Einführende Bemerkungen anhand von Beispielen

Bestapproximation und Ausgleichsprobleme

Typische Fragestellungen

Bestmögliche Approximation einer Funktion f durch „einfache“ Funktionen u.
Paramterisierung von Messergebnissen durch Parameter-Fitting.
Beispiele.

Bestapproximation in normierten und Prähilberträumen

Best–Approximation in normierten Räumen

$u \in U: \quad \|u - f\| \leq \|v - f\| \quad \forall v \in U, \qquad U \subset V,\ U$ endlich–dimensional.
Satz: Existenz (Kompaktheitsargument).
Satz: Eindeutigkeit in strikt konvexen Räumen.

Prähilberträume

Skalarprodukt, Cauchy–Schwarzsche Ungleichung, Norm, Parallelogrammgleichung.
Beispiele: $\mathbb{R}^n$ mit euklidischem Skalarprodukt; $C[a, b]$ mit L^2–Skalarprodukt. Satz: Prähilberträume sind strikt konvex.
Folgerung: Die Bestapproximationsaufgabe ist eindeutig lösbar.

Normalengleichung

Die Bestapproximation in Prähilberträumen ist äquivalent zu
$u \in U: \qquad (u - f, v) = 0 \qquad \forall v \in U$
Analytische Interpretation: Verschwinden der Fréchèt-Ableitung im Minimum.

Berechnung der Bestapproximation in Prähilberträumen

Normalengleichung und Orthogonalprojektion

Geometrische Interpretation: Orthogonalität.

Mathematische Abstraktion: Orthogonalprojektionen.

Normalengleichung und Basisdarstellung

Wahl einer Basis in U nebst Einsetzen der Basisdarstellung in die Normalengleichung:

Lineares Gleichungssystem mit Gramsche Matrix für die Koeffizienten (u_i) von u.

Wahl der Basis: Polynomapproximation $\mathcal{P}_n \subset (C[a,b], \|\cdot\|_2)$

Monomiale Basis: Exponentiell wachsende Kondition (vgl. Hilbert–Matrix).

Wahl der Basis: Orthogonal– und Orthonormalbasen

Definition + Beispiel: Trigonometrische Funktionen.

Gram–Schmidt–Orthogonalisierung.

Orthogonalpolynome:

Eindeutigkeit bis auf Normierung, 3–Term–Rekursion, Legendre–Polynome.

FE- und Wavelet-Approximation in $(L^2[0,1], \|\cdot\|_2)$

Stückweise lineare finite Elemente $\mathcal{S}_n$
Knotenbasis (Dachfunktionen):
lokaler Träger aber keine Orthogonalbasis.
Skalierte Gramsche Matrix M, $\kappa_\infty(M) \leq 3$ (unabhängig von n!).

Haar-Wavelets $\mathcal{H}_n$
Wavelet-Basis: Skalierung und Translation des Mutter-Wavelets.
lokaler Träger und Orthogonalbasis.
Erweiterungen: Differenzierbarkeit, ...
Anwendungen: Datenkompression (mp3, jpeg, ...)

Bestapproximation und Lineare Ausgleichsprobleme

Tschebyscheff–Approximation $\mathcal{P}_n \subset (C[a,b], \|\cdot\|_\infty)$
Existenz und Eindeutigkeit (spezielle Theorie).
Spezialfall $f(x) = x^{n+1}$: Tschebyscheff–Polynome 1. Art.

Lineare Ausgleichsprobleme
Wahl der Euklidischen Norm: Methode der kleinsten Fehlerquadrate.
Lineare Ausgleichsprobleme als Bestapproximation von b durch $u \in R(A)$.
Normalengleichung $A^T A x = A^T b$, Existenz und Eindeutigkeit für injektive A.
Konditionsbetrachtungen für $m = n$: $\kappa_2(A^T A) = (\kappa_2(A))^2 \geq \kappa_2(A)$.
Folgerung: Im fast–rangdefekten Fall ($\kappa_2(A) \gg 1$) Normalengleichung vermeiden.

Orthogonalisierungsverfahren und QR–Zerlegung

Orthogonalisierungsverfahren

Grundidee: Lineare Ausgleichsprobleme sind invariant unter Orthogonaltransformationen.
Direkte Lösung durch QR–Zerlegung von A. Achtung: $\kappa_2(R) = \kappa_2(A)$ falls $m = n$!

Householder–Reflexionen

Motivation: Spiegelung an einer Geraden mit Normalenvektor v.
Matrixdarstellung: $Q_v = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$ (dyadisches Produkt, Rang–1–Matrix).

