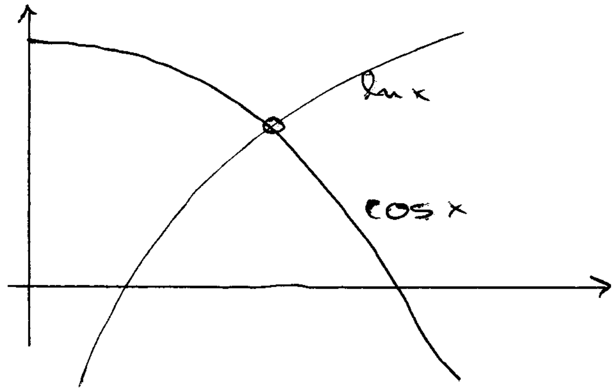
19.10.06

Funktionen und Nullstellen

Problem:
- Numerische Lösung von $f(x) = 0$
- 2 Funktionen: $g(x)$, $h(x)$. Wie ist $g(x) = h(x)$ zu lösen
- Wie ist $x = l(x)$ zu lösen („~~Fixpunktgl.~~")

Beispiel: $\cos x = \ln x$

graphisch:



Umformung: $f(x) = \cos x - \ln x$

$\Rightarrow$ äquivalent zu $f(x) = 0$

Umformung: Arccos anwenden

$\Rightarrow$ äquivalent zu $x = \mathrm{Arccos}(\ln x)$

Algorithmus für Fixpunkt:

- Anfangswert, z.B. $x_0 = 1$ $\quad l(x_0) = 1{,}5708$
- $x_1 = 1{,}5708$: $l(x_1) = 1{,}10226$

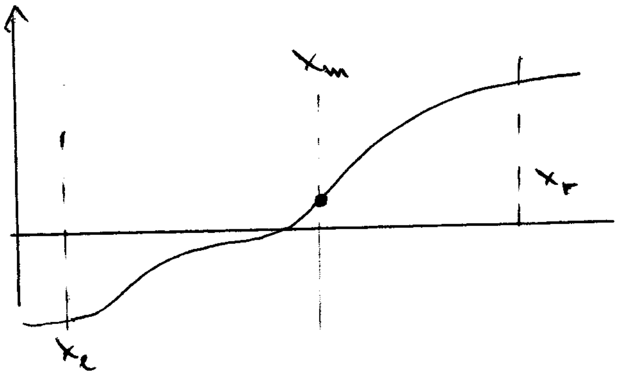
...

- Solange iterieren, bis Wert stabil. In diesem Fall etwa 50 Iterationen

Dieser Algorithmus ist nicht besonders effizient!

Algorithmen für $f(x)=0$

(1) Intervall-Halbierungs-Methode (IHM)



Vor.: stetig, zwischen Schranken muss Nullstelle liegen

$$x_m = \frac{x_l + x_r}{2}$$

Intervall halbieren, mit dem korrekten Intervalle wiederholen

Vorteile: einfach, konvergiert immer (sicher) vorausgesetzt Voraussetzungen sind erfüllt

Nachteile: - Anfangsintervallgrenzen müssen gut gewählt werden, sonst ist der Algorithmus sehr langsam
- 2 Anfangswerte müssen bekannt sein

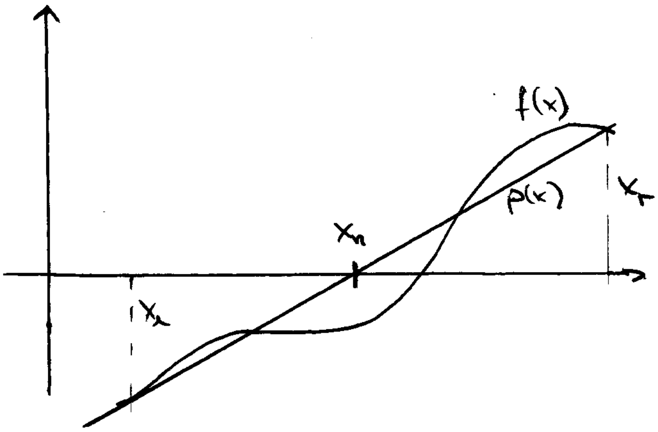
Analyse der Effizienz:

$2^{3.3} \approx 10$ ⇒ IHM produziert etwa eine Dezimalstelle pro 3 Iterationen

Fehler ist die Breite des Intervalls ($F_i = x_r^{(i)} - x_l^{(i)}$)
Der Fehler wird bei jedem Schritt halbiert $F_{i+1} = F_i / 2$

⇒ Konvergenzrate ist linear (langsam!)

(2) Regula falsi



$$p(x) = c_1 x + c_2$$

$$p(x_r) = f(x_r)$$

$$p(x_l) = f(x_l)$$

$$p(x) = \frac{x - x_r}{x_l - x_r} f(x_l) + \frac{x - x_l}{x_r - x_l} f(x_r)$$

Ziel: $p(x_n) \stackrel{!}{=} 0$

$$\Rightarrow x_n = \frac{x_n f(x_r) - x_l f(x_l)}{f(x_l) - f(x_r)}$$

Vorteil: kann im Vergleich zu IHM schneller konvergieren, muss aber nicht, wenn die Schranken zu weit sind, um eine lineare Näherung der Funktion zu rechtfertigen

Nachteil: ebenfalls zwei Anfangswerte benötigt

Für Fälle, in denen die Regula falsi nicht schnell genug konvergiert (Iterationen zählen) abbrechen und zu IHM zurückgehen

Urheber: Leonardo von Pisa (~1200)

(3) Newton - Raphson - Methode

Taylor - Reihe : $f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \dots$

$f(x) \stackrel{!}{=} 0$

$\Rightarrow \quad x = x_0 - \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$ (Fixpunktverfahren)

Näherungswert für die Nullstelle (x), Anfangswert (x_0)

$x_{i+1} = \ell(x_i)$

Vorteil: relativ schnell, nur ein Anfangswert

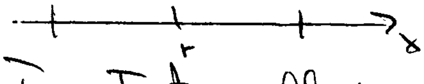
Nachteil: Ableitung muss bekannt sein
Konvergenz nicht garantiert

23.10.06

• Konvergenz:

Fixpunkt $r = \ell(r)$

$|x_{i+1} - r| = |\ell(x_i) - \ell(r)|$



Im Intervall um r:

$|\ell(x) - \ell(x')| \le c\, |x - x'|$, mit $|\ell'(x)| \le c$

$|x_{i+1} - r| \le c\, |x_i - r|$
$\le c^{i+1}\, |x_0 - r|$

c ist das Max. der Ableitung im Intervall

$\lim_{i \to \infty} |x_{i+1} - r| = 0$, wenn $c < 1$

Konvergenz ist garantiert, wenn $|\ell'(x)| < 1$ im Intervall

Wenn das Verfahren konvergiert, dann ist die Konvergenz quadratisch (schnell)

- Konvergenzgeschwindigkeit

  Maß für den Fehler: $\varepsilon_i := r - x_i$

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Entwicklung:

$$f(x) = f(x_i) + f'(x)\,(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_i)^2 f''(x_i)$$

$$f(x) \overset{!}{=} 0 \rightarrow x = r \rightarrow f(x_i) = -\varepsilon_i f'(x_i) - \frac{1}{2}\varepsilon_i^2 f''(x_i)$$

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i - \frac{\varepsilon_i f'(x_i) + \frac{1}{2}\varepsilon_i^2 f''(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$= -\frac{1}{2}\varepsilon_i^2 \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)}$$

quadratische Konvergenz für $\varepsilon_i < 1$ (nahe genug an der Nullstelle). Genauer:

Wenn f''/f' in der Nähe der Nullstelle fast konst. ist, dann ist der Fehler bei einer Iteration proportional zum Quadrat des Fehlers bei vorangegangener Iteration. Konvergenz ist quadratisch.

(4) Sekantenmethode

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

verwende diese Formel für das Newton-Raphson-Verfahren

$$\rightarrow x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

Es wird keine Ableitung mehr benötigt, ansonsten dieselben Vor- und Nachteile wie NR-Verfahren

Kombination zweier Verfahren

Kombination von Halbierungs- und Sekanten-Methode wird als überlegenes Verfahren angesehen

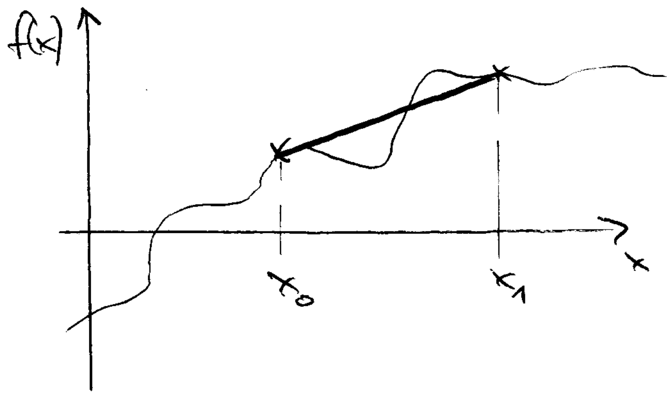
IHM : legt Schranke fest

Wenn Bedingungen für die Konvergenz der Sekanten-Methode gegeben sind:

S-Schritt : immer gemacht wenn der Wert innerhalb der Schranken liegt

Interpolation und approximative Darstellung von Funktionen

Lineare Interpolation



$x_0 \leq x \leq x_1$

Gerade Linie durch 2 Punkte : $p(x) = c_1 x + c_2$

$$P(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

$$p(x) = \sum_{k=0}^{1} P_k^{(1)}(x)\, f(k) \quad ; \quad P_k^{(1)}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{1} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

Lagrangesches Interpolationspolynom

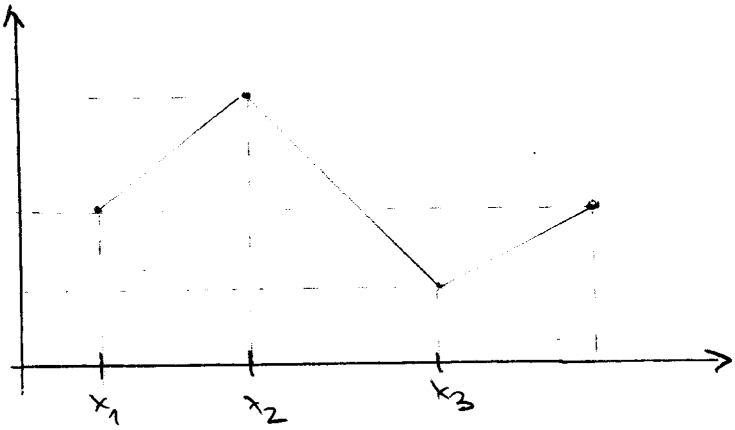
Verallgemeinerung der obigen Methode

Wenn $(n+1)$ Punkte bekannt $\rightarrow$ Polynom der Ordnung n

$$P(x) = \sum_{k=0}^{n} P_k^{(n)}(x)\, f(x_k)$$

$$P_k^{(n)}(x) = \prod_{\substack{j \neq k \\ j=0}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

kubische Splines



lineare Interpolation:
nicht differenzierbar

$\Rightarrow$ kubische splines:
Näherungsfunktion die stetige Ableitungen hat

$x_i \leq x \leq x_{i+1}$: $\quad p(x) = a_i (x-x_i)^3 + b_i (x-x_i)^2 + c_i (x-x_i) + d_i$

$f(x_i) \overset{!}{=} p(x_i) = d \quad (1) \qquad h_i \equiv x_{i+1} - x_i$

$f(x_{i+1}) \overset{!}{=} p(x_{i+1})$

$= a_i h_i^3 + b_i h_i^2 + c h_i + d_i \qquad (2)$

$p'(x) = 3a_i (x-x_i)^2 + 2 b_i (x-x_i) + c_i$

$p''(x) = 6a_i (x-x_i) + 2b_i$

Notation $p(x_i) = p_i$
$p'(x_i) = p_i'$

$p_i'' = 2 b_i$

$p_{i+1}'' = 6 a_i h_i + 2b_i \rightarrow a_i = \frac{1}{6} \frac{p_{i+1}'' - p_i''}{h_i}$

aus 2: $\quad c_i = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{1}{6}(h_i p_{i+1}'' + 2 h_i p_i'')$

$\rightarrow p(x) = p_i + \left[\frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}\left(p_{i+1}'' + 2p_i''\right)\right](x-x_i)$
$+ \frac{1}{2} p_i''(x-x_i)^2 + \frac{1}{6} \frac{p_{i+1}'' - p_i''}{h_i} (x-x_i)^3$

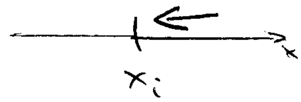
Ableitungen müssen eliminiert werden!

Benutzen: Ableitung soll stetig sein!

