

Definition 1.10

Sei X ein normierter Raum. Eine Folge $\{\mathbf{x}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ aus X heißt Cauchy-Folge, wenn es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $N = N(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ derart gibt, dass

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| < \varepsilon \quad \forall n, m \geq N$$

gilt.

Definition 1.12

Eine Teilmenge V eines normierten Raumes X heißt vollständig, wenn jede Cauchy-Folge aus V gegen ein Grenzelement aus V konvergiert. Ein vollständiger normierter Raum heißt Banach-Raum.

Definition 1.14

Sei X ein komplexer oder reeller linearer Raum. Eine Abbildung

$$(\cdot, \cdot) : X \times X \longrightarrow \mathbb{C}$$

mit den Eigenschaften

- (H1) $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}_0^+ \quad \forall \mathbf{x} \in X$ (Positivität)
- (H2) $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$ (Definitheit)
- (H3) $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \overline{(\mathbf{y}, \mathbf{x})} \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$ (Symmetrie)
- (H4) $(\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \alpha(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + \beta(\mathbf{y}, \mathbf{z})$
 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in X \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ (Linearität)

heißt Skalarprodukt oder inneres Produkt auf X . Ein linearer Raum X versehen mit einem Skalarprodukt heißt Prä-Hilbert-Raum.

Definition 1.17

Seien X, Y normierte Räume mit den Normen $\|\cdot\|_X$ beziehungsweise $\|\cdot\|_Y$. Ein Operator $\mathbf{A} : X \rightarrow Y$ heißt

- 1 stetig an der Stelle $\mathbf{x} \in X$, falls für alle Folgen $\{\mathbf{x}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ aus X mit $\mathbf{x}_n \xrightarrow{\|\cdot\|_X} \mathbf{x}$ für $n \rightarrow \infty$

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_n \xrightarrow{\|\cdot\|_Y} \mathbf{A}\mathbf{x} \text{ für } n \rightarrow \infty$$

folgt.

- 2 stetig, falls \mathbf{A} an allen Stellen $\mathbf{x} \in X$ stetig ist.

Definition 1.17 (Fortsetzung)

Seien X, Y normierte Räume mit den Normen $\|\cdot\|_X$ beziehungsweise $\|\cdot\|_Y$. Ein Operator $\mathbf{A} : X \rightarrow Y$ heißt

1 linear, falls

$$\mathbf{A}(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}) = \alpha \mathbf{A}\mathbf{x} + \beta \mathbf{A}\mathbf{y} \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

gilt.

2 beschränkt, wenn \mathbf{A} linear ist und ein $C \geq 0$ existiert, so dass

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_Y \leq C \|\mathbf{x}\|_X \quad \forall \mathbf{x} \in X$$

gilt. Jede Zahl C mit dieser Eigenschaft heißt Schranke von \mathbf{A} .

Definition 1.20:

Zu einer gegebenen Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

heißt

$$\mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

die zu \mathbf{A} transponierte Matrix.

Definition 1.22:

Zu gegebener Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{m \times n}$$

heißt

$$\mathbf{A}^* = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \dots & \overline{a_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{a_{1n}} & \dots & \overline{a_{mn}} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{n \times m}$$

die zu \mathbf{A} adjungierte Matrix.

Definition 1.23:

Eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ heißt

- 1 hermitesch, falls $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$ gilt,
- 2 unitär, falls $\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{I}$ gilt,
- 3 normal, falls $\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*$ gilt,
- 4 ähnlich zur Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, falls eine reguläre Matrix $\mathbf{C} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit $\mathbf{B} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}$ existiert,
- 5 linke untere Dreiecksmatrix, falls $a_{ij} = 0 \quad \forall j > i$ gilt,
- 6 rechte obere Dreiecksmatrix, falls $a_{ij} = 0 \quad \forall j < i$ gilt,
- 7 Diagonalmatrix, falls $a_{ij} = 0 \quad \forall j \neq i$ gilt.