Elimination durch Householder–Reflexionen

Gegeben $a \in \mathbb{R}^m$. Setze $v = a - \alpha e_1$, $\alpha = -\mathrm{sign}(a_1)\|a\|_2$. Dann ist $Q_v a = \alpha e_1$.

QR–Zerlegung durch Householder–Reflexionen

Sukzessive Elimination der Subdiagonal–Elemente
$A \in \mathbb{R}^{m\times n} \to Q_1 A \to Q_2 Q_1 A \to \cdots \to Q_{n-1} \cdots Q_2 Q_1 A =: R \in \mathbb{R}^{m\times n}$
Ergebnis: QR–Zerlegung $A = QR$ mit $Q^T = Q_{n-1} \cdot \ \cdots \ \cdot Q_1$.

Taylorsche Formel und Hermite–Interpolation

Grundlegende Resultate zur Polynom–Interpolation:
Existenz, Eindeutigkeit, Kondition, Lagrange – und Newton–Darstellung, Kondition, Fehlerformel.

Das Taylor–Polynom als Lösung einer Hermite–Interpolationsaufgabe:
Das Taylor–Polynom interpoliert Funktionswert und Ableitungen in x_0.
Allgemeines Hermite–Interpolationsproblem. Beispiele.
Analogien von Taylor–Polynom und Newtonschem Interpolationspolynom.

Dividierte Differenzen für konfluente Stützstellen:
Darstellung der dividierten Differenzen durch die Hermite–Genocchi–Formel.
Erweiterte Definition der dividierten Differenzen durch die Hermite–Genocchi–Formel.
Beispiel.

Hermite–Interpolation

Eigenschaften verallgemeinerter dividierter Differenzen:
Stetigkeit und Mittelwerteigenschaft.

Hermite–Interpolation:
Existenz, Eindeutigkeit, verallgemeinerte Newton-Darstellung und Fehlerformel.

Approximationseigenschaften der Polynominterpolation:
$f \in C^\infty(\Omega)$ und $\|f^{(n)}\|_\infty \leq C \ \forall n \in \mathbb{N}$: Exponentielle Konvergenz.
Gegenbeispiel (Runge): Divergenz für $f(x) = 1/(1 + x^2)$.
Interpolationsfehler $\leq (1 + \Lambda_n) *$ Approximationsfehler.
Sätze von Weierstraß und Faber: Lebesgue-Konstante $\Lambda_n \to \infty$

Stützstellenwahl und Splines

Einfluß der Stützstellen auf den Interpolationsfehler
Mindestwachstum: $\Lambda_n \geq c + C(\log(n+1)$, $c \approx 0.9625$.
Äquidistante Stützstellen: exponentielles Wachstum von Λ_n.
Tschebyscheff–Stützstellen: $\Lambda_n \leq 1 + C(\log(n+1)$.
Fast optimale Lebesgue-Konstante!

Stückweise lineare Interpolation
Quadratische Konvergenz falls $f \in C^2[a,b]$, Lösungsdarstellung mittels „Knotenbasis“.

Splines m–ter Ordnung
„glatte“ Übergangsbedingungen: $S_\Delta^m = \{v \in C^{m-1} \mid v|_{I_k} = p_k \in \mathcal{P}_m\}$.
Dimension von S_Δ^m: $n+m$.
Spline-Interpolation: Eindeutigkeit durch $m-1$ Zusatzbedingungen.

Kubische Splines

Extremaleigenschaft kubischer Splines
Im Falle vollständiger, natürlicher oder periodischer Randbedingen gilt

$$\|(\phi_n f)''\| \leq \|f''\| \; \forall f \in C^2[a,b].$$

Berechnung vollständiger kubischer Splines
Taylor–artiger Ansatz:
$s_n(x) = a_k + b_k(x - x_k) + \frac{c_k}{2}(x - x_k)^2 + \frac{d_k}{2}(x - x_k)^3\,, \quad x \in I_{k+1}$
Berechnung der Koeffizienten a_k, b_k, d_k aus den Momenten $c_k = (\phi_n f)''(x_k)$.

Spline–Berechnung und Bestapproximation
Definition von $P : C^2[a,b] \to \mathcal{S}_h$ so, daß $P(f'') = (\phi_n f)''$.
Beobachtung: Pg ist die Bestapproximation von g aus $\mathcal{S}_h$.
Berechnung von $(\phi_n f)'' = Pf''$ aus der Normalengleichung.