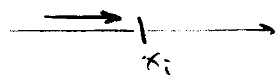
$$p'(x) = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}\left(p''_{i+1} + 2 p''_i\right) + p''_i (x - x_i) + \frac{1}{2}\frac{p''_{i+1} - p''_i}{h_i}(x - x_i)^2 \qquad (\square)$$

Betrachtung des Limes von rechts und links

$$p'_i = \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}\left(p''_i + 2 p''_i\right) \qquad (*)$$



Ersetze $i \to (i-1)$ in $(\square)$



$x_{i-1} < x < x_i$:

$$p'(x) = \frac{p_i - p_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{h_{i-1}}{6}\left(p''_i + 2 p''_{i-1}\right) + p''_{i-1}(x - x_{i-1}) + \frac{1}{2}\frac{p''_i - p''_{i-1}}{h_{i-1}}(x - x_{i-1})^2$$

$$\to p'_i = \frac{p_i - p_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{1}{3} h_{i-1} p''_i + \frac{1}{6} h_{i-1} p''_{i-1} \qquad (**)$$

$$(*) \overset{!}{=} (**)$$

$$h_{i-1} p''_{i-1} + 2(h_i + h_{i-1}) p''_i + h_i p''_{i+1} = 6\left(\frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} - \frac{p_i - p_{i-1}}{h_{i-1}}\right)$$

$i = 2 .. (n-1)$

Insgesamt stehen $(n-2)$ Gleichungen für n unbekannte p''_i
Es fehlen zwei Gleichungen, Lösung z. B. durch Spezifiziere von p'_1 und p'_n (Ableitungen an den Rändern)

31.10.06

Behandlung an den Rändern

$$(*)_{i=1}: \quad 2h_1 P_1'' + h_1 P_2'' = 6\,\frac{P_2 - P_1}{h_1} - 6\,\underline{\underline{P_i'}}$$

$$(**)_{i=n}: \quad h_{n-1} P_{n-1}'' + 2h_{n-1} P_n'' = -6\,\frac{P_n - P_{n-1}}{h_{n-1}} + 6\,\underline{\underline{P_n'}}$$

Dies sind grundsätzlich die beiden noch fehlenden Gleichungen. allerdings müssen P_i' und P_n' vorgegeben werden

Schreibweise in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \underbrace{2h_1}_{\to 1} & \underbrace{h_1}_{\to 0} & & & & 0 \\ \underbrace{h_1}_{\to 0} & 2(h_1+h_2) & h_2 & & & \\ & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & \underbrace{h_{n-1}}_{\to 0} \\ 0 & & & & \underbrace{h_{n-1}}_{\to 0} & \underbrace{2h_{n-1}}_{\to 1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} P_1'' \\ P_2'' \\ \vdots \\ \vdots \\ P_n'' \end{pmatrix}$$

$$= 6 \cdot \begin{pmatrix} \underbrace{\frac{P_2 - P_1}{h_1} - P_1'}_{\to 0} \\ \frac{P_3 - P_2}{h_2} - \frac{P_2 - P_1}{h_1} \\ \vdots \\ \frac{P_n - P_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{P_{n-i} - P_{n-2}}{h_{n-2}} \\ \underbrace{-\frac{P_n - P_{n-1}}{h_{n-1}} + P_n'}_{\to 0} \end{pmatrix}$$

Wenn die Ableitungen an den Enden nicht bekannt sind:

$$p_1'' = p_n'' = 0$$ ("natürliche Splines")

→ Näherungsfunktion ist linear an den Grenzen des Intervalls

Führt zu markierten Änderungen in der Matrix

Die Matrixgleichung ist nun zu lösen:

<u>Tridiagonale lineare Systeme</u>

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \\ 0 & & \dots & & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix}$$

Als Gleichungen geschrieben:

$$b_1 x_1 + c_1 x_2 = r_1$$
$$a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = r_2$$
$$a_3 x_2 + b_3 x_3 + c_3 x_4 = r_3$$
$$\dots$$

Einfacher Fall für das Gauss-Jordan-Verfahren nach einem Schritt:

$$\underbrace{b_1}_{\beta_1} x_1 + c_1 x_2 = \underbrace{r_1}_{e_1}$$

$$\underbrace{\left(b_2 - \frac{a_2}{b_1} c_1\right)}_{\beta_2} x_2 + c_2 x_3 = \underbrace{r_2 - \frac{a_2}{b_1} r_1}_{e_2}$$

$$a_3 x_2 + b_3 x_3 + c_3 x_4 = r_3$$

nach zweiten Schritt:

$$\beta_1 x_1 + c_1 x_2 = e_1$$

$$\beta_2 x_2 + c_2 x_3 = e_2$$

$$\left(b_3 - \frac{a_3}{\beta_2} c_2\right) x_2 + c_3 x_4 = \underbrace{r_3 - \frac{a_3}{\beta_2} e_2}_{= e_3}$$

... usw.

Allgemein

$$\beta_j = b_j - \frac{a_j}{\beta_{j-1}} c_{j-1}$$

$$e_j = r_j - \frac{a_j}{\beta_{j-1}} e_{j-1} \qquad j = 2 \ldots n$$

$$x_n = e_n / \beta_n$$

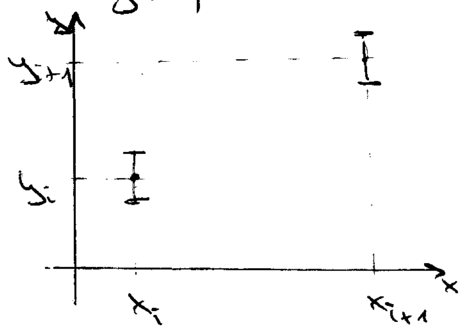
$$x_{n-1} = (e_{n-1} - c_{n-1} x_n) / \beta_{n-1}$$

$$x_{n-j} = (e_{n-j} - c_{n-j} x_{n-j+1}) / \beta_{n-j} \qquad , j = 1 \ldots n-1$$

Least - Square - Fit

- lineare Regression

$$y(x) = a + bx$$



$y_i \pm \sigma$, σ: Standardabweichung

minimiere : $\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - y(x_i) \right]^2$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 0 \quad , \quad \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = 0$$

$$\rightarrow -\sum_{i=1}^{n} 2 \left(y_i - a - b x_i \right) = 0 \quad , \quad \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a^2} = \sum_{i=1}^{n} 2 > 0$$

$$-\sum_{i=1}^{n} 2 \left(y_i - a - b x_i \right) x_i = 0 \quad , \quad \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial b^2} = \sum_{i=1}^{n} 2 x_i^2 > 0$$

$$a n + b \sum_i x_i = \sum_i y_i$$

$$a \sum_i x_i + b \sum_i x_i^2 = \sum_i y_i x_i$$

wir definieren : $S = \sum_{i=1}^{n} 1 = n$ $\quad S_x = \sum_{i=1}^{n} x_i \quad S_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$\rightarrow a S + b S_x = S_y$$

$$a S_x + b S_{xx} = S_{xy}$$

$$\rightarrow a = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{S S_{xx} - S_x^2} \qquad b = \frac{S S_{xy} - S_x}{S S_{xx} - S_x^2}$$

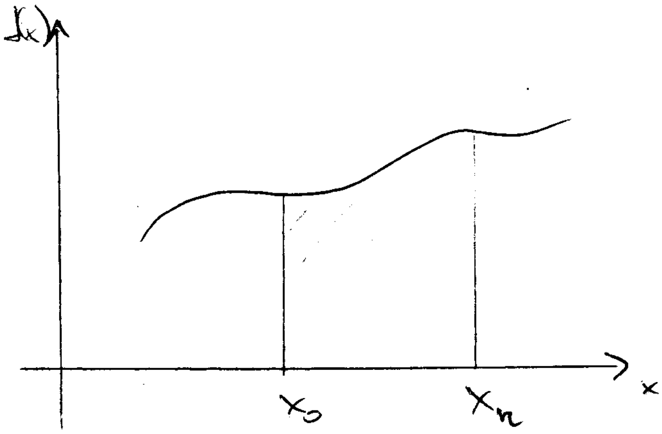
Wenn σ nicht konstant ist:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right]^2$$

$$\rightarrow \quad S = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} \qquad S_x = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \qquad S_y = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad \text{usw.}$$

Numerische Integration

2.10.06



$$I = \int_{x_0}^{x_n} dx\, f(x)$$

Strategie: Wähle $n+1$ Stützstellen, werte dort Funktion aus und lege ein Polynom n-ten Grades durch die Funktion (Lagrangesches Interpolationspolynom)

$f_i = f(x_i)$

$$f(x) \to p(x) = \sum_k p_k^{(n)}(x)\, f_k$$

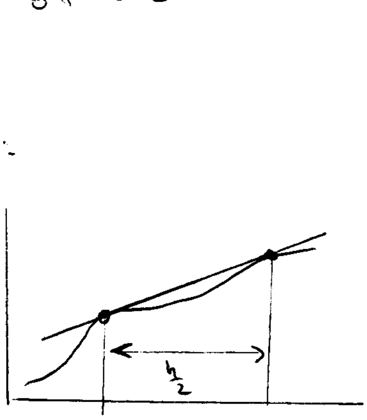
$$I = \int_{x_0}^{x_n} dx\, p(x) = \sum_{k=0}^{n} w_k f_k \qquad w_k = \int_{x_0}^{x_n} dx\, P_k^{(n)}(x)$$

Wir nehmen äquidistante Stützstellen der Schrittweite h an.

$$x_k = x_0 + kh \quad \to \quad h = \frac{x_n - x_0}{n} \quad , h < 1$$

Beispiele:

$\boxed{n = 1}$



$$p(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

$$\to w_0 = \int_0^{x_1} dx\, \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{h}{2}$$

$$w_1 = \int_0^{x_1} dx\, \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{h}{2}$$

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} dx\, f(x) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + O(h^3)}$$

$$\uparrow \int_{x_0}^{x_1} dx\, x^2 \sim h^3$$

Trapez-Regel

$\boxed{n=2}$ $$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f_2$$

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_2} dx \, \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{h}{3} = w_2$$

$$w_1 = \int_{x_0}^{x_2} dx \, \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{4}{3} h$$

$$\boxed{\int_0^{x_2} dx \, f(x) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + O(h^5)}$$ Simpsonsche Eindrittel-Regel

$$O(h^5): \int_{x_0}^{x_2} dx \, x^3 = \frac{1}{4}\left[(x_0+2h)^4 - x_0^4\right]$$

$$= \frac{h}{3}\left[x_0^3 + 4(x_0+h)^3 + (x_0+2h)^3\right]$$

...

Für $f(x) = x^3$ ist die Formel "zufällig" immer noch richtig!

$\boxed{n=3}$

$$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \dots$$

$$\downarrow \qquad\qquad \downarrow$$

$$w_0 = \frac{3}{8} h \qquad\qquad w_1 = \frac{9}{8} h$$

$$\rightarrow \boxed{\int_{x_0}^{x_3} dx \, f(x) = \frac{3}{8} h (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) + O(h^5)}$$

Simpsonsche Dreiachtelregel

Kein besseres Ergebnis als bei der Eindrittel-Regel

$\boxed{n=4}$ Boolsche Regel

... höhere Ordnungen

$\Rightarrow$ „Newton-Cotes-Formeln“

Die einfache Trapezregel und die Simpsonsche Regel werden als Baustein benutzt indem das Integrationsintervall in N gleiche Teile zerlegt werden und wiederholt die Regel angewendet werden

~~Regel~~

- $$\int_{x_0}^{x_N} dx\, f(x) = \frac{h}{2}(f_0+f_1) + \frac{h}{2}(f_1+f_2) + \ldots + \ldots + \frac{h}{2}(f_{n-1}+f_n)$$
$$= h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + \frac{1}{2}f_n\right)$$

(Trapezregel)

- $$\int_{x_0}^{x_{2N}} dx\, f(x) = \frac{h}{3}(f_0+4f_1+f_2) + \frac{h}{3}(f_2+4f_3+f_4) + \ldots$$
$$= \frac{h}{3}(f_0+4f_1+2f_2+4f_3+\ldots+2f_{2N-2} + 4f_{2N-1} + f_{2N})$$

(Simpsonsche Regel)

Betrachtung des Fehlers:

- Trapezregel: jeder Schritt hat einen Fehler $O(h^3) \sim O(N^3)$

  $\rightarrow$ Gesamtfehler: $O(N^2)$

- Simpsonsche Regel: jeder Schritt hat einen Fehler $O(h^5)$

  $\rightarrow$ Gesamtfehler: $O(N^{-4})$

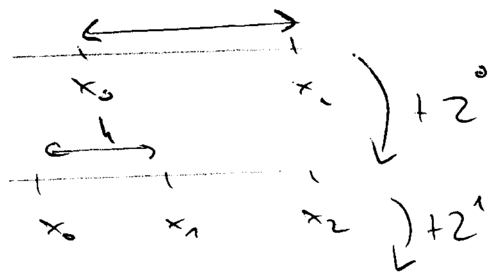
Durch wiederholtes Halbieren der Teilintervalle kann eine gewünschte Genauigkeit erreicht werden.

- Halbierung

  - Trapezregel:

    $N = 1$

    $N = 2$



    ...

    solange sich die Genauigkeit erhöht

  - Simpsonsche Regel:

    $N = 1$ $\Big\} +2^1$

    $N = 2$ $\Big\} +2^2$

    $N = 4$

    ...

    um 1 verschoben

7.11.06

Gaußsche Integralformeln / Quadraturformeln

- konvergieren schneller mit der Zahl der Funktionsaufrufe
- wichtiger Bestandteil: orthogonale Polynome

Wir betrachten das Intervall $[-1,1] \xrightarrow{\text{Variablen transf.}} [a,b]$
orthogonale Polynome auf $[-1,1]$: Legendre-Polynome

entstanden durch Orthogonalisierung der Potenzen $x^0, x^1, x^2, \dots$
auf dem Intervall $[-1,1]$

Orthogonalitätsrelation: $\int_{-1}^{1} dx \, P_m(x) P_n(x) = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$

$P_0 = 1 \qquad P_1 = x \qquad P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \qquad P_n = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n$

Wir wollen, dass

$$\int_{-1}^{1} dx \, f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f_i \quad ; \quad f_i = f(x_i) \qquad (\square)$$

soll bei dieser Methode exakt gelten für ein Polynom vom Grad $(2n-1)$ (ist exakt bestimmt da n Stützstellen x_i und n Gewichte w_i $\Rightarrow 2n$ Koeffizienten)

$f(x)$: Polynom vom Grad $(2n-1)$ (Polynomdivision)

$$f(x) = q^{(n-1)}(x) \, P_n(x) + r^{(n-1)}(x)$$

Beispiel: $f(x) = 3x^3 - 6x - 2$, $2n-1 \stackrel{!}{=} 3 \to n = 2$

$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$

$$\Rightarrow f(x) = \underbrace{2x}_{q^{(1)}} P_2(x) \underbrace{- 5x - 2}_{r^{(1)}}$$

Einsetzen:

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = \int_{-1}^{1} dx\, q^{(n-1)}(x)\, P_n(x) + \int_{-1}^{1} dx\, r^{(n-1)}(x)$$

$\{P_n\}$ bilden ein vollständiges System:

$$q^{(n-1)}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \underset{\uparrow \text{konst}}{q_i}\, P_i(x)$$ Entwicklung in Legendrepolynomen

$$\int_{-1}^{1} dx\, q^{(n-1)}(x)\, P_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} q_i \int_{-1}^{1} dx\, P_i(x)\, P_n(x)$$

$$\overset{*}{=} 0$$ * Orthogonalit.

$$\Rightarrow \int_{-1}^{1} dx\, q^{(n-1)}(x)\, P_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i\, q^{(n-1)}(x_i)\, P_n(x_i)$$

$$= 0$$

$\rightarrow$ ~~x Ansatz~~

$f(x)$ zwar vom Grad $(2n-1)$, sonst beliebig

$\rightarrow q^{(n-1)}$ —— " —— $(n-1)$ —— " ——

$$\Rightarrow \quad P_n(x_i) \overset{!}{=} 0 \quad ; \quad i = 0 \ldots n-1$$

es müssen die Nullstellen des Legendrepolynoms bestimmt werden

$\boxed{\text{Wir wählen also als Stützstellen die Nullstellen von } P_n(x)}$

Kontrolle:

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = 0 + \int_{-1}^{1} dx\; r^{(n-1)}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i\, r(x_i)$$
$$= \sum_{i=0}^{n-1} f_i \qquad \checkmark$$

Zur Erinnerung: Lagrangesches Interpolationspolynom

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n-1} P_k^{(n-1)}(x)\, f(x_k) \quad ; \quad P_k^{(n-1)}(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n-1} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

$$P_k^{(n-1)}(x_i) = \delta_{ki}$$

$(\square)$ anwenden:

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_k^{(n-1)}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i\, P_k^{(n-1)}(x_i)$$
$$= \sum_{i=0}^{n-1} w_i\, \delta_{ki} = w_k$$

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_k^{(n-1)}(x) = w_k$$ damit sind nun auch die Gewichte bekannt

Beispiel: $n=2$ Funktionsaufrufe:

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = \sum_{i=0}^{1} w_i f_i \quad ; \quad x_i:$$ Nullstelle von $P_2(x)$
$$x_0, x_1 = \pm\sqrt{\tfrac{1}{3}}$$

$$w_0 = \int_{-1}^{1} dx\, P_0^{(1)}(x) = \int_{-1}^{1} dx\, \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = 1$$

$$w_1 = w_0 = 1$$

$$\Rightarrow \int_{-1}^{1} dx\, f(x) = f\left(-\tfrac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\tfrac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Konvergenz: Fehler: $\int_a^b dx\, x^n \sim h^{2n+1}$ (h = Intervallbreite < 1)

N Abschnitte mit $h = \frac{b-a}{N}$

Gesamtfehler $\sim O(N^{-2n})$

$n = 10$ kein Problem

$\Rightarrow$ sehr schnelle Konvergenz

- $$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

betrachte führenden Term

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{2n} = \frac{(2n)!}{n!} x^n$$

$$\frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) = \pi(x)$$

$$\to \pi(x) = \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i) \quad , \quad \pi'(x_k) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n-1} (x_k - x_i)$$

$$P_k^{(n-1)}(x) = \frac{\pi(x)}{\pi'(x)\,(x - x_k)}$$

Rekursion: $(2i+1)\, x\, P_i(x) = (i+1)\, P_{i+1}(x) + i\, P_{i-1}(x)$

9.11.06

Rekursion: $(2i+1)\, x\, P_i(x)\, P_i(t) = (i+1)\, P_{i+1}(x)\, P_i(t) + i\, P_{i-1}(x) P_i(t)$

$(t \leftrightarrow x)$

$$\cancel{(2i+1)\, t\, P_i(t)\, P_i(x) + i P_{i-1}(t)\, P_i(x)}$$

$$\cancel{(2i+1)}$$

$$\cancel{(2i+1)(t-x)\, P_i(x)}$$

...

$\Rightarrow \quad I = -\frac{2}{n+1}\, \frac{1}{P_{n+1}(x_k)}$

Nochmal Rekursionsrelation mit $x = x_k$ verwenden

$$\Rightarrow \omega_k = \int_{-1}^{1} dx\, \frac{P_n(x)}{P_n'(x_n)(x-x_k)} = \frac{2}{n}\, \frac{1}{P_n'(x_k)\, P_{n-1}(x_k)}$$

eine, zweite, äquivalente Formel, unter Verwendung der Rekursionsrelation

$$(1-x^2)\, P_n'(x) = -n\, x\, P_n(x) + n\, P_{n-1}(x)$$

$$x = x_k : \quad (1-x_k^2)\, P_n'(x_k) = 0 + n \cdot P_{n-1}(x_k)$$

ist:

$$\boxed{\omega_k = \frac{2}{(1-x_k^2)\, [P_n'(x_k)]^2}}$$

Große Einschränkung: nur im Intervall $[-1,1]$

Allgemeiner:

$$\int_a^b dx\, W(x)\, f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f_i$$

positive Gewichtsfunktion

$\{\phi_n\}$ bilden vollst. System auf $[a,b]$

Orthogonalitätsrelation

$$\int_a^b dx\, W(x)\, \phi_m(x)\, \phi_n(x) = c_m \delta_{mn}$$

... selbe Herleitung wie für die Hermitepolynome ...

$\rightarrow$ Stützstellen x_i: Nullstellen von $\phi_n(x)$

Gewichte: $w_i = \int_a^b dx\, W(x)\, P_i^{(n-1)}(x)$

Meist genutzte Quadraturformeln

1) $W(x) = e^{-x}$, $I = \int_0^\infty dx\, e^{-x} f(x)$

relev. Polynome: Laguerre-Polynome $L_n(x)$

$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^n)$, $L_0(x) = 1$, $L_1(x) = 1-x$

$L_2 = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$

Orthogonalitätsrelation: $\int_0^\infty dx\, e^{-x} L_n(x)\, L_m(x) = \delta_{mn}$

Rekursionsrelation: $(n+1)\, L_{n+1}(x) = (2n+1-x)\, L_n(x) - n L_{n-1}(x)$

$$w_k = \frac{(n!)^2}{x_k [L_n'(x_k)]^2}$$

2) $w(x) = e^{-x^2}$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-x^2} f(x)$$

relevante Polynome: Hermite-Polynome $H_n(x)$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right) \qquad H_0 = 1, \; H_1 = 2x, \; H_2 = 4x^2 - 2$$

Orthogonalitätsrelation:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_n(x) \, H_m(x) = \sqrt{\pi}^{\,n} \, 2n! \, \delta_{mn}$$

Rekursionsrelation:

$$H_{n+1}(x) = 2x \, H_n(x) - 2n \, H_{n-1}(x)$$

3) $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

$$I = \int_{-1}^{1} dx \, \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)$$

relevante Polynome: Chebyshev-Polynome $T_n(x)$

$$T_n(x) = \cos(n \underbrace{\arccos x}_{\equiv \Theta}) \, , \quad T_n(\cos\Theta) = \cos(n\Theta)$$

$$T_0 = 1 \qquad T_1 = x \qquad T_2 = 2x^2 - 1$$

Orthogonalitätsrelation: $\int_{-1}^{1} dx \, \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_m(x) \, T_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \delta_{mn} \\ \pi \, ; \, m=n=0 \end{cases}$

Rekursionsrelation: $T_{n+1}(x) = 2x \, T_n(x) - T_{n-1}(x)$

Approximation von Ableitungen

14.11.06

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (\square)$$

$$\rightsquigarrow f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x) - \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots\right] \quad (*)$$

$$= \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] + O(h)$$

↳ aufsteigende Differenz

ebenso: $h \to -h$

$$\rightsquigarrow f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots \quad (\square\square)$$

$$f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x) - f(x-h) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots\right] \quad (**)$$

$$= \frac{1}{h}\left[f(x) - f(x-h)\right] + O(h)$$

↳ absteigende Differenz

$(*) + (**)$:

$$2f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x) + f(x) - f(x-h)\right] + O(h^2)$$

$$\boxed{\rightsquigarrow f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)}$$ 3-Punkte-Formel

- generell: symmetrische Ausdrücke sind genauer als unsymmetrische

$f'': \ (\square) + (\square\square)$

$$\rightsquigarrow f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x)$$

$$\boxed{\Rightarrow \ f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)}$$

- Fehler weiter reduzieren durch mehr Funktionsaufrufe:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(x) + \dots \qquad (+)$$

Schrittweite verdoppeln

$$f'(x) = \frac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h} - \frac{4h^2}{6} f'''(x) \qquad (++)$$

Fehler viermal so groß

$(+) - \frac{1}{4}(++)$:

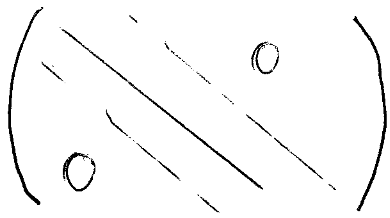
$$\frac{3}{4} f'(x) = \frac{8f(x+h) - 8f(x-h) - f(x+2h) + f(x-2h)}{16} + O(h^4)$$

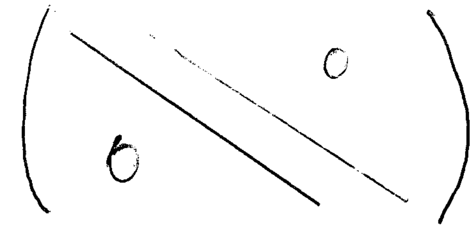
→ 5-Punkte-Formel

ebenso:

$$f''(x) = \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2} + O(h^4)$$

Lineare Gleichungen

$A \cdot \vec{x} = \vec{b}$, $A =$ 

$\rightarrow$ Gaußelimination $\rightarrow$ 

- Lösung durch Rücksubstitution
- Gaußelimination kann generell angewendet werden zur Lösung von Gleichungssystemen

$A \cdot \vec{x} = \vec{b}$ wird schrittweise in ein oberes Dreieckssystem $R \cdot \vec{x} = \vec{c}$ umgeformt. Lösung erhält man durch Rücksubstitution. Zur Verfügung steht:

- Gleichungen vertauschen
- Vielfache einer Gl. zu einer anderen addieren

Angelpunkt hier: "Vielfache":

Beispiel:

$$\begin{array}{lll} 1.\ Gl.: & a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n = b_1 & \Big| * \frac{a_{i1}}{a_{11}} \\ i.\ Gl.: & a_{i1} x_1 + a_{i2} x_2 + \dots + a_{in} x_n = b_i & \end{array}$$

Um die Rechenungenauigkeit zu minimieren, muss betragsmäßig größtes Element anstatt von a_{11} benutzt werden.

→ Pivotelement: $|a_{ki}|$ $\max\limits_{1\leq i\leq n} |a_{i1}|$

Diesen Schritt nennt man Pivotsuche.

Der gesamte Prozess heißt Teil/Spaltenpivotierung

$\boxed{\text{Gaußelimination nie ohne Pivotierung!}}$

Beispiel:

$$\left.\begin{aligned} 10^{-5} x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}\right\} x_1 \approx x_2 \approx 1$$

angenommen der Computer Arbeitet mit einer Genauigkeit von 4 Dezimalstellen.

ohne Pivotierung: $II - 10^{+5} I$:

$$(1-10^5)x_2 = 2-10^5 \xrightarrow{PC} -10^5 x_2 = -10^5$$

$$\Rightarrow x_2 = 1 \quad \checkmark$$

$$10^{-5} x_1 + 1 = 1 \xrightarrow{PC} x_1 = 0 \quad \times$$

mit Pivotierung: $(I \leftrightarrow II)$:

$$\begin{aligned} x_2 + x_1 &= 2 \\ 10^{-5} x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned}$$

$$(1-10^{-5})x_2 = 1 - 2\cdot 10^{-5}$$

$$\Rightarrow x_2 = 1 \quad \checkmark$$

$$x_1 + 1 = 2$$

$$\Rightarrow x_1 = 1 \quad \checkmark$$

→ Funktioniert aber auch nicht immer, da nur Teilpivotierung!

Implizite Pivotierung:

1. Schritt: Größten Eintrag der i-ten Zeile bestimmen

$$|a_{ik}| = \max_{1 \le j \le n} |a_{ij}|$$

und dividieren alle Einträge a_{ij} durch $|a_{ik}|$

16.11.06

Gauß-Jordan-Elimination

Beispiel:

$$\begin{aligned} x + y + z &= 6 \\ 2x - y + z &= 3 \\ 3x + 2y - z &= 4 \end{aligned}$$

$\sim$ erweiterte Matrix
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\xRightarrow{\frac{1}{3} r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2/3 & -1/3 & 4/3 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 - r_1]{r_2 - 2r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2/3 & -1/3 & 4/3 \\ 0 & -7/3 & 5/3 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 4/3 & 14/3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{-\frac{3}{7} r_2} \begin{pmatrix} 1 & 2/3 & 1/3 & 4/3 \\ 0 & 1 & -5/7 & -1/7 \\ 0 & 1/3 & 4/3 & 14/3 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 - \frac{1}{3} r_1]{r_1 - \frac{2}{3} r_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/7 & 10/7 \\ 0 & 1 & -5/7 & -\frac{1}{7} \\ 0 & 0 & 11/7 & 33/7 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_2 + \frac{5}{7} r_3]{r_1 - \frac{1}{7} r_3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow x_1 = 1;\ x_2 = 2;\ x_3 = 3$$

Inverse Matrix: $\quad A \cdot R = I \quad , \quad R = A^{-1}$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{erw.}} \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{\frac{1}{2}r_1} \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \underset{r_3 - r_1}{\xrightarrow{r_2 - r_1}} \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 3/2 & 1/2 & -1/2 & 1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 3/2 & -1/2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\frac{2}{3}r_2} \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1/3 & -1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 1/2 & 3/2 & -1/2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \underset{r_3 - \frac{1}{2}r_2}{\xrightarrow{r_1 - \frac{1}{2}r_2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/3 & 2/3 & -1/3 & 0 \\ 0 & 1 & 1/3 & -1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 4/3 & -1/3 & -1/3 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underset{r_2 - \frac{1}{3}r_3}{\xrightarrow{r_1 - \frac{1}{3}r_3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 3/4 & -1/4 & -1/4 \\ 0 & 1 & 0 & -1/4 & 3/4 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1 & -1/4 & -1/4 & 3/4 \end{pmatrix}$$

Pseudocode für $A \cdot \vec{x} = \vec{b}$

```
for Spalte j=1 to n
  begin
    suche betragsgrößtes Element
    vertausche j-te und k-te Zeile
    if pk = 0
       stop
    else
       begin
         dividiere j-te Zeile durch pk
```

for zeile $i' = 1$ to n , $i' \neq j$
    eliminiere alle Einträge $a_{i'j}$
end

end

LU-Zerlegung

$A = L \cdot U$ mit $U = ($◥$)$ und $($◣$) = L$
mit 1 auf Diag.