Definition 1.26:

Sei $X = \mathbb{R}^n$ beziehungsweise \mathbb{C}^n . Eine Matrix $\mathbf{A} : X \rightarrow X$ heißt

- 1 positiv semidefinit, falls $(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$ für alle $\mathbf{x} \in X$ gilt,
- 2 positiv definit, falls $(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x}) > 0$ für alle $\mathbf{x} \in X \setminus \{\mathbf{0}\}$ gilt,
- 3 negativ semidefinit, falls $-\mathbf{A}$ positiv semidefinit ist,
- 4 negativ definit, falls $-\mathbf{A}$ positiv definit ist.

Definition 1.27:

Ist $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und $\|\cdot\|_a : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine Norm, dann bezeichnet man

$$\|\mathbf{A}\|_a := \sup_{\|\mathbf{x}\|_a=1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_a \quad (1.2.3)$$

als die von der Vektornorm induzierte Matrixnorm.

Definition 1.30:

Eine komplexe Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt Eigenwert der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, falls ein Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ mit

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

existiert. Der Vektor \mathbf{x} heißt Eigenvektor zum Eigenwert λ .

Die Menge

$$\sigma(\mathbf{A}) = \{\lambda \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } \mathbf{A}\}$$

wird als Spektrum von \mathbf{A} bezeichnet.

Die Zahl

$$\rho(\mathbf{A}) = \max \{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$$

heißt Spektralradius von \mathbf{A} .

Korollar 1.32:

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ($\mathbb{R}^{n \times n}$) hermitesch (symmetrisch), dann existiert eine unitäre (orthogonale) Matrix $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ($\mathbb{R}^{n \times n}$), derart, dass

$$\mathbf{U}^* \mathbf{A} \mathbf{U} = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

gilt. Hierbei stellt für $i = 1, \dots, n$ jeweils $\lambda_i \in \mathbb{R}$ den Eigenwert der Matrix \mathbf{A} mit der i -ten Spalte von \mathbf{U} als zugehörigen Eigenvektor dar.

Definition 1.36:

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ regulär, dann heißt

$$\text{cond}_a(\mathbf{A}) := \|\mathbf{A}\|_a \|\mathbf{A}^{-1}\|_a$$

die Konditionszahl der Matrix \mathbf{A} bezüglich der induzierten Matrixnorm $\|\cdot\|_a$.

Satz 1.38:

Seien \mathbf{A} regulär, \mathbf{x} die Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ und $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ die Lösung von $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$, dann gilt

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \text{cond}(\mathbf{A}) \frac{\|\Delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

Definition 1.40:

Ein Element \mathbf{x} einer Menge $D \subset X$ heißt Fixpunkt eines Operators $F : D \subset X \rightarrow X$, falls

$$F(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$$

gilt.

Definition 1.41

Sei X ein normierter Raum. Ein Operator

$$F : D \subset X \rightarrow X$$

heißt kontrahierend, wenn eine Zahl $0 \leq q < 1$ mit

$$\|F(\mathbf{x}) - F(\mathbf{y})\| \leq q \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$$

existiert. Die Zahl q heißt Kontraktionszahl des Operators F .

Banachscher Fixpunktsatz 1.43:

Sei D eine vollständige Teilmenge eines normierten Raumes X und $F : D \rightarrow D$ ein kontrahierender Operator, dann existiert genau ein Fixpunkt $\mathbf{x} \in D$ von F , und die durch

$$\mathbf{x}_{n+1} = F(\mathbf{x}_n) \text{ für } n = 0, 1, 2, \dots$$

gegebene Folge konvergiert für jeden Startwert $\mathbf{x}_0 \in D$ gegen \mathbf{x} . Es gelten zudem die *a priori* Fehlerabschätzung

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}\| \leq \frac{q^n}{1 - q} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$$

und die *a posteriori* Fehlerabschätzung

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}\| \leq \frac{q}{1 - q} \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\|,$$

Definition 2.1:

Ein Iterationsverfahren ist gegeben durch eine Abbildung

$$\phi : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$$

und heißt linear, falls Matrizen $\mathbf{M}, \mathbf{N} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ derart existieren, dass

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = \mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{N}\mathbf{b}$$

gilt. Die Matrix \mathbf{M} wird als Iterationsmatrix der Iteration ϕ bezeichnet.