Interpolationsfehler bei vollständigen, kubischen Splines

Fehlerabschätzung:
Beschränktheit von $\|P\|_\infty \leq 3$,
Fehlerabschätzung für stückweise lineare Interpolation: $\|f'' - (\phi_n f)''\|_\infty = \mathcal{O}(h^2)$.
Zusammenhang von dividierten Differenzen und Ableitungen:
$\|f - \phi_n f\|_\infty = \mathcal{O}(h^2) \leq \|f'' - (\phi_n f)''\|_\infty = \mathcal{O}(h^4)$.

Numerische Quadratur

Grundlagen:
Integrationsoperator $I(f)$: Linearität, Norm, absolute und relative Kondition.
Beispiele: f stark lokal variierend, hochoszillatorisch.
Quadraturformeln $I_N(f)$: Aufwand, Konvergenz, Effizienz.
Konstruktion von Quadraturformeln durch lokale Polynom-Interpolation von f.

Gauß'sche Quadraturformeln

Newton-Côtes-Formeln:

Diskrete Kondition, äquidistante Stützstellen, Ordnung $n + 1$, bzw. $n + 2$, falls n gerade, instabil für $n \geq 7$.

Orthogonalität und Quadratur:

Aufgabe:

Bestimme Stützstellen x_i und Gewichte μ_i, $i = 0, \ldots, n$ so, daß
$\int_\alpha^\beta p(x)\, dx = (\beta - \alpha) \sum_{i=0}^n \mu_i p(x_i) \quad \forall p \in \mathcal{P}_{2n+1}$
($2(n + 1)$ Gleichungenn für Unbekannte $2(n + 1)$).

Eindeutig bestimmte Lösung:

x_i sind die Nullstellen des Orthogonalpolynoms p_{n+1}, d.h. $(p_{n+1}, q) = 0 \quad \forall q \in \mathcal{P}_n$
und $\mu_i = \int_\alpha^\beta L_i(x))\, dx$ (Gauß–Knoten x_i, Gauß'sche Quadraturformeln).
Es gilt $\mu_i \geq 0$ (Gauß'sche Quadraturformeln sind von positivem Typ).

Folgerung:

Summierte Gaußsche Quadraturformeln haben die Ordnung $\mathcal{O}(h^{2(n+1)})$.

Gauß–Lobatto–Formeln:

Wahl von $x_0 = \alpha$, $x_n = \beta$ (Aufwandsreduktion), Beispiele.

Extrapolation und klassische Romberg-Quadratur

Grundidee und Fehlerabschätzung:

Problemstellung: Auswertung von $T(h) = I_h(f)$ für $h = 0$.

Wähle $h_0 > h_1 > \cdots > h_n$, Interpolation von $T(h_j)$ durch $p_n(h_j),\ j = 0, \ldots, n$.

Hoffnung: $|T(0) - p_n(0)| \ll |T(0) - T(h_n)|$.

Satz: Vor.: $\exists$ asymptotische Entwicklung von T (Taylor-Entwicklung von T um 0).

Beh.: $|T(0) - p_n(0)| \leq |\tau_{n+1}| h_0 \cdot h_1 \cdot \cdots \cdot h_n + \mathcal{O}(h_0^{n+2})$

Numerische Beispiele.

Asymptotische Entwicklung der Trapezregel:

Satz: Vor.: $f \in C^{2(n+1)}[a, b]$, $T(h) = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{i=1}^{m-1} f(a + ih)$.

Beh.: $T(h) = I(f) + \sum_{k=1}^{n+1} \tau_{2k} h^{2k} + r_{2(n+2)}(h) h^{2(n+2)}$.

Beweis: Euler–McLaurinsche Summenformel. Folgerung: Extrapolation in h^2!

Auswertung, Wahl der Schrittweite und Stabilität:

Auswertung durch Aitken–Neville–Schema (Vorsicht: Auslöschung).

Romberg–Folge $h_j = 2^{-j} h_0$, $j = 0, \ldots, n$.

Optimaler Aufwand: $2^n + 1$ f–Auswertungen. Verfahren von positivem Typ.

Adaptive Multilevel Quadratur

Adaptives Schema:
4 Bausteine: Ausgangsgitter, Auswertung der Quadraturformel, Kontrolle des globalen Diskretisierungsfehlers, Kontrolle des lokalen Diskretisierungsfehlers und Verfeinerungsstrategie.