„teile und herrsche"

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b} \rightsquigarrow L \cdot \underbrace{U \cdot \vec{x}}_{\vec{y}} = \vec{b} \rightsquigarrow \underbrace{L \cdot \vec{y} = \vec{b}}_{(i)} \; ; \; \underbrace{U \cdot \vec{x} = \vec{y}}_{(ii)}$$

(i) Lösen durch Vorwärtssubstitution nach $\vec{y}$

(ii) Lösen durch Rückwärtssubstitution nach $\vec{x}$

Vorteil: Zerlegung kann ohne $\vec{b}$ durchgeführt werden. Dies ist der arbeitsintensive Schritt. ($\frac{n^3}{3}$) Die Lösungen zu finden geht dann mit geringem Aufwand ($\sim n^2$)

Behauptung: LU-Zerlegung ist in der Gauß-Elimination enthalten – naja, fast

$$\begin{pmatrix} 3 & 6 & 9 \\ 2 & 5 & 2 \\ -3 & -4 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{1}{3}r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ -3 & -4 & -11 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3-3r_1]{r_2-2r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

$$m_1 = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad m_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\overset{\text{Gauß}}{\Longrightarrow} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow A = m_1 \cdot m_2 P m_3 m_4 m_5 U$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & -3 \\ -3 & 2 & 0 \end{pmatrix}}_{P \cdot L} U$$

$\Rightarrow P \cdot A = L \cdot U$ (bis auf Permutation der Zeilen)

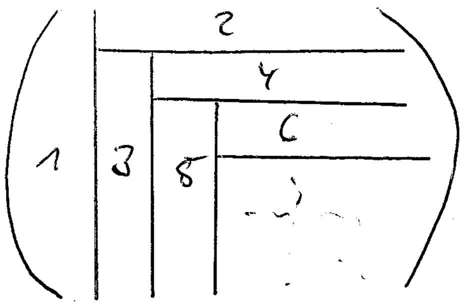
<u>Crout:</u>

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ l_{n1} & \cdots & & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ \vdots & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

- erste Spalte: $a_{i1} = l_{i1} \rightsquigarrow l_{i1} = a_{i1}, \quad i = 1, \ldots, n$
- erste Zeile: $a_{1j} = l_{11} u_{1j} \rightsquigarrow u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}} \quad j = 2, \ldots, n$
- zweite Spalte: $a_{i2} = \underset{\uparrow}{l_{i1}}\, \underset{\uparrow}{u_{12}} + l_{i2}$

bekannt

schematisch:



- j-te Spalte: $l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}$, $i = j, j+1, \dots, n$
- i-te Zeile: $u_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}\right) / l_{ii}$ $j = i, i+1, \dots, n$

21.11.06

(i) lässt sich leicht lösen:

$$\begin{aligned} l_{11} y_1 \qquad\qquad & = b_1 \\ l_{21} y_1 + l_{22} y_2 \qquad & = b_2 \\ \vdots \qquad\qquad & \quad \vdots \\ l_{n1} y_1 + \dots \; l_{nn} y_n & = b_n \end{aligned}$$

$$y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k\right) / l_{ii} \quad , \quad i = 2, \dots, n$$

$$y_1 = b_1 / l_{11}$$

$\vec{y}$ gefunden: (ii) lösen durch Rücksubstitution:

$$x_{n-i} = y_{n-i} - \sum_{k=n-i+1}^{n} u_{n-i,k} x_k \quad , \quad i = 1, \dots, n-1$$

$$x_n = y_n$$

21.11.06

LU-Zerlegung: Crout:

$\vec{A} = \vec{L} \cdot \vec{U}$ $\vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$

$\to L \cdot \underbrace{U \cdot \vec{x}}_{:= \vec{y}} = \vec{b}$

$\to \boxed{\underset{(i)}{L \cdot \vec{y} = \vec{b}}}$ $\boxed{\underset{(ii)}{U \cdot \vec{x} = \vec{y}}}$

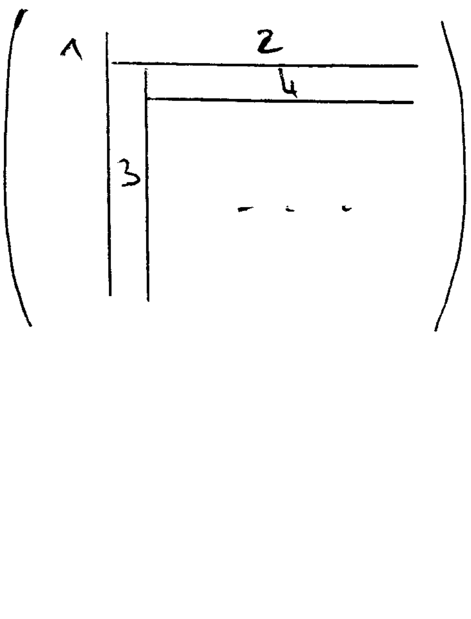
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots \\ a_{21} & \dots & & \\ \vdots & & & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \\ & \dots & & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \dots \\ 0 & 1 & u_{23} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ & \dots & & \dots \end{pmatrix}$$

j. Spalte: $l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}$; $i = j, j+1, \dots n$

$l_{i1} = a_{i1}$

i. Zeile: $u_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}\right) / l_{ii}$, $j = i+1 \dots n$

$u_{1j} = a_{1j} / l_{11}$



(i) lässt sich leicht lösen:

$$\begin{aligned}
l_{11} y_1 &= b_1 \quad \rightarrow y_1 = b_1 / l_{11} \\
l_{21} y_1 + l_{22} y_2 &= b_2 \\
&\vdots \\
l_{n1} y_1 + l_{n2} y_2 + \ldots + l_{nn} y_n &= b_n
\end{aligned}$$

Vorwärts-substitution

$$\boxed{y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k\right) / l_{ii}} \quad ; \quad i = 2 \ldots n$$

$$y_1 = b_1 / l_{11}$$

$\vec{y}$ gefunden: (ii) lösen durch Rücksubstitution

$$\begin{aligned}
x_1 + u_{12} x_2 + \ldots + u_{1n} x_n &= y_1 \\
x_2 + \ldots + u_{2n} x_n &= y_2 \\
&\ddots \\
x_n &= y_n
\end{aligned}$$

$$\boxed{x_{n-i} = y_{n-i} - \sum_{k=n-i+1} u_{n-i\,k}\, x_k} \quad i = 1 \ldots n-1$$

$$x_n = y_n$$

Inverse Matrix:

nehme $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \ldots$ mit $b_{i,j} = \delta_{ij}$; $i,j = 1 \ldots n$

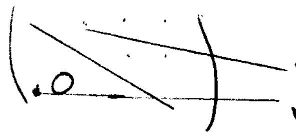
Determinante: $\det(A) = \det(L) \cdot \det(U)$

$$= \prod_{i=1}^{n} l_{ii} \cdot 1$$

Effizienz:

- Gauß-Elimination

i) Umformung von $A \to U$

U:  n-1 Einträge (1. Zeile)
n-1 Koeff. geändert (1. Spalte) usw.

arithmetische Operationen: Mult., Div.

Aufwand: $(n-1)^2 + (n-2)^2 + \ldots + 1$

$$= \sum_{i=2}^{n} (i-1)^2 = \sum_{i=1}^{n-1} i^2 = \frac{1}{6}(n-1)n(2n-1)$$

$$\sim \frac{1}{3} n^3$$

ii) Rücksubstitution

$$x_1 + u_{12} x_2 + \ldots u_{1n} x_n = b_1' \qquad n-1 \text{ a. Ops.}$$

$$x_{n-1} + u_{n-1,n} x_n = b_{n-1}' \qquad 1 \text{ a. Ops}$$

$$x_n = b_n'$$

Aufwand: $\displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{(n-1)n}{2} \sim \frac{n^2}{2}$

Gesamtaufwand $\frac{1}{3} n^3 + m \frac{n^2}{2} \sim O(n^3)$
für m rechte Seiten

- LU-Zerlegung

(i) Zerlegung wie bei Gauß: $O(n^3)$

(ii) Rück- und Vorwärtssubst.: $O(n^2)$
für einzelne Lösungen

- Determinante: kein zusätzlicher Aufwand zu Zerlegung
vgl. mit "klassischem" Verfahren: $O(n!)$
$\Rightarrow$ LU-Zerlegung ist hier sehr hilfreich

Überbestimmte Systeme

$A\vec{x} = \vec{b}$, A: m×n-Matrix, m>n
$\vec{b}$: m Komponenten
$\vec{x}$: n Komponenten

In der Regel: keine eindeutige exakte Lösung

- Lösung nach der Methode der kleinsten Quadrate
  - definiere Abweichung: $\vec{r} := \vec{b} - A\vec{x}$
  - minimiere Summe der quadratischen Abweichungen:

$$\vec{r}^2 = \sum_{i=1}^{m} [b_i - (A\vec{x})_i][b_i - (A\vec{x})_i]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \Big(b_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j\Big)\Big(b_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j\Big)$$

$$\frac{\partial \vec{r}^2}{\partial x_k} = 0$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{m} \left[-A_{ik} \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j\right) + \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j\right)(-A_{ik})\right] \overset{!}{=} 0$$

$$\rightarrow -2 \sum_{i=1}^{m} A_{ik} \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j\right) \overset{!}{=} 0$$

$$\rightarrow \boxed{\underbrace{A^T \cdot A}_{:= A'} \cdot \vec{x} = \underbrace{A^T \cdot \vec{b}}_{\vec{b}'}}$$

ist von der Form $A' \cdot \vec{x} = \vec{b}'$

↑ "Normalengleichungen"

$A: m \times n$, $A^T: n \times m$ $\rightarrow$ $A^T \cdot A - n \cdot n$

Jetzt kann Gauß / Gauß-Jordan / LU-Zerlegung ange-wendet werden

Beispiel:

$$x_1 - x_2 = 2$$
$$x_1 + x_2 = 4$$
$$2x_1 + x_2 = 8$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad A^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad A^T \cdot A = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}, \quad A^T \cdot \vec{b} = \begin{pmatrix} 22 \\ 10 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left.\begin{matrix} 6x_1 + 2x_2 = 22 \\ 2x_1 + 3x_2 = 10 \end{matrix}\right\} \Rightarrow \begin{matrix} x_1 = 23/7 \\ x_2 = 8/7 \end{matrix}$$

Beispiel: $x = a_i \quad , i = 1 \dots m$

$$\vec{r}^2 = \sum_{i=1}^{m} (x-a_i)^2 \quad , \quad \frac{\partial \vec{r}^2}{\partial x} \overset{!}{=} 0 \rightarrow 2 \sum_{i=1}^{m} (x-a_i) \overset{!}{=} 0$$

$$\rightarrow mx = \sum_{i=1}^{n} a_i$$

$$\rightarrow \boxed{x = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i} \quad \text{Mittelwert}$$

23.11.06

Standardabweichung: $\sigma = \sqrt{\frac{\vec{r}^2}{m}}$
(mittlere quadr. Abweichung)

Iterative Verfahren für lineare Gleichungssysteme

a) Jacobi: $A\vec{x} = \vec{b}$, A: $n \times n$ - Matrix
definiere $A = D + E$, D: Diagonalmatrix
$D_{ij} = a_{ii} \delta_{ij}$

$$(D+E) \cdot \vec{x} = \vec{b}$$
$$D \cdot \vec{x} = \vec{b} - E\vec{x}$$
$$\boxed{\vec{x} = D^{-1} \cdot (\vec{b} - E\vec{x})} \quad \text{Fixpunktgleichung}$$

Komponentenschreibweise:

$$x_i^{(k+1)} = \Big(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\Big) / a_{ii}$$

Bei der Berechnung von $x_i^{(k+1)}$ wird nicht die aktuellste Information benutzt: obwohl $x_{i'}^{(k+1)}$ mit $i' < i$ schon bekannt werden noch immer die alten Werte $x_{i'}^{(k)}$ verwendet

b) Gauß-Seidel:

Jacobi kann so korrigiert werden, dass das Letztgenannte Problem nicht mehr auftritt

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) / a_{ii}$$

Das Verfahren ist etwa doppelt so schnell wie Jacobi

Konvergenz des Jacobi-Verfahrens:

definiere: $\vec{e}^{(k)} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{exakte Lsg}}}{\vec{x}} - \vec{x}^{(k)}$

$$\begin{aligned}\vec{e}^{(k+1)} &= \vec{x} - D^{-1}(\vec{b} - E\vec{x}^{(k)}) \\ &= D^{-1} \cdot E\vec{x}^{(k)} + \underbrace{\vec{x} - D^{-1}\vec{b}}_{= -D^{-1}E\vec{x}}\end{aligned}$$

$$\boxed{\vec{e}^{(k+1)} = -D^{-1}E \cdot \vec{e}^{(k)}}$$

mit Cauchy-Schwartz ($\|\vec{a}\cdot\vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\|$)

$$\begin{aligned}\rightarrow \|\vec{e}^{(k+1)}\| &\leq \|D^{-1}E\| \, \|\vec{e}^{(k)}\| \\ &\leq \|D^{-1}E\|^{k+1} \|\vec{e}^{(0)}\|\end{aligned}$$

, wenn $\|D^{-1}E\| < 1$

<u>Konvergenz</u>

mögliche Definition für die Norm einer Matrix

$\|M\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n} |m_{ij}|$, Zeilensummennorm: $\|\vec{v}\| = \max_i |v_i|$

In unserem Fall ist die Konvergenzbedingung

$\|D^{-1}E\|_\infty < 1 \quad \rightarrow \quad \max_i \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| < 1$

$$\rightarrow \boxed{|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \quad , \quad i = 1..n}$$

starkdiagonal-dominante Matrizen

Zu jeder Zeit muss die Summe der Beträge der nichtdiagonalelemente kleiner sein als der Betrag des Diagonalelements.

Die Konvergenz ist für solche "starkdiagonaldominante Matrizen" garantiert, aber auch ansonsten kann das Verfahren noch konvergieren (abhängig vom Startwert)

Betrachtung nocheinmal ohne Anwendung von Cauchy-Schwarz:

$$\vec{e}^{(k+1)} = -D^{-1} E \cdot \vec{e}^{(k)}$$

$$\vec{e}_i^{(k+1)} = -\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} e_j^{(k)} \quad , \quad i = 1..n$$

Der Betrag:

$$|e_i^{(k+1)}| \overset{1)}{\leq} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| |e_j^{(k)}|$$

$$\leq \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| \|\vec{e}^{(k)}\|_\infty$$

$$\rightarrow \|\vec{e}^{(k+1)}\|_\infty \leq \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| \|\vec{e}^{(k)}\|_\infty$$

$$\|\vec{e}^{(k+1)}\|_\infty \leq \underbrace{\max_i \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|}_{\equiv \|D^{-1} \cdot E\|_\infty} \|\vec{e}^{(k)}\|_\infty$$

selbes Ergebnis

---

1) Dreiecksungleichung $|a+b| \leq |a| + |b|$

28.11.06

Fehlerfortpflanzung: Gauß / Gauß-Jordan / LU-Zerlegung

$$A\vec{x} = \vec{b} \qquad (1)$$

$$A\vec{x}_j = \vec{b} + \vec{j}$$

← Eingabefehler

$$A(\vec{x}_j - \vec{x}) = \vec{j} \qquad (1')$$

$$\rightarrow \vec{x}_j - \vec{x} = A^{-1} \cdot \vec{j}$$

$$\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty \le \|A^{-1}\|_\infty \|\vec{j}\|_\infty \qquad \text{(Zeilensummennorm)}$$

aus (1):

$$\|\vec{b}\|_\infty \le \|A\|_\infty \|\vec{x}\|_\infty$$

$$\|\vec{x}\|_\infty \ge \frac{\|\vec{b}\|_\infty}{\|A\|_\infty} \qquad (3)$$

aus (2), (3):

$$\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \le \underbrace{\|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty}_{\text{"conditioning factor"} = C(A)} \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{\|\vec{b}\|_\infty}, \qquad \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \le C(A) \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{\|\vec{b}\|_\infty}$$

Ein Gleichungssystem ist schlecht konditioniert, wenn eine kleine Änderung auf der rechten Seite eine große Änderung der Lösung nach sich zieht.