Beispiel 2.3:

Triviales Verfahren

m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \ \mathbf{x}_m - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\ _\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100e+01	-1.900e+01	2.000e+01	
10	8.116e-01	8.116e-01	1.883e-01	7.000e-01
40	9.999e-01	9.999e-01	4.244e-06	7.000e-01
70	1.000e-00	1.000e-00	9.566e-11	7.000e-01
96	1.000e-00	1.000e-00	8.881e-15	6.956e-01

Beispiel 2.3:

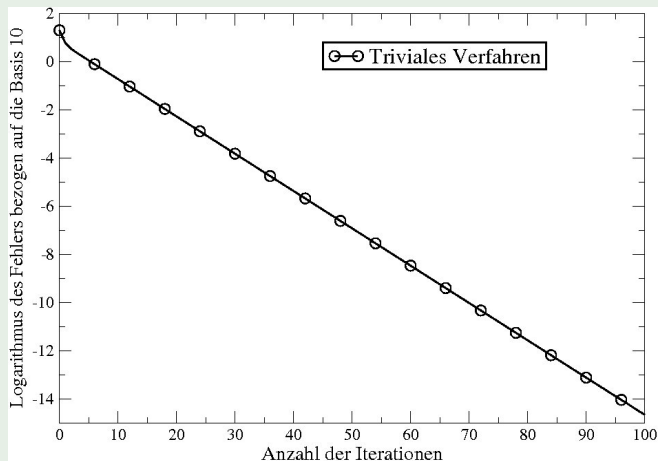


Abbildung: Konvergenzverlauf $\log_{10} \varepsilon_m$ des trivialen Verfahrens

Definition 2.4:

Einen Vektor $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^n$ bezeichnen wir als Fixpunkt des Iterationsverfahrens $\phi : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ zu $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$, falls

$$\tilde{\mathbf{x}} = \phi(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{b})$$

gilt.

Definition 2.5:

Ein Iterationsverfahren ϕ heißt konsistent zur Matrix \mathbf{A} , wenn für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ die Lösung $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ ein Fixpunkt von ϕ zu \mathbf{b} ist, das heißt

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \phi(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}, \mathbf{b})$$

gilt.

Definition 2.8:

Ein Iterationsverfahren ϕ heißt konvergent, wenn für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ und alle Startwerte $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ ein vom Startwert unabhängiger Grenzwert

$$\tilde{\mathbf{x}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}_m = \lim_{m \rightarrow \infty} \phi(\mathbf{x}_{m-1}, \mathbf{b})$$

existiert.

Satz 2.10

Sei ϕ ein konvergentes und zur Matrix \mathbf{A} konsistentes lineares Iterationsverfahren, dann erfüllt das Grenzelement $\tilde{\mathbf{x}}$ der Folge

$$\mathbf{x}_m = \phi(\mathbf{x}_{m-1}, \mathbf{b}) \text{ für } m = 1, 2, \dots$$

für jedes $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ das Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.

Satz 2.13:

Erfüllt die reguläre Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n$ das starke Zeilensummenkriterium

$$q_\infty := \max_{i=1, \dots, n} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} < 1$$

oder das starke Spaltensummenkriterium

$$q_1 := \max_{k=1, \dots, n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} < 1$$

oder das Quadratsummenkriterium

$$q_2 := \sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^n \left(\frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} \right)^2 < 1,$$

dann konvergiert das Jacobi-Verfahren bei beliebigem Startvektor $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ und für beliebige rechte Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ gegen $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$.

Beispiel 2.14:

Jacobi Verfahren

m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \ \mathbf{x}_m - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\ _\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100e+01	-1.900e+01	2.000000e+01	
15	9.996e-01	1.000e+00	3.725165e-04	5.714e-01
30	1.000e+00	1.000e-00	4.856900e-09	4.000e-01
45	1.000e-00	1.000e+00	9.037215e-14	5.700e-01
48	1.000e+00	1.000e-00	8.437695e-15	4.086e-01

Beispiel 2.14:

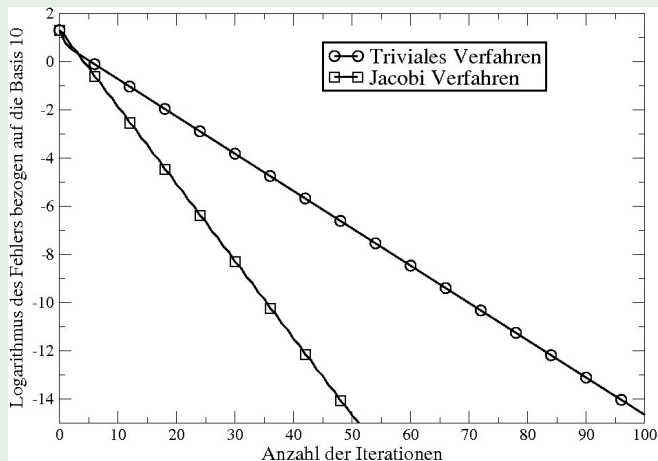


Abbildung: Konvergenzverlauf $\log_{10} \varepsilon_m$ des Jacobi-Verfahrens

Definition 2.16:

Eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ heißt reduzibel oder zerlegbar, falls eine Permutationsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ derart existiert, dass

$$\mathbf{PAP}^T = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}_{11} & \tilde{\mathbf{A}}_{12} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{A}}_{22} \end{pmatrix}$$

mit $\tilde{\mathbf{A}}_{ij} \in \mathbb{C}^{n_i \times n_j}$, $n_i > 0$, $i = 1, 2$, $n_1 + n_2 = n$ gilt. Andernfalls heißt \mathbf{A} irreduzibel oder unzerlegbar.

Satz 2.18:

Sei die reguläre Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ irreduzibel und diagonaldominant, das heißt, es gilt

$$\max_{i=1, \dots, n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} \leq 1, \quad (2.1.8)$$

und es existiere ein $k \in \{1, \dots, n\}$ mit

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{|a_{kj}|}{|a_{kk}|} < 1, \quad (2.1.9)$$

dann konvergiert das Jacobi-Verfahren bei beliebigem Startvektor $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ und für jede beliebige rechte Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ gegen $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$.

Satz 2.20:

Sei die reguläre Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit $a_{ii} \neq 0$ für $i = 1, \dots, n$ gegeben. Erfüllen die durch

$$p_i = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} p_j + \sum_{j=i+1}^n \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} \text{ für } i = 1, 2, \dots, n$$

rekursiv definierten Zahlen p_1, \dots, p_n die Bedingung

$$\rho := \max_{i=1, \dots, n} p_i < 1,$$

dann konvergiert das Gauß-Seidel-Verfahren bei beliebigem Startvektor \mathbf{x}_0 und für jede beliebige rechte Seite \mathbf{b} gegen $\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$.

Beispiel 2.21:

Gauß-Seidel-Verfahren

m	$x_{m,1}$	$x_{m,2}$	$\varepsilon_m := \ \mathbf{x}_m - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\ _\infty$	$\varepsilon_m/\varepsilon_{m-1}$
0	2.100e+01	-1.900e+01	2.000e+01	
5	9.688e-01	9.875e-01	3.119e-02	2.2857e-01
10	9.999e-01	9.999e-01	1.946e-05	2.2857e-01
15	1.000e-00	1.000e-00	1.214e-08	2.2857e-01
20	1.000e-00	1.000e-00	7.575e-12	2.2857e-01
25	1.000e-00	1.000e-00	4.551e-15	2.2043e-01

Beispiel 2.21:

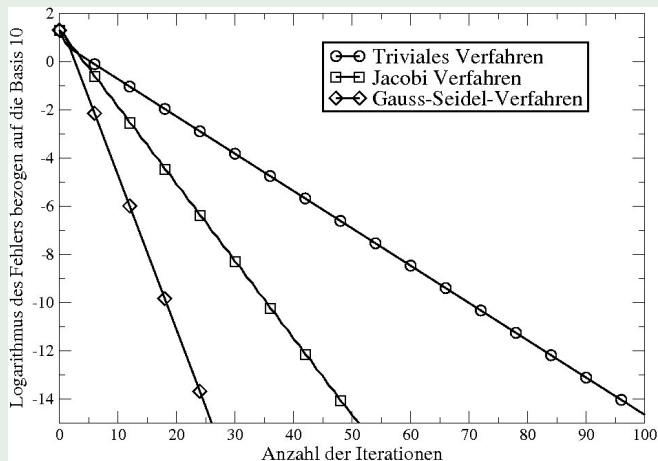


Abbildung: Konvergenzverlauf $\log_{10} \epsilon_m$ des Gauß-Seidel-Verfahrens

Definition 2.30:

Die Zerlegung einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ in ein Produkt

$$\mathbf{A} = \mathbf{LR}$$

aus einer linken unteren Dreiecksmatrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einer rechten oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt

LR-Zerlegung.