A posteriori Fehlerschätzung:
Vergleich mit Verfahren höherer Ordnung (Trapez– und Simpsonregel):
Vor.: Saturationsbedingung. Beh.: Einschließung des exakten Fehlers.

Numerische Experimente:
Effizienzvergleich mit uniformer Verfeinerung im glatten und nichtglatten Fall.
Verbesserung der Genauigkeit durch Addition des Fehlerterms ($\longrightarrow$ Simpson statt Trapez).
Zugabe: Saturationsbedingung (Trapez– und Simpsonregel) und Wendepunkte.

Anfangswertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen

Dynamik einer Bakterienpopulation: Modellierung:
Modellannahme, Bilanzgleichung, Kontinuumshypothese, Anfangswertproblem:
$x'(t) = px(t)\ ,\quad t > 0\ ,\quad x(0) = x_0\ ,\qquad p \geq 0.$
Lineare Differentialgleichung. Mathematische Validierung (Existenz, Eindeutigkeit, stetige Abhängigkeit von den Daten) durch Lösung: $x(t) = x_0 e^{pt}$.
Biologische Validierung (Vergleich mit Experimenten).
Verbessertes Modell:
Zusätzliche Effekte: Sterberate, Konkurrenz, Durchmischungshypothese, Anfangswertproblem:
$x'(t) = qx(t) - kx^2(t)\ ,\quad t > 0\ ,\qquad x(0) = x_0\ ,\quad q = p - s \in \mathbb{R}\ , k \geq 0.$
Nichtlineare Differentialgleichung.
Biologische Anfangsbedingungen $x_0 > 0$: Lösungen für alle Zeiten, Langzeitverhalten, Interpretation, Auswirkung von Störungen, unbiologische Anfangsbedingungen $x_0 < 0$: *blow up* nach endllicher Zeit.

Newtonsche Mechanik:
Impulserhaltung, Umschreiben von Systemen 2. Ordnung in (doppelt so große) Systeme 1. Ordnung, freies Teilchen, harmonischer Oszillator, Lösung des zugehörigen Anfangswertprobleme, Interpretaton.

Existenz und Eindeutigkeit

Satz von Picard–Lindelöf:

Autonome AWPs, Autonomisierbarkeit, Translationsinvarianz.

Satz: Ist f global Lipschitz-stetig, so folgt $\forall x_0 \in \mathbb{R}^d \; \forall T \in \mathbb{R} \; \exists$ eindeutig bestimmte Lösung $x \in C^1[0,T]$ des AWPs zu $x(0) = x_0$.

Lokale Variante von Picard–Lindelöf, Beispiele (globale Existenz, blow up, Kollaps).

Der Flußoperator:

Reversible AWP, Beispiele, hinreichende Kriterien.
Definition des Flußoperators: $\Phi^t x_0 = x(t)$, falls x eindeutig best. Lösg. des AWPs zu $x(0) = x_0$.
Algebraische Eigenschaften (Halbgruppen– und Gruppenstruktur).

Kondition von Anfangswertproblemen

Definition der absoluten, punktweisen Kondition $\kappa(t)$, Zusammenhang mit der Wronski–Matrix $W(t) = \frac{d}{dx_0}\Phi^t$: $\kappa(t) \leq \|W(t)\|$, Beispiele, AWP für $W(t)$. Gronwall–Lemma, Beispiele, Konditionsabschätzung.

Einschrittverfahren

Diskreter Fluß und Diskretisierung:
Gitter t_k, Schrittweiten τ_k, Halbgruppeneigenschaft des Flußes ϕ^t:

$$x(t_{k+1}) = \phi^{\tau_k} x(t_k), \quad k = 0, \ldots, n-1, \qquad x(0) = x_0.$$

Diskreter Fluß $\psi^\tau : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^d$, Einschrittverfahren:

$$x_{k+1} = \psi^{\tau_k} x_k, \quad k = 0, \ldots, n-1.$$

Beispiel: explizites Euler-Verfahren $\psi^\tau x = x + \tau f(x)$.

Konsistenz von Einschrittverfahren

Gitterfehler:
Entwicklung des Gitterfehlers $x(t_k) - x_k$:
$x(t_{k+1}) - x_{k+1} = \big(\phi^{\tau_k} x(t_k) - \psi^{\tau_k} x(t_k)\big) + \big(\psi^{\tau_k} x(t_k) - \psi^{\tau_k} x_k\big)$
Konsistenzfehler $\varepsilon(x,\tau) = \phi^\tau x - \psi^\tau x$, Fehlerfortpflanzung $\psi^\tau x(t_k) - \psi^\tau x_k$.