Bestimmung einer unteren Schranke

aus (1):

$\|\vec{x}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|\vec{b}\|_\infty$

aus (1'):

$\|j\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty$

$$\Rightarrow \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \geq \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{C(A)\|\vec{b}\|_\infty}$$

Insgesamt gilt:

$$\boxed{\frac{1}{C(A)} \frac{\|\vec{j}\|_\infty}{\|\vec{b}\|_\infty} \leq \frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \leq C(A) \frac{\|j\|_\infty}{\|b\|_\infty}}$$

Wenn $C(A)$ groß ist, ist die Matrix bzw das Gleichungssystem schlecht konditioniert

Angenommen, Fehler ist nicht auf der rechten Seite, sondern bei der Matrix:

$(A + F) \cdot \vec{x}_j = \vec{b}$

$\rightarrow A(\vec{x}_j - \vec{x}) = -F \cdot \vec{x}_j$

$\rightarrow \|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty \|F\|_\infty \|\vec{x}_j\|_\infty$

$$\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}_j\|_\infty} \leq C(A) \frac{\|F\|_\infty}{\|A\|_\infty}$$

$$\boxed{\frac{\|\vec{x}_j - \vec{x}\|_\infty}{\|\vec{x}\|_\infty} \leq \frac{C(A)\|F\|_\infty / \|A\|_\infty}{1 - C(A)\|F\|_\infty / \|A\|_\infty}}$$

Eigenwertproblem

$A \cdot \vec{x} = \lambda \vec{x}$ $\qquad$ A: $n \times n$ - Matrix

$\vec{x}$: Eigenvektor $\qquad$ λ: Eigenwert

$\rightarrow \quad (A - \lambda I) \cdot \vec{x} = 0$

nichttriviale Lösung, wenn $\quad \det(A - \lambda I) = 0$

charakteristisches Polynom $f^{(n)}(\lambda)$ n-ten Grades

$f^{(n)}(\lambda)$: charakteristisches Polynom : hat genau n Nullstellen

$\rightarrow$ $n \times n$ - Matrix hat genau n Eigenwerte

- n klein : normale Verfahren anwenden
- n groß : Rechenverfahren zu umständlich und zu anfällig gegenüber Rundungsfehlern

Angenommen, $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \ldots \geq |\lambda_n|$

λ_1: dominanter Eigenwert $\qquad$ Eigenvektoren: $\vec{x}_1 \ldots \vec{x}_n$

beliebiger Vektor $\vec{x}$: $\quad \vec{x} = c_1 \vec{x}_1 + c_2 \vec{x}_2 + \ldots c_n \vec{x}_n \equiv \vec{x}^{(0)}$
(Entwicklung)

Wir betrachten $\quad A \cdot \vec{x}^{(0)} \equiv \vec{x}^{(1)} = c_1 \lambda_1 \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2 \vec{x}_2 + \ldots$
nach k Iterationen:

$$A^k \cdot \vec{x}^{(0)} = c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2^k \vec{x}_2 + \ldots \qquad \equiv \vec{x}^{(k)}$$

Benutzen, dass λ_1 dominanter Eigenwert ist, λ_1 ausklammern:

$$\rightarrow A^k \vec{x}^{(0)} = \lambda_1^k \left[c_1 \vec{x}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k \vec{x}_2 + \ldots c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \vec{x}_n \right]$$

$$\xrightarrow{k \text{ groß}} \lambda_1^k c_1 \vec{x}_1 + \cancel{\ldots} \quad , \text{wenn } c_1 \neq 0$$

$$\frac{(A^{k+1} \cdot \vec{x})_i}{(A^k \cdot \vec{x})_i} = \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} = \frac{\lambda_1^{(k+1)} c_1 x_{1,i}}{\lambda_1^k c_1 x_{1,i}} = \lambda_1$$

"Potenzmethode (von Mises)"

Rayleigh - Quotient:

$$\boxed{r^k \equiv \frac{\vec{x}^{(k)} \cdot A \cdot \vec{x}^{(k)}}{\vec{x}^{(k)} \cdot \vec{x}^{(k)}} \rightarrow \lambda_1}$$

Berücksichtigung aller Komponenten!

übrige Eigenwerte:

- betragskleinster Eigenwert: durch Anwenden der Potenzmethode auf A^{-1}
- andere Eigenwerte:

  Setze $\mu \neq \lambda_i$ für $i = 1..n$,

  betrachte $(A - \mu I)^{-1}$, besitzt Eigenwerte

  $\frac{1}{\lambda_i - \mu}$, Eigenvektoren $\vec{x}_i$

Wenn gilt: $|\lambda_j - \mu| < |\lambda_i - \mu|$ (μ in der Nähe von λ_j)

so ist $\frac{1}{\lambda_j - \mu}$ der dominante Eigenwert von $(A - \mu I)^{-1}$

$\Rightarrow$ Potenzmethode kann wieder angewandt werden, um λ_j zu erhalten

Wenn μ schon eine gute Näherung für λ_j ist ~~to~~ konvergiert das Verfahren schnell.

Welchen Startwert sollte man für μ verwenden?

$\Rightarrow$ Kreissatz von Gerschgorin (Lokalisierung von Eigenwerten)

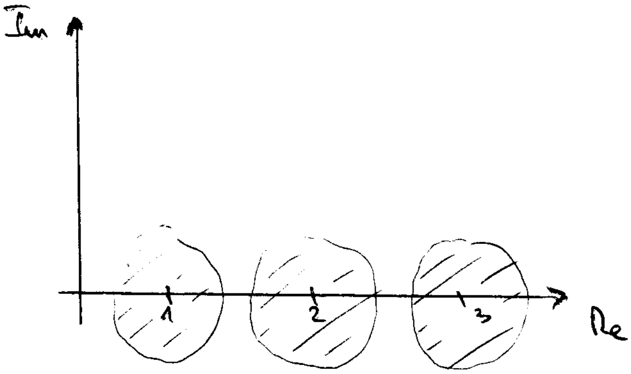
<u>Kreissatz von Gerschgorin</u>

" Jeder Eigenwert liegt in einem der Kreise um a_{ii} mit dem Radius

$$R_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad , \; i = 1, 2, \ldots n \qquad "$$

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0{,}1 & -0{,}2 \\ 0 & 2 & 0{,}4 \\ -0{,}2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$



$|\lambda_1 - 1| \leq 0{,}3 \qquad |\lambda_3 - 3| \leq 0{,}2 \qquad |\lambda_2 - 2| \leq 0{,}4$

30.11.06

<u>Beweis:</u>

Sei $A\vec{x} = \lambda \vec{x}$, $|x_i| := \max_j |x_j|$
($= \|\vec{x}\|_\infty$, Zeilensummennorm)

$$\rightarrow (a_{ii} - \lambda) x_i = - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j$$

$$\rightarrow |a_{ii} - \lambda| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \left| \frac{x_j}{x_i} \right|$$

$$\leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \qquad \square$$

oft: in jedem Schritt: $|\vec{x}^{(k)}| \stackrel{!}{=} 1$

Weitere Konvergenz beim Gauß-Seidel-Verfahren

Zusätzlich zu dem oben genannten Fall, konvergiert das Verfahren ebenfalls, wenn A symmetrisch und positiv definit ist ($\lambda_i > 0$; $i = 1..n$)

Ausgleichsproblem

Ziel: Anpassung einer Funktion an eine Messreihe: Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate (Gauß) für ein Polynom vom Grad m

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \quad ... \quad + a_m x^m$$

Summe der Quadrate der Fehler:

$$\bar{\chi}^2 = \sum_{i=0}^{n-1} [y_i - p(x_i)]^2 \qquad \text{Messungen: } (x_i, y_i)$$

$\bar{\chi}^2$ soll durch geeignete Wahl der Koeffizienten minimiert werden

$$\frac{\partial \bar{\chi}^2}{\partial a_k} \stackrel{!}{=} 0 \quad \rightarrow \quad -2 \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k \, [y_i - p(x_i)] \stackrel{!}{=} 0 \quad ; k = 0..m$$

$$s_k \equiv \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k$$

$$t_k \equiv \sum_{i=0}^{n-1} y_i x_i^k$$

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 + \dots + s_m a_m = t_0$$
$$s_1 a_0 + s_2 a_1 + \dots + s_{m+1} a_m = t_1$$
$$\vdots$$
$$s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \dots + a_{2m} a_m = t_m$$

$$A \cdot \vec{a} = \vec{t} \quad ; \quad A = \begin{pmatrix} s_0 & s_1 & \dots & s_m \\ s_1 & s_2 & \dots & s_{m+1} \\ \vdots & & & \\ s_m & s_{m+1} & \dots & s_{2m} \end{pmatrix}$$

<u>Achtung</u>: Für große m ist das System schlecht konditioniert (numerisch instabil)

angenommen x_i äquidistant in $[0,1]$
$(n-1)$ Intervalle

$$\rightarrow \frac{1}{n-1} \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k \underset{\substack{\uparrow \\ m \\ \text{groß}}}{\hat{=}} \int_0^1 dx\, x^k = \frac{1}{k+1}$$

$$\rightarrow A \simeq (n-1) \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots & \frac{1}{m+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots & \vdots \\ \frac{1}{m+1} & \frac{1}{m+2} & & \dots & \frac{1}{2m+1} \end{pmatrix}$$

Hilbertmatrix $H_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$

Hilbert-Matrizen: äußerst kleine Determinanten für große m

4x4-Matrix $(m=3)$ $\det A = 1.65 \cdot 10^{-7}$!

Wenn m groß ist: Singulärwertzerlegung (SVD)

Allgemein: lineare kleinste Quadrate

$$p(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j X_j(x)$$

Basisfunktionen können höchst- nichtlinear sein

minimiere:

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{y_i - p(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \stackrel{!}{=} 0 \quad , \quad k = 0 \dots m$$

$$\rightarrow \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i) \left[y_i - p(x_i) \right] \stackrel{!}{=} 0$$

Matrix - Notation:

$A \cdot \vec{a} = \vec{b}$ zu lösen z.B. mit Gauß-Jordan

$$b_k = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i) \, y_i$$

$$A_{kj} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_k(x_i) X_j(x_i)}{\sigma_i^2}$$

Fehleranalyse

betrachte Gaußsche Normalverteilung

$$p(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y} e^{-(y-\bar{y})^2/2\sigma_y^2}$$

$\bar{y}$ Erwartungswert von y:

$$\langle y \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, y\, P(y) = \bar{y}$$

σ_y^2 : Varianz

$$\langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \int_{-\infty} dy\, y^2 P(y) - \bar{y}^2$$

$$= \sigma_y^2$$

betrachte Messreihe: bei festen x_i : $y_{i,j}$, $j = 0 .. l-1$

wenn die Fehler statistisch verteilt sind, so ist die Verteilung der Messwerte eine Normalverteilung

- Für Normalverteilung $\int_{\bar{y}-\sigma_y}^{\bar{y}+\sigma_y} dy\, P(y) = 0{,}6826 = 68{,}3\,\%$
  (1 σ - Intervall)
- 2σ - Intervall : 95,4 %

Schätzwert für den Mittelwert $\bar{y}_i = \frac{1}{l} \sum_{j=0}^{l-1} y_i$ *

Schätzwert für die Standardabweichung $\sigma_y = \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^{l-1} (y_{i,j} - \bar{y}_i)^2}{l-1}}$

$l-1$ ist die Zahl der Freiheitsgrade:

$l -$ (Beziehung *)

5.12.06

$$f = f(y_0 .. y_{n-1})$$

$$\langle f(y_0 .. y_{n-1}) \rangle = \frac{1}{l} \sum_{j=0}^{l-1} f(y_{0,j}, y_{1,j} .. y_{n-1,j})$$

$$= f(\bar{y}_0 .. \bar{y}_{n-1})$$

Definition der Varianz

$$\sigma_f^2 = \langle (f(y_0 .. y_{n-1}) - \langle f(y_0 .. y_{n-1}) \rangle)^2 \rangle$$

$$= \left\langle \left(\sum_{i=0}^{n-1} \frac{\partial f}{\partial y_i}\bigg|_{\bar{y}_i} (y_i - \bar{y}_i) \right)^2 \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{i'=0}^{n-1} \frac{\partial f}{\partial y_i}\bigg|_{\bar{y}_i} \frac{\partial f}{\partial y_{i'}}\bigg|_{\bar{y}_{i'}} (y_i - \bar{y}_i)(y_{i'} - \bar{y}_{i'}) \right\rangle$$

$$= \sum_{i,i'} \frac{\partial f}{\partial y_i}\bigg|_{\bar{y}_i} \frac{\partial f}{\partial y_{i'}}\bigg|_{\bar{y}_{i'}} \underbrace{\langle (y_i - \bar{y}_i)(y_{i'} - \bar{y}_{i'}) \rangle}_{\delta_{ii'} \sigma_{y_i}^2}$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1} \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y_i}\bigg|_{\bar{y}_i} \right)^2 \qquad \text{Gaußsche Fehlerfortpflanzung}$$

<u>Weiterführung</u> : <u>lineare kleinste Quadrate</u>

$$p(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j X_j(x)$$

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{y_i - p(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 \qquad \text{soll minimal sein}$$

→ Matrix-Notation

$$A \cdot \vec{a} = \vec{b} \qquad , \quad b_k = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{y_i}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$A_{kj} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_k(x_i) X_j(x_i)}{\sigma_i^2} \qquad , \quad k,j = 0 \ldots m$$

(s.o.)