Algorithmus Gauß-Elimination I

- $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$
- Für $k = 1, \dots, n - 1$
 - Wähle aus der k -ten Spalte von $\mathbf{A}^{(k)}$ ein beliebiges Element $a_{jk}^{(k)} \neq 0$ mit $j \geq k$.
 - Definiere \mathbf{P}_{kj} mit obigem j und k gemäß (2.2.4).
 - $\tilde{\mathbf{A}}^{(k)} := \mathbf{P}_{kj} \mathbf{A}^{(k)}$
 - Definiere \mathbf{L}_k gemäß (2.2.5) mit $l_{ik} = \tilde{a}_{ik}^{(k)} / \tilde{a}_{kk}^{(k)}$, $i = k + 1, \dots, n$.
 - $\mathbf{A}^{(k+1)} := \mathbf{L}_k \tilde{\mathbf{A}}^{(k)}$

Lemma 2.32:

Seien $\ell_i = (0, \dots, 0, \ell_{i+1,i}, \dots, \ell_{n,i})^T \in \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^n$ der i -te Einheitsvektor, dann gilt für $\mathbf{L}_i = \mathbf{I} - \ell_i \mathbf{e}_i^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$

1 $\mathbf{L}_i^{-1} = \mathbf{I} + \ell_i \mathbf{e}_i^T.$

2 $\mathbf{L}_1^{-1} \mathbf{L}_2^{-1} \dots \mathbf{L}_k^{-1} = \mathbf{I} + \sum_{i=1}^k \ell_i \mathbf{e}_i^T$ für $k = 1, \dots, n-1.$

Definition 2.35:

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben, dann heißt

$$\mathbf{A}[k] := \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k} \text{ für } k \in \{1, \dots, n\}$$

die führende $k \times k$ -Hauptabschnittsmatrix von \mathbf{A} und $\det \mathbf{A}[k]$ die führende $k \times k$ -Hauptabschnittsdeterminante von \mathbf{A} .

Definition 2.40:

Die Zerlegung einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ in ein Produkt

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$$

aus einer unitären Matrix \mathbf{Q} und einer rechten oberen Dreiecksmatrix \mathbf{R} heißt QR-Zerlegung.

Satz 2.41 (Existenz der QR-Zerlegung):

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}(\mathbb{R}^{n \times n})$ eine reguläre Matrix, dann existieren eine unitäre (orthogonale) Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}(\mathbb{R}^{n \times n})$ und eine rechte obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{n \times n}(\mathbb{R}^{n \times n})$ derart, dass

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$$

gilt.

QR-Zerlegung nach Gram-Schmidt

- Für $k = 1, \dots, n$
 - Für $i = 1, \dots, k - 1$
 - $r_{ik} = (\mathbf{a}_k, \mathbf{q}_i)$
 - $\tilde{\mathbf{q}}_k = \mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik} \mathbf{q}_i$
 - $r_{kk} = \|\tilde{\mathbf{q}}_k\|_2$
 - $\mathbf{q}_k = \tilde{\mathbf{q}}_k / r_{kk}$

Satz 2.43:

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ regulär, dann existiert zu je zwei QR-Zerlegungen

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1 = \mathbf{A} = \mathbf{Q}_2 \mathbf{R}_2 \quad (2.2.15)$$

eine unitäre Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit

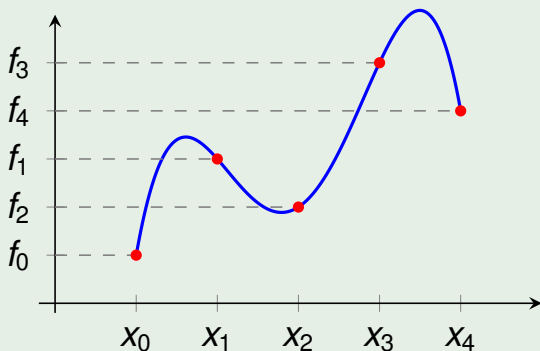
$$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_2 \mathbf{D} \quad \text{und} \quad \mathbf{R}_2 = \mathbf{D} \mathbf{R}_1.$$

Korollar 2.44:

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ regulär, dann existiert genau eine QR-Zerlegung der Matrix \mathbf{A} derart, dass die Diagonalelemente der Matrix \mathbf{R} reell und positiv sind.