Konsistenz:
Konsistenz: $\varepsilon(x,\tau) = o(\tau)$, Konsistenzordnung p: $\varepsilon(x,\tau) = \mathcal{O}(\tau^{p+1})$.

Methode der Taylor-Entwicklung:
Konsistenzordnung des Euler-Verfahrens, Beweis durch Taylor-Entwicklung.
Definition des diskreten Flußes als abgeschnittene Taylor-Entwicklung von $\phi^\tau x$ um $\tau = 0$:
Vorteil: beliebig hohe Ordnung. Nachteil: Berechnung der Ableitungen von f erforderlich.

Mehrschrittverfahren:
Beispiel: Trapezregel

Konsistenz von Runge–Kutta–Verfahren

Runge–Kutta–Verfahren:
Idee:
(i) Anwendung von Quadraturformeln auf Integralgleichungsformulierung der Dgl.
(ii) Geschachtelte Approximation der unbekannten Werte von $\phi^\tau x$ an den Stützstellen.
Beispiele: Euler-Verfahren (Treppenfunktion), Verfahren von Runge (Mittelpunktsregel), Runge–Kutta–4 (Simpson–Regel).
Definition: Allgemeine Form von Runge–Kutta–Verfahren.

Systematische Entwicklung von Verfahren höherer Ordnung:
Butcher-Schema, explizite und implizite Runge–Kutta–Verfahren.
Hinreichende Konsistenzbedingungen an A und b.

Zusammenhang von Stufe s und Konsistenzordnung p:
explizit: $p \leq s$ (Butcher-Schranken).
implizit $p \leq 2s$ ($\exists$ Verfahren der Ordnung $p = 2s$).

Stabilität von Runge–Kutta–Verfahren

Numerische Experimente
Fazit: „Glatte“ Lösung $\Longrightarrow$ Effizienz von Verfahren hoher Ordnung

Diskrete Kondition und Stabilität
Lemma:
Vor.: f Lipschitz–stetig.
Beh.: Disk. Fluß ψ^τ eines expliziten Runge–Kutta–Verfahrens ist Lipschitz–stetig.

Diskrete Kondition, Verfahren von positivem Typ.

Satz (Stabilität): Die Auswirkung von Störungen ε_k in jedem Zeitschritt k lässt sich kontrollieren.

Konvergenz von Einschrittverfahren

Satz: Konsistenz + Stabilität = Konvergenz.
Beweis: Setze $\varepsilon_k = \varepsilon(x(t_k), \tau_k)$ und wende die Stabilität an.

Adaptive Schrittweitensteuerung bei Runge–Kutta–Verfahren

Numerisches Beispiel
Auflösung von Singularitäten durch lokale Schrittweitenreduktion

Fehlerkontrolle:
Kontrolle des Diskretisierungsfehlers:
Im allgemeinen aufwendige Rückrechnungen erforderlich
Kontrolle des Konsistenzfehlers:
Lokale Schrittweitensteuerung bei bekanntem Konsistenzfehler.

Adaptive Schrittweitensteuerung bei Runge–Kutta–Verfahren

Schrittweitenkontrolle:
Bausteine:
Einschrittverfahren ψ^{τ},
Anfangsschrittweite, Schrittweitenvorschlag,
Verfahren höherer Ordnung χ^{τ}, a posteriori Schätzung des Konsistenzfehlers.

Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren:
Fehlberg-Trick, Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren.
Verfahren von Dobrind & Prince, ode45 in MATLAB
Numerische Beispiele.

Extrapolation expliziter Runge-Kutta-Verfahren

Grundidee von Extrapolationsverfahren
- Berechnung von Näherungen $x_{\sigma_k}(\tau)$ durch ψ^σ zu Schrittweiten $\sigma_k < \tau$
- Interpolation von $x_{\sigma_k}(\tau)$ durch $p \in \mathcal{P}$
- Extrapolation $\chi^\tau = p(0)$

Beispiel: Lineare Extrapolation des Euler-Verfahrens

Runge-Kutta-Verfahren
Satz: Extrapolation expliziter Runge-Kutta-Verfahren
führt auf explizite Runge-Kutta-Verfahren.

Satz: Extrapolation n-ter Ordnung des Euler-Verfahrens
führt auf ein Runge-Kutta-Verfahren $n+1$–ter Ordnung.

Folgerung: Es gibt explizite Runge-Kutta-Verfahren beliebig hoher Ordnung.