explizit:

$$a_j = \sum_{k=0}^{m} (A^{-1})_{jk} b_k$$

$$= \sum_{k=0}^{m} \sum_{i=0}^{n-1} (A^{-1})_{jk} \frac{y_i}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$\rightarrow \frac{\partial a_j}{\partial y_i} = \sum_{k=0}^{m} (A^{-1})_{jk} \frac{1}{\sigma_i^2} X_k(x_i)$$

$$\sigma_{a_j}^2 = \sum_{i=0}^{n-1} \cancel{\sigma_i^2} \sum_{k=0}^{m} (A^{-1})_{jk} \frac{1}{\cancel{\sigma_i^2}} X_k(x_i) \cdot \sum_{k'=0}^{m} (A^{-1})_{jk'} \frac{1}{\sigma_i^2} X_{k'}(x_i)$$

$$= \sum_{k,k'=0}^{m} (A^{-1})_{jk} (A^{-1})_{jk'} \underbrace{\sum_{i=0}^{n-1} \frac{X_k(x_i) X_{k'}(x_i)}{\sigma_i^2}}_{= A_{kk'}}$$

$$= \sum_{k'=0}^{m} (A^{-1})_{jk'} \delta_{jk'}$$

$$\boxed{\sigma_{a_j}^2 = (A^{-1})_{jj}}$$

Singulärwertzerlegung (SVD)

$$A = U \cdot \Sigma \cdot V^T$$

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $\qquad \Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2 \ldots \sigma_p)$

$U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ $\qquad p = \min\{m, n\}$

$V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ $\qquad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \ldots \geq \sigma_p \geq 0$

σ_i : Singuläre Werte

U, V orthogonal: $\quad U U^T = U^T U = 1$

$\qquad V V^T = V^T V = 1$

Spaltenvektoren von U und V : singuläre Vektoren

Vorteil bei der Lösung $A\vec{x} = \vec{b}$ nach der Methode der kleinsten Quadrate:

Setze $\vec{r} = \vec{b} - A\vec{x}$, $\vec{r}$ soll minimiert werden

$$F^2 = (A\vec{x}-\vec{b})^2 = (A\vec{x}-\vec{b})^T (A\vec{x}-\vec{b})$$

$$= (A \cdot V V^T \vec{x} - \vec{b})^T \cdot U U^T \cdot (A V V^T \vec{x} - \vec{b})$$

$$= (U^T A V V^T \vec{x} - U^T \vec{b})^T \cdot (U^T \cdot A \cdot V V^T \vec{x} - U^T \vec{b})$$

$$= (\Sigma \cdot \underbrace{V^T \cdot \vec{x}}_{\equiv \vec{z}} - \underbrace{U^T \vec{b}}_{\equiv \vec{d}})^T \cdot (\Sigma \cdot V^T \vec{x} - U^T \vec{b})$$

$$= (\Sigma \cdot \vec{z} - \vec{d})^2$$

F^2 wird minimiert durch $z_i = d_i / \sigma_i \quad ; \sigma_i \neq 0$

z_i beliebig $\quad ; \sigma_i = 0$

und $F_{min}^2 = \sum_i d_i^2$ für alle i mit $\sigma_i = 0$ oder $i > n$

Lösung des eigentlichen Problems

$$\vec{x} = V \cdot \vec{z}$$

- Maß für die Konditionierung einer Matrix

$C_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty \qquad \|M\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |m_{ij}|$

$C_E(A) = \|A\|_E \|A^{-1}\|_E \qquad$ Euklidische Norm

$= \sigma_{max} / \sigma_{min} \qquad \|M\|_E = \max_{|\vec{x}|=1} |M \cdot \vec{x}|$

<u>Algorithmus</u> zur Zerlegung in $\sigma_i, \vec{u}_i, \vec{v}_i$

i) finde Eigenwerte der Matrix $A^T \cdot A$, und ordne sie, sodass $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \lambda_n \geq 0$

$\rightarrow \boxed{\Sigma_{ii} = \sqrt{\lambda_i}}$

ii) finde Eigenvektoren $\vec{v}_i$

$$\rightarrow V = \vec{v}_1 \underset{\text{vereinigt}}{\underset{\uparrow}{\cup}} \vec{v}_2 \cup \vec{v}_3 \;..\; \cup \vec{v}_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

iii) finde $\vec{u}_i = \frac{1}{\sigma_i} A \vec{v}_i$ für $\sigma_i \neq 0$ und $j \leq n$

iv) finde Rest mit Hilfe von Gram-Schmidt:

$$\rightarrow U = \vec{u}_1 \cup \vec{u}_2 \;..\; \cup \vec{u}_m \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

7.12.06

Orthogonale Polynome

P_k: orthogonales Polynom auf dem Intervall $[a,b]$ mit Koeffizienten 1 des führenden Terms

$$\langle P_i, P_j \rangle = \delta_{ij}$$

Skalarprodukt $\langle f, g \rangle = \int_a^b dx\, \underset{\text{pos. definite Gewichtsfunktion}}{\underset{\uparrow}{w(x)}}\, f(x)\, g(x)$

Behauptung: Polynome können mit Hilfe einer Drei-Terme-Rekursion konstruiert werden

$$P_k(x) = (x + a_k)\, P_{k-1}(x) + b_k\, P_{k-2}(x) \qquad (\square)$$

$P_0 = 1 \qquad P_1(x) = x + a$

Beweis: nehme an $P_0 \ldots P_{k-1}$ schon konstruiert

$$P_k - x P_{k-1} = \sum_{j=0}^{k-1} d_j P_j$$

$$d_j = \frac{\langle P_k - x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle} \qquad ; \; j = 0 \ldots k-1$$

$$= \frac{\langle x P_{k-1}, P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

$$= - \frac{\langle P_{k-1}, x P_j \rangle}{\langle P_j, P_j \rangle}$$

$$d_0 = d_1 = \ldots = d_{k-3} = 0$$

$$d_{k-2} = - \frac{\langle x P_{k-1}, P_{k-2} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle} \overset{(\square)}{=} b_k \frac{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle}{\langle P_{k-2}, P_{k-2} \rangle} = b_k$$

$$d_{k-1} = - \frac{\langle P_{k-1}, x P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle} \overset{(\square)}{=} a_k \frac{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle}{\langle P_{k-1}, P_{k-1} \rangle} = a_k$$

$$\Rightarrow \quad P_k - x P_{k-1} = \sum_{j=k-2}^{k-1} d_j P_j = b_k P_{k-2} + a_k P_{k-1}$$

$\Rightarrow \quad \square$

q.e.d.

Rekursion braucht 2 Startwerte p_0, $p_1(x)$

Lösungen hängen linear von diesen Startwerten ab

$\rightarrow$ Lösungen bilden einen 2-dimensionalen Raum

Eine Drei-Terme-Rekursion liefert 2 unabhängige Lösungen

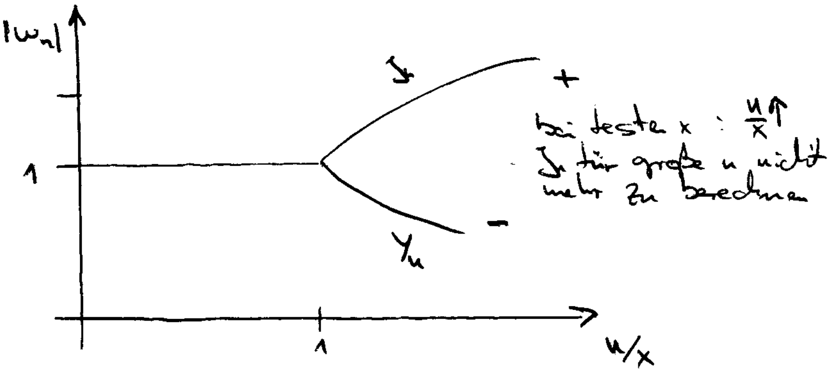
Stabilität:

Bessel: Setze $z_n = w^n$ ein

$$w^2 - 2\frac{n}{x} w + 1 = 0$$

$$\rightarrow w_\pm = \frac{n}{x} \pm \sqrt{\left(\frac{n}{x}\right)^2 - 1} \qquad \text{2 Lösungen}$$

$\boxed{\text{Stabilität bei Vorwärtsiteration wenn } |w| \leq 1}$



Chebyshev: $z_n = w^n$:

$$w^2 - 2xw + 1 = 0 \rightarrow w_\pm = x \pm \sqrt{x^2 - 1} \; ; \; -1 \leq x \leq 1$$

$$|w_\pm| = 1$$

$\rightarrow$ beide Lösungen stabil

Legendre: Im Limes $n \rightarrow \infty$ $\approx$ Chebyshev

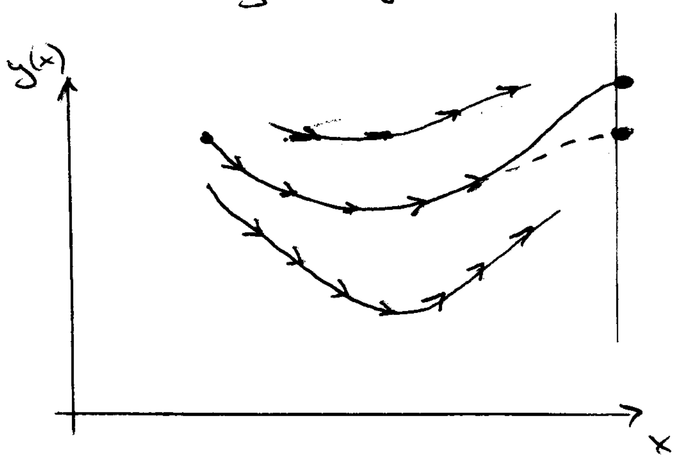
$\rightarrow$ beide Lösungen stabil

Gewöhnliche Differentialgleichungen

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \quad ; \quad y(x_0) = y_0$$

Anfangswert

Strömungsdiagramm



Rundungsfehler führen zur Abweichung von der Flusslinie

Beispiel: $\frac{dy}{dx} = \frac{1}{4}xy - 1$

$$\Rightarrow \quad y(x) - y_0 = \int_{x_0}^{x} dx' \, f(x', y(x'))$$

$x = x_0 + h$, h: Schrittweite

$$y(x_0+h) = y_0 + h \underbrace{f(x_0, y(x_0))}_{=: f_0} + O(h^2)$$

Tangentensteigung im Ausgangspunkt

↳ "einfaches Eulersches Verfahren"

Polygonzug: $y_{n+1} = y_n + h f_n \; ; \; f_n = f(x_n, y_n)$

Einschrittverfahren: Näherung y_{n+1} am neuen Punkt $x_{n+1} = x_n + h$ wird <u>allein</u> aus der Näherung y_n an den Stellen x_n und Schrittweite h berechnet

$$y(x_0+h) = y(x_0) + h\,\frac{f_0 + f(x_0+h, y(x_0+h))}{2} + O(h^3)$$

Polygonzug: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}) + O(h^3)$ ($\square$)

Näherung rechts: $y(x_0+h) = y_0 + h f_0$

$$\rightarrow \boxed{y(x_0+h) = y(x_0) + \frac{h}{2}\left[f_0 + f(x_0+h, y_0+hf_0)\right]}$$

verbessertes Eulersches Verfahren

$\square$ ist Pendant zu Trapezregel.

vgl. Simpsonsche Regel: $\int_{x_0}^{x_2} dx\, f(x) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) + O(h^5)$

hier:

$$\boxed{y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3}(f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2}) + O(h^5)}$$

Runge-Kutta-Verfahren

$$y_{n+1} = y(x_{n+1}) \overset{\text{(Taylor)}}{=} y_n + h f_n + \frac{h^2}{2}\Big(\underbrace{f_{n,x_n}}_{\frac{\partial f_n}{\partial x_n}} + f_n \underbrace{f_{n,y_n}}_{\frac{\partial f_n}{\partial y_n}}\Big) + O(h^3)$$

$f_n = f(x_n, y_n)$

$$\overset{!}{=} y_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 \qquad (2.\ \text{Ordnung})$$

$k_1 \equiv h f_n = h f(x_n, y_n)$

$k_2 \equiv h f(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1)$

$k_2 \overset{\text{Taylor}}{=} h f_n + a_2 h^2 f_{n,x_n} + h b_{21} k_1 f_{n,y_n}$

Vergleich: $h f_n + \frac{h^2}{2}(f_{n,x_n} + f_n f_{n,y_n}) \overset{!}{=} h(c_1+c_2)\overset{f_n}{\vee} + h^2 c_2 \cdot (a_2 f_{n,x_n} + b_{21} f_n f_{n,y_n})$

$c_1 + c_2 = 1$, $a_2 = b_{21}$, $c_2 a_2 = \frac{1}{2}$

i) $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$, $a_2 = b_{21} = 1$:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) + O(h^3)$$

(verb. Eulersches Verfahren

$k_1 = h f_n$

$k_2 = h f(x_n + h, y_n + k_1)$

ii) $c_1 = 0$, $c_2 = 1$ $a_2 = b_2 = \frac{1}{2}$:

$$y_{n+1} = y_n + k_2$$

$k_1 = h f_n$

$k_2 = h f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$

Beliebteste Integrationsmethode :

<u>Runge - Kutta - Verfahren vierter Ordnung</u>

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5)$$

$k_1 = h f_n$

$k_2 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})$

$k_3 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})$

$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3)$

14.12.06

Vereinfachung: $f = f(x)$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}[f(x_n) + 4f(x_n + \frac{h}{2}) + f(x_n + h)]$$

$$\overset{h=2h'}{=} y_n + \frac{h'}{3}[f(x_n) + 4f(x_n + h') + f(x_n + 2h')]$$

(Simpsonsche 1/3 - Regel

Schrittweitesteuerung, Adaptive Schrittweite

Schrittweite vergrößern oder verkleinern, wo es angebracht ist:

Verwende Schrittweite h und $\frac{h}{2}$ und vergleiche die beiden Ergebnisse miteinander – ist der Unterschied klein, dann wird vermutlich auch der Fehler klein sein.