Grundproblem

Aus einer Menge M_n von Funktionen bestimme man eine Funktion, die durch gegebene Punkte $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n) \in \mathbb{R}^2$ verläuft.



Anwendungsprobleme

- Interpolation von zeit- oder ortsabhängigen Messwerten zur näherungsweise Ermittlung von Daten für Zeiten und Orte zu denen keine Messungen vorliegen
- Konstruktion von Schiffsrümpfen, Schienenwegen, etc. Hierbei sollen gewisse „Oberflächenpunkte“ angenommen werden und gute Glattheitseigenschaften der „Oberfläche“ erzielt werden

Anwendungsprobleme

- Zur Lösung von Differentialgleichungen $y'(t) = f(t, y(t))$ nutzt man häufig numerische Integrationsverfahren, im folgenden Rahmen

- 1 Integration der Differentialgleichung

$$y(t + \Delta t) - y(t) = \int_t^{t+\Delta t} f(t, y(t)) dt$$

- 2 Approximation von f durch ein Interpolationspolynom p
- 3 Exakte Integration von p

Insgesamt

$$y(t + \Delta t) \approx y(t) + \int_t^{t+\Delta t} p(t) dt$$

Interpolationsproblem

Gegeben: $n + 1$ Stützpunkte $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n) \in \mathbb{R}^2$
an paarweise verschiedenen Stützstellen
 $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$

Gesucht: $p \in \Pi_n := \{p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots, a_nx^n\}$
mit $p(x_k) = f_k, \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (3.1.2)$

Ein Polynom, das das Interpolationsproblem löst, wird als Interpolationspolynom oder interpolierendes Polynom bezeichnet.

Theoretische Fragestellungen

- (A1) Existenz interpolierender Polynome
- (A2) Eindeutigkeit interpolierender Polynome

Algorithmische Fragestellungen

- (B1) Die Berechnung und Auswertung des Interpolationspolynoms sollen stabil gegenüber auftretenden Rundungsfehlern sein.
- (B2) Die nachträgliche Integration weiterer Stützpunkte soll effizient bezüglich des Rechenaufwandes sein.
- (B3) Die Berechnung des Interpolationspolynoms soll $\mathcal{O}(n^2)$ arithmetische Operationen aufweisen.
- (B4) Die Auswertung des Interpolationspolynoms an einer beliebigen Stelle soll $\mathcal{O}(n)$ Operationen benötigen.

Definition 3.4:

Zu gegebenen $n + 1$ paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ heißen die durch

$$L_j(x) = \prod_{\substack{s=0 \\ s \neq j}}^n \frac{x - x_s}{x_j - x_s} \quad (3.1.9)$$

für $j = 0, \dots, n$ definierten Polynome $L_j \in \Pi_n$ Lagrangesche Basispolynome.

Satz 3.6: (Lagrange Interpolationsformel)

Zu beliebigen $n + 1$ Stützpunkten $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n) \in \mathbb{R}^2$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ besitzt die eindeutig bestimmte Lösung des Interpolationsproblems (3.1.2) die Darstellung

$$p(x) = \sum_{j=0}^n f_j L_j(x) \quad (3.1.11)$$

mit $L_j \in \Pi_n$ laut Definition 3.4.