-> Ist Fehler größer als zulässig: halbiere Schrittweite
-> Ist Fehler klein (unter vorgegebenen Wert): verdoppel Schrittweite

19.12.06

Fourier-Transformation

Entwicklung nach orthogonalen Funktionen

Betrachte: vollständiger Satz von Funktion $\psi_n(x)$ auf dem Intervall $[a:b]$

Orthonormal: $\int_a^b dx\, \psi_n(x)\, \psi_m(x) = \delta_{nm}$

beliebige Funktion lässt sich in eine Reihe nach ψ_n entwickeln:

$$f(x) = \sum_n a_n \psi_n(x)$$

$$\int_a^b dx\, \psi_n^* f(x) = \sum_m a_m \underbrace{\int_a^b dx\, \psi_n^* \psi_m}_{\to \delta_{nm}}$$

$$= a_n$$

Vollständigkeitsrelation: $\sum_n \psi_n^*(x')\, \psi_n(x) = \delta(x-x')$

Fourierentwicklung

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \cdot e^{i \cdot 2\pi n x/L}$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx\, f(x)\, e^{-i \cdot 2\pi n x/L}$$

$$c_0 = \frac{a_0}{2}$$

$$c_n = \frac{1}{2}(a_n - i b_n)$$

$\lim L \to \infty \quad : \quad \frac{2\pi n}{L} \to k$

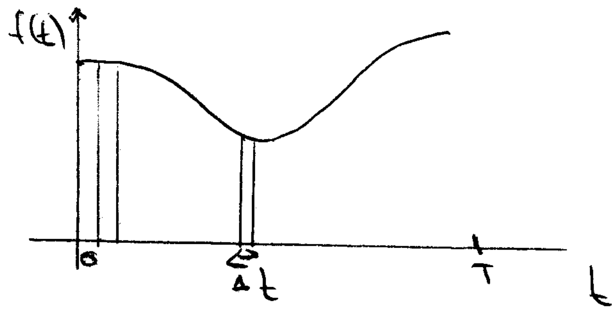
$$\frac{2\pi \overbrace{\Delta n}^{=1}}{L} = \Delta k$$

$$\sum_n \Delta n \to \frac{L}{2\pi} \int dk$$

$$\Rightarrow f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \; f(k) \cdot e^{+ikx}$$

Komplexe Darstellung

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \, e^{-i\omega_n t} \quad , \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{T} \quad , \text{ Intervall } [0,T]$$



$$c_n = \frac{1}{T} \int_0^T dt \, f(t) \, e^{i\omega_n t}$$

$$\to \sum_{m=0}^{N-1} f_m \, e^{i\omega_n}$$

$$f_m = f(t_m) = f(m \cdot \Delta t)$$

$$\to \sum_{m=0}^{N-1} f_m \, e^{i\omega_n (m \Delta t)}$$

21.12.06

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{-i\omega_n t} \quad ; \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{T}$$

...

$$\boxed{c_n = \sum_{m=0}^{N-1} f_m \cdot e^{i 2\pi n m/N}}$$ diskrete Fouriertransformierte (DFT)

N bekannte Größen : f_m , $m = 0 .. (N-1)$

können Transformierte nur für N Frequenzen berechnen

Betrachte:

$$\sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{-i2\pi n m/N} = \underbrace{\sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m'=0}^{N-1} f_{m'} \cdot e^{-i2\pi n(m-m')/N}}_{= N \cdot \delta_{mm'} \ (\square)}$$

$$= N \cdot f_m$$

$$\rightarrow f_m = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{-i2\pi n m/N}$$

Beweis von $(\square)$:

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{-i2\pi n(m-m')/N} = \sum_{n=0}^{N-1} r^n \quad , \quad r := e^{-i2\pi(m-m')/N}$$

$$= \begin{cases} N & , \ m = m' \\ 1 + r + r^2 + \ldots r^{N-1} = \frac{1-r^N}{1-r} = \frac{1-1}{1-r} = 0 & ; \ m \neq m' \end{cases}$$

Aufwand : $\underset{\substack{\uparrow \\ c_n}}{N} \times \underset{\substack{\uparrow \\ n=0,1,\ldots N-1}}{N} = N^2$ operationen

nicht durchführbar für große N !

Fast - Fourier - Transform

$$c_n = \sum_{m=0}^{N-1} f_m \, e^{i2\pi nm/N}$$

$$= \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} \cdot e^{i2\pi n(2m)/N} + \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} \, e^{i2\pi n(2m+1)/N}$$

mit geraden N

DFT mit halb so vielen Punkten

idem.

(1) $c_n = \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n \quad ; \omega = e^{i2\pi/N}$

(2) $c_{n+N/2} = \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^{n+\frac{N}{2}} \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^{n+N/2}$

jetzt: $n = 0, 1, \ldots, N/2-1$

$$(\omega^{2m})^{n+N/2} = (\omega^{2m})^n \cdot \underbrace{\omega^{2m \cdot N/2}}_{=1} = (\omega^{2m})^n$$

$$\omega^{n+N/2} = \omega^n \cdot \omega^{N/2} = -\omega^n$$

$\rightarrow$ umschreiben

(2*) $c_{n+N/2} = \sum_{m=0}^{N/2-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n - \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n$

$$c_n = c_n^{(e)} + \omega^n c_n^{(o)}$$

$$c_{n+\frac{N}{2}} = c_n^{(e)} - \omega^n c_n^{(o)}$$

$n = 0, 1, \ldots \frac{N}{2}-1$

$$c_n^{(e)} = \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} \left[f_{4m} (\omega^{4m})^n + f_{4m+2} (\omega^{4m+2})^n \right]$$

$$= \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}N/2-1} \left[f_{4m} (\omega^{4m})^n + \omega^{2n} f_{4m+2} (\omega^{4m})^n \right] \quad \text{jetzt } n = 0 \ldots \tfrac{1}{2}N/2 - 1$$

$$c^{(e)}_{n+\frac{1}{2}N/2} = \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}\frac{N}{2}-1} \left[f_{4m} (\omega^{4m})^{n+\frac{1}{2}\frac{N}{2}} + f_{4m+2} (\omega^{4m+2})^{n+\frac{1}{2}\frac{N}{2}} \right]$$

$$= \sum_{m=0}^{\frac{1}{2}\frac{N}{2}-1} \left[f_{4m} (\omega^{4m})^n - \omega^{2n} f_{4m+2} (\omega^{4m})^n \right]$$

...

usw. (divide & conquer)

Aufwand : $T(N) = \frac{N}{2} \log_2 (N)$

$c_0 = f_0 + f_2 + f_1 + f_3$

$c_1 = f_0 - f_2 + \omega (f_1 - f_3)$

$c_2 = f_0 + f_2 - (f_1 + f_3)$

$c_3 = (f_0 - f_2) - \omega (f_1 - f_3)$

$c_4 = \ldots$

vgl. $c_n = \sum_{m=0}^{3} f_m e^{i 2\pi n m/4}$

9.1.07

DFT : $f_n = \frac{1}{N} \cdot \sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{-i 2\pi n m / N}$

$\mathrm{Re}(c_n) = \sum \left[\mathrm{Re}(f_m) \cos\left(\frac{2\pi n}{N} m\right) - \mathrm{Im}(f_m) \sin\left(\frac{2\pi n}{N} m\right) \right]$

$\mathrm{Im}(c_n) - \sum \mathrm{Im}(f_m) \cancel{\cos} \qquad + \mathrm{Re}(f_m) \qquad \text{"} -$

FFT :

$c_n = \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n + \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n , \quad n = 0, 1, \ldots \frac{N}{2} - 1$

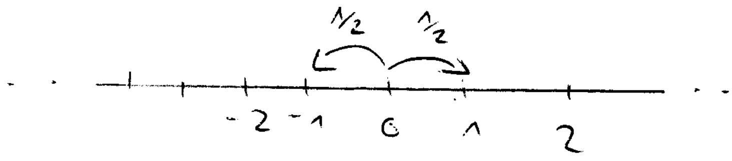
$\omega = e^{i 2\pi / N}$

$c_{n+\frac{N}{2}} = \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m} (\omega^{2m})^n - \omega^n \sum_{m=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2m+1} (\omega^{2m})^n$

Monte-Carlo-Simulation

11.01.07

Zufallsbewegung (1D)



Gitterabstand

gesucht:

$P_n(0 \to j)$: Wahrscheinlichkeit, dass der RW sich nach n Schritten am j. Gitterpunkt befindet

Rekursionsrelation:

$$P_n(0 \to j) = \frac{1}{2}\left[P_{n-1}(0 \to j-1) + P_{n-1}(0 \to j+1)\right]$$

mit $P_0(0 \to j) = \delta_{j,0}$

Lösung:
$$P_n(0 \to j) = \frac{n!}{2^n}\,\frac{1}{\left(\frac{n-j}{2}\right)!\left(\frac{n+j}{2}\right)!} = \frac{1}{2^n}\binom{n}{\frac{n+j}{2}}$$

für $|j| < n$, $n+j$ gerade

Für $n \gg 1$:
$$n! \approx \sqrt{2\pi}\, n^{n+\frac{1}{2}}\, e^{-n}$$

$$\left(\frac{n \pm j}{2}\right)! \approx \sqrt{2\pi}\left(\frac{n \pm j}{2}\right)^{\frac{n \pm j + 1}{2}} e^{-(n \pm j)/2}$$

$$P_n(0\to j) \simeq \frac{1}{2^n}\sqrt{2\pi}\, n^{n+\frac12}\, e^{-\cancel{n}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{+(\cancel{n}-j)/2}}{\left(\frac{n-j}{2}\right)^{\frac{n-j+1}{2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{+(\cancel{n}+j)/2}}{\left(\frac{n+j}{2}\right)^{\frac{n+j+1}{2}}}$$

$$\approx \frac{n^{n+\frac12}}{2^n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2^{\frac{n-j+1}{2}+\frac{n+j+1}{2}}}{(n-j)^{\frac{n-j+1}{2}}(n+j)^{\frac{n+j+1}{2}}}$$

$$P_n(0\to j) \underset{\substack{\uparrow \\ a^b = e^{b\ln a}}}{\approx} n^{n+\frac12}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, e^{-z} \quad ; \; z := \frac{n-j+1}{2}\ln(n-j) + \frac{n+j+1}{2}\ln(n+j)$$

$$= n^{n+\frac12}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, e^{-j^2/2n}$$

$$\boxed{P_n(0\to j) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi n}}\, e^{-j^2/2n}}$$

ungewöhnlich normierte Gauß-Verteilung

Normierung

Es muss gelten: $\sum_j P_n(0\to j) \stackrel{!}{=} 1$, $n+j$ grade

$\to \Delta j = 2 \quad |j| \le n$

$$\to \frac12 \int_{-\infty}^{+\infty} dj\, P_n(0\to j) = 1$$

Übergang zum Kontinuum $(a\downarrow)$: $x = j\cdot a$

$$P_{n+1}(0\to x) = \frac12\left(P_n(0\to x+a) + P_n(0\to x-a)\right)$$

$$P_n(0\to x+a) = P_n(0\to x) + a P_n'(0\to x) + \frac12 a^2 P_n''() + \dots$$

$$P_{n+1}(0\to x) = P_n(0\to x) + \frac{\partial P_n(0\to x)}{\partial n} + \dots$$

$$\to \boxed{\frac{\partial P_n}{\partial n} = \frac12 a^2 P_n''}$$ Diffusionsgleichung

Lösung für $p_n = \frac{P_n}{a}$

$$p_n(0\to x) = \left(\frac{1}{2\pi n a^2}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac12 \frac{x^2}{n\cdot a^2}\right].$$

$na^2 \to \text{const}$

RW in D-dim.

- Psendocode:

```
while l < n {
    Ziehe nächsten Nachbarn ∈ {1,2,...,2d}
    gehe dahin
    l++
}
```

- Rekursionsrelation: $P_n(\vec{x} \to \vec{x}') = \frac{1}{2d} \sum_{\pm \hat{\imath}} P_{n-1}(\vec{x} + a\hat{\imath} \to \vec{x})$

$\hat{\imath}$: Einheitsvektor in i-Richtung

mit $P_0(\vec{x} \to \vec{x}') = \delta_{\vec{x}\vec{x}'}$

- substrahiere:

$$P_n(\vec{x} \to \vec{x}') - P_{n-1}(\vec{x} \to \vec{x}') = \frac{1}{2d} \sum_{\pm\hat{\imath}} \left[P_{n-1}(\vec{x} + a\hat{\imath} \to \vec{x}') - P_{n-1}(\vec{x} \to \vec{x}') \right]$$

Limes $a \to 0$, $n \to \infty$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial n} P_n(\vec{x} \to \vec{x}') = \frac{a^2}{2d} \nabla^2 P_n(\vec{x} \to \vec{x}')}$$

$\to$ hier: $n-1 \approx n$

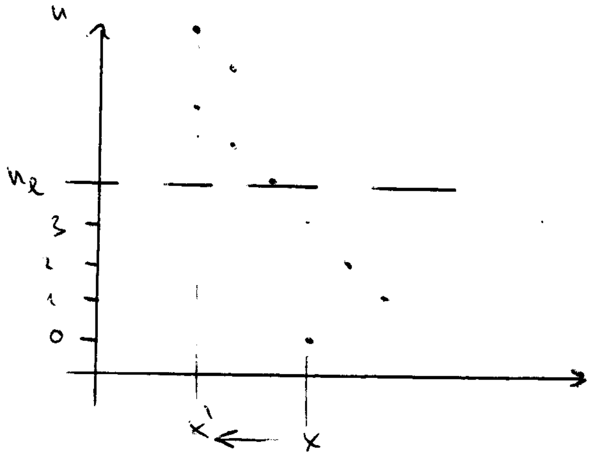
3-Punkte-Ausdruck:

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = f''(x) = \frac{f(x+a) - 2f(x) + f(x-a)}{a^2} + O(a^2)$$

- Lösung für $P_n = \frac{p_n}{a^d}$ $\to$

$$\boxed{P_n(\vec{x} \to \vec{x}') = \left(\frac{d}{2\pi n a^2}\right)^{d/2} \exp\left[-\frac{d}{2} \frac{(\vec{x} - \vec{x}')^2}{n a^2}\right]}$$

Gaußsche Verteilung



$P_n(\vec{x} \to \vec{x}\,') =$

$$\int d^d x\, P_{n_e}(\vec{x} \to \vec{x}_e\,') \cdot P_{n-n_e}(\vec{x}_e \to \vec{x}\,')$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung: Zwischenstop ist möglich

16.1.07

Beweisansatz der Chapman-Kolmogorov-Gleichung:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^d x_e\, e^{-c_1(\vec{x}-\vec{x}_e)^2} \cdot e^{-c_2(\vec{x}_e-\vec{x}\,')^2}$$

$$= \frac{\pi}{(c_1+c_2)^{\frac{d}{2}}}\, e^{-\frac{c_1 c_2}{c_1+c_2}(\vec{x}-\vec{x}\,')^2} \qquad (\text{Gauß})$$