Definition 3.10:

Seien $j, m \in \mathbb{N}_0$, dann bezeichne

$p_{j,j+1,\dots,j+m} \in \Pi_m$ das zu den Stützpunkten $(x_j, f_j), \dots, (x_{j+m}, f_{j+m})$

mit paarweise verschiedenen Stützstellen x_j, \dots, x_{j+m} gehörende, eindeutig bestimmte Polynom mit

$$p_{j,j+1,\dots,j+m}(x_k) = f_k, \quad k = j, j+1, \dots, j+m. \quad (3.1.15)$$

Satz 3.11:

Seien $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$ vorgegebene Stützpunkte zu paarweise verschiedenen Stützstellen x_0, \dots, x_n , dann gilt mit $j, m \in \mathbb{N}_0, j+m \leq n$ und $m \geq 1$ für die Interpolationspolynome gemäß Definition 3.4 der Zusammenhang

$$p_{j,j+1,\dots,j+m}(x) = \frac{(x-x_j)p_{j+1,\dots,j+m}(x) - (x-x_{j+m})p_{j,\dots,j+m-1}(x)}{x_{j+m} - x_j}. \quad (3.1.16)$$

Schematische Darstellung des Neville-Schemas (3.1.17):

$$\begin{array}{ccccccc} f_0 = p_0(x) & & & & & & \\ & \searrow & & & & & \\ f_1 = p_1(x) & \rightarrow & p_{0,1}(x) & & & & \\ & \searrow & & \searrow & & & \\ f_2 = p_2(x) & \rightarrow & p_{1,2}(x) & \rightarrow & p_{0,1,2}(x) & & \\ & \vdots & & & & \ddots & \\ & & \vdots & & & & \\ f_{n-1} = p_{n-1}(x) & \rightarrow & p_{n-2,n-1}(x) & \dots\dots\dots & p_{0,\dots,n-1}(x) & & \\ & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\ f_n = p_n(x) & \rightarrow & p_{n-1,n}(x) & \rightarrow & p_{n-2,\dots,n}(x) \cdots p_{1,\dots,n}(x) & \rightarrow & p_{0,\dots,n}(x) \end{array}$$

Definition 3.13:

Zu gegebenen Stützpunkten $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n) \in \mathbb{R}^2$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ sind die *dividierten Differenzen* rekursiv durch

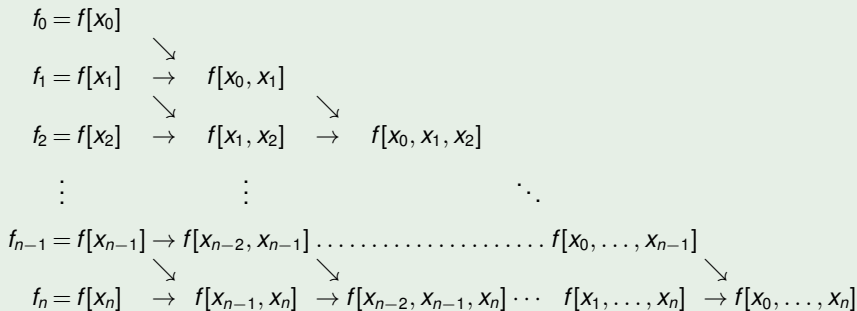
$$f[x_j] = f_j \quad (3.1.20)$$

für $j = 0, \dots, n$ und

$$f[x_j, \dots, x_{j+m}] = \frac{f[x_{j+1}, \dots, x_{j+m}] - f[x_j, \dots, x_{j+m-1}]}{x_{j+m} - x_j} \quad (3.1.21)$$

für $j = 0, \dots, n-1$ mit $m \in \mathbb{N}$ und $j+m \leq n$ definiert.

Schematische Darstellung der dividierten Differenzen (3.1.22):



Satz 3.14: (Newtonsche Interpolationsformel)

Zu gegebenen Stützpunkten $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n) \in \mathbb{R}^2$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ besitzt das Interpolationspolynom $p \in \Pi_n$ die Darstellung

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1}),$$

wobei $f[x_0, \dots, x_j]$, $j = 0, \dots, n$, die dividierten Differenzen laut Definition 3.13 repräsentieren.

Satz 3.16:

Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine $(n + 1)$ -mal stetig differenzierbare Funktion und $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ paarweise verschiedene Stützstellen. Für das Interpolationspolynom $p \in \Pi_n$ mit

$$p(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, \dots, n$$

gilt für jede Stelle $\bar{x} \in [a, b]$ die Fehlerdarstellung

$$f(\bar{x}) - p(\bar{x}) = \frac{w(\bar{x})f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (3.1.28)$$

mit einer Zwischenstelle $\xi = \xi(\bar{x}) \in [a, b]$ und

$$w(x) = (x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_n).$$