Die Schritte lassen sich beliebig aufspalten, bis nur noch Einzelschritte gemacht werden

$$\Rightarrow P_n(\vec{x} \to \vec{x}\,') = \left[\prod_{l=1}^{n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} d^d x_l\, P_1(\vec{x}_{l-1} \to \vec{x}_l)\right] P_1(\vec{x}_{n-1} \to \vec{x}_n)$$

$$= \underbrace{\left[\prod_{l=1}^{n-1} \left(\frac{d}{2\pi a^2}\right)^{d/2} \int d^d x_l\right] \left(\frac{d}{2\pi a^2}\right)^{d/2}}_{:=\int D\vec{x}} \exp\left[-\frac{d}{2}\sum_{l=1}^{n-1} \frac{(\vec{x}_{l-1}-x_l)^2}{a^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{d}{2}\,\frac{(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})^2}{a^2}\right]$$

$$= \int D\vec{x}\, \exp\left[-\frac{d}{2}\sum_{l=1}^{n} \frac{(\vec{x}_{l-1}-\vec{x}_l)^2}{a^2}\right]$$

$$\frac{d}{2}\sum_{\ell=1}^{n}\frac{(\vec{x}_{\ell-1}-\vec{x}_{\ell})^2}{a^2} = \frac{1}{4}\sum_{\ell=1}^{n}\frac{a^2}{2d}\,\frac{(\vec{x}_\ell-\vec{x}_{\ell-1})^2}{(a^2/2d)^2}$$

definiere: $s := \frac{a^2}{2d}\,\ell \qquad \Delta s = \frac{a^2}{2d}\,\Delta\ell$

$$\ldots = \frac{1}{4}\int ds\, \dot{\vec{x}}^2(s) \quad , \quad \dot{\vec{x}} = \frac{d\vec{x}}{ds}$$

$s_n = \frac{a^2}{2d}\,n \;\rightarrow$ kont.

$$\boxed{P_n(\vec{x}\rightarrow\vec{x}') = \int D\vec{x}\, \exp\left[-\frac{1}{4}\int_0^{s_n} ds\, \dot{\vec{x}}^2(s)\right]}$$

Wienersches Integral

Integraldarstellung der Diffusionsgleichung

$P_n(\vec{x}\rightarrow\vec{x}')$: als Summe über <u>alle</u> möglichen Pfade von $\vec{x}$ nach $\vec{x}'$

jeder Pfad ist gewichtet mit einem Faktor

$$\exp\left[-\frac{1}{4}\int_0^{s_n} ds\, \dot{\vec{x}}^2\right]$$

lange Pfade: $\dot{\vec{x}}$ groß $\rightarrow$ exponentiell unterdrückt

brauchen nicht berücksichtigt werden

$$\boxed{P_n(\vec{x}\rightarrow\vec{x}') = \sum_{\text{Pfade}} e^{-S_0} \quad , \quad S_0 = \frac{1}{4}\int_0^{s_n} ds\, \dot{\vec{x}}^2}$$

Schreibe: $P_n(\vec{R}) := P_n(\vec{x}\rightarrow\vec{x}') = \left[\prod_{\ell=1}^{n-1}\int d\vec{r}_\ell\, P_1(\vec{r}_\ell)\right] P_1(\vec{r}_n)$

$\vec{R} = \vec{x}' - \vec{x} = \vec{x}_n - \vec{x}_0$

$\vec{r}_\ell := \vec{x}_\ell - \vec{x}_{\ell-1}$

$$P_n(\vec{R}) = \prod_{\ell=1}^{n}\int d\vec{x}_\ell\, P_1(\vec{r}_\ell)\,\delta\left(\vec{R}-\sum_{\ell=1}^{n}\vec{r}_\ell\right) = \left(\frac{d}{2\pi n a^2}\right)^{d/2} e^{-\frac{d}{2na^2}\vec{R}^2}$$

Endabstandsverteilung

Gyrationsradius

zuerst: $\langle \vec R^2 \rangle_n := \int d\vec R \, \vec R^2 \, P_n(\vec R)$

$$= \left(\frac{d}{2\pi n a^2}\right)^{d/2} \Omega_d \int_0^\infty dR \, R^{d+1}$$

↳ Kugeloberfläche $\Omega_d = \dfrac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} = \begin{cases} 2\pi, & d=2 \\ 4\pi, & d=3 \\ 2\pi^2, & d=4 \end{cases}$

$$= n a^2 \qquad (*)$$

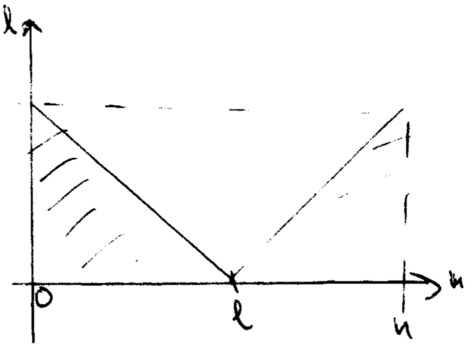
Gyrationsradius: R_n^2 (nicht zusammenhängend mit $\vec R^2$ o.ä.)

$$R_n^2 := \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} \langle (\vec x_l - \bar{\vec x})^2 \rangle ,$$

Schwerpunkt: $\bar{\vec x} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} \vec x_l$

$$= \frac{1}{2n^2} \sum_{l,m=1}^{n} \langle (\vec x_l - \vec x_m)^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2n^2} \sum_{l,m=1}^{n} |l-m| \, a^2$$



$$= \frac{1}{2n^2} \int_0^n dl \int_0^n dm \, |l-m| \, a^2$$

$$= \frac{1}{n^2} \int_0^n dl \int_0^l dm \, (l-m) \, a^2$$

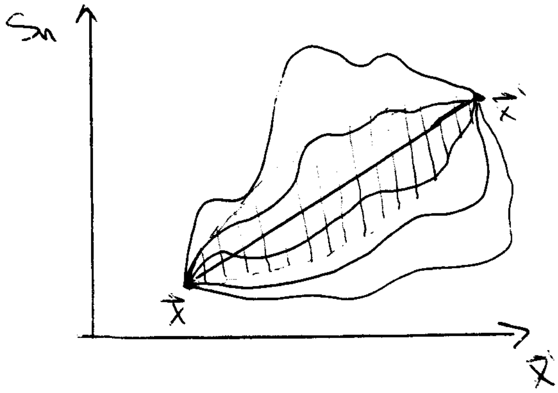
$$= \frac{1}{6n^2} a^2 \cdot n^3$$

$$= \frac{1}{6} n a^2$$

$R_n \sim n^{1/2}$

verallgemeinert: $R_n \sim n^{1/D}$

D: Hausdorff-fraktale-Dimension



exponentielle Unterdrückung!

23.1.07

Selbstmeidende Zufallsbewegungen (SAW)

Brownsche Zufallsbewegung: keine Beschränkung

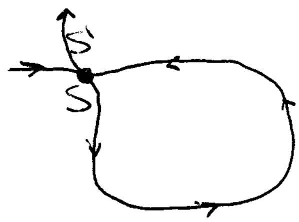
Edwardsches Modell (Kontinuum):

Für $P_n(\vec{x}-\vec{x}) = \int D\vec{x}\, \exp[-S_0]_n$, $S_0 = \frac{1}{4}\int_0^{S_n} ds\, \dot{\vec{x}}^2(s)$

(s.o.)

$$S = S_0 + g \int_0^{S_n} ds \int_0^{S_n} ds'\, \delta(\vec{x}(s) - \vec{x}(s')) \quad , \quad s \neq s'$$

Zusatzterm



: Knoten tragen jetzt ein Gewicht e^{-g}

Dies wirkt sich auch auf die fraktale Dimension aus (nach Flory):

$$S \sim n \frac{R_n^2}{n^2} + g n^2 \cdot \frac{1}{R_n^d}$$

$$\frac{\partial S}{\partial R_n} \overset{!}{=} 0 \quad : \quad \frac{R_n}{n} - g \frac{n^2}{R_n^{d+1}} = 0$$

$$\rightarrow \boxed{R_n^{d+2} \sim g n^3}$$

$$R_n \sim n^{3/d+2}$$

$$\Rightarrow \boxed{D = \frac{d+2}{3}}$$

Feynmansches Pfadintegral

25.1.07

Zeitabhängige SG: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x},t) = \hat{H}\, \Psi(\vec{x},t)$ (*)

Entwicklung nach Basisvektoren $u_n(\vec{x})$:

$$\hat{H}\, u_n(\vec{x}) = E_n u_n(\vec{x})$$

$$\Psi(\vec{x},t) = \sum_n c_n u_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

Entwicklungskoeffizienten: $c_n = \int d\vec{x}\, u_n^*(\vec{x})\, \Psi(\vec{x},0)$

Benutzt: $\int d\vec{x}\, u_n^*(\vec{x})\, u_m(\vec{x}) = \delta_{n,m}$

$$\Psi(\vec{x},t) = \sum_n \int d\vec{x}'\, u_n^*(\vec{x}')\, \Psi(\vec{x}',0)\; e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n(\vec{x})$$

$$= \int d\vec{x}'\; k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0)\; \Psi(\vec{x}',0)$$

$$k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0) := \sum_n u_n(\vec{x})\, e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n^*(\vec{x}')$$

k ist der Zeitentwicklungsoperator ("Propagator")

$$(*) \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0) = \hat{H}\, k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0)$$

imaginäre Zeit $t = -i\tau$ $\quad (\hat{H} = \hat{H}_0)$

$$\boxed{\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} k(\vec{x},\tau \leftarrow \vec{x}',0) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 k(\vec{x},\tau \leftarrow \vec{x}_0)} \quad (**)$$

vgl. Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial n} P_n(\vec{x} \to \vec{x}') = \frac{a^2}{2d} \nabla^2 P_n(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$s = \frac{a^2}{2d} n: \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial s} P_s(\vec{x} \to \vec{x}') = \nabla^2 P_s(\vec{x} \to \vec{x}')}$$

$$\to s \mathrel{\hat{=}} \frac{\hbar}{2m} \tau$$

Die Bogenlänge entspricht der Newtonschen Zeit
$\frac{\hbar}{2m}\tau$

Formale Lösung von (**): (wieder mit vollem $\hat{H}$)

$$\hat{U}(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Amplitude für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t\rangle = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t',t) | \vec{x}\rangle$$

Schrödingerbild Heisenbergbild

Zeitgitterung:

$$= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t_{n-1}) \hat{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots$$
$$\dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t) | \vec{x}\rangle$$

Umformen in Integraldarstellung (analog zum RW):
Dabei wird genutzt, dass $1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$,

$$\langle \vec{x}' | \vec{x}\rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

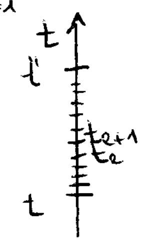
Dies wird eingeschoben in

$$\langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t_{n-1}) \underset{1}{\uparrow} \hat{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \underset{1}{\uparrow} \dots \underset{1}{\uparrow} \hat{U}(t_1, t) | \vec{x}\rangle$$

$n-1$ Einschübe

$$\Rightarrow \langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t\rangle = \left(\prod_{l=1}^{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}_l\right) \prod_{l=1}^{n} \langle \vec{x}_l, t_l | \vec{x}_{l-1}, t_{l-1}\rangle$$

mit: $\vec{x}_0 = \vec{x}$, $t_0 = t$
$\vec{x}_n := \vec{x}'$, $t_n := t'$



$$\varepsilon := t_l - t_{l-1} = \frac{t - t'}{n}$$

Volle Rechnung analog zu Chapman-Kolmogorov-Betrachtung beim RW

$$\langle \vec{x}_\ell, t_\ell | \vec{x}_{\ell-1} t_{\ell-1} \rangle = \langle \vec{x}_\ell | e^{-i \frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{H}} | \vec{x}_{\ell-1} \rangle$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$1 = \int \frac{dk}{(2\pi)^d} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| \quad , \quad \langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = (2\pi)^d \delta(\vec{k} - \vec{k}')$$

$$\langle \vec{k} | \vec{x} \rangle = e^{-i\vec{k}\vec{x}} = \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle^*$$

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \psi \rangle$$

$$= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}\vec{x}} \psi(\vec{k}) \qquad \text{IFT}$$

ε klein: $e^{-i/\hbar \, \varepsilon \hat{H}} \simeq e^{-i/\hbar \, \varepsilon \hat{V}} \, e^{-i/\hbar \, \varepsilon \hat{T}} \cdot \cancel{e^{-i \frac{\varepsilon^2}{\hbar} \frac{1}{2} [\hat{V}, \hat{T}]}}$

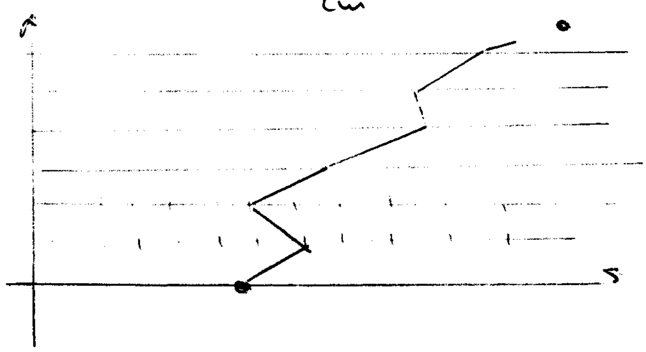
(Baker-Hausdorff)

[. . .]

$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ n \to \infty}}$:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle &\to \int D\vec{x}(t) \, e^{i/\hbar \, S[\vec{x}(t)]} \\ S[\vec{x}(t)] &= \int_{t}^{t'} d\bar{t} \left[\tfrac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2(\bar{t}) - V(\vec{x}(\bar{t})) \right] \end{aligned}}$$

vgl. $s \hat{=} \frac{i\hbar}{2m} t$



Gewichtung der versch. Pfade mit f der Wirkung $e^{i/\hbar S}$

30. 1. 07

Numerische Umsetzung: Metropolis-Methode

$$k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0) = \sum_n u_n(\vec{x}) \cdot e^{-E_n t/\hbar}\, u_n^*(\vec{x}') \quad {}^{1)}$$

$$\xrightarrow{\tau\to\infty} u_n(\vec{x})\, u_n^*(\vec{x}')\, e^{-E_0\tau/\hbar}$$

$$k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}\,0) \longrightarrow |u_0(\vec{x})|^2 e^{-E_0\tau/\hbar}$$

$$\int d\vec{x}\, k(\vec{x},\tau \leftarrow \vec{x},0) \longrightarrow e^{-E_0\tau/\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{|u_0(\vec{x})|^2 = \lim_{\tau\to\infty} \frac{k(\vec{x},\tau \leftarrow \vec{x},0)}{\int d\vec{x}\, k(\vec{x},\tau \leftarrow \vec{x},0)}}$$

$$|u_0(\vec{x})|^2 = \frac{\left[\prod_{l=1}^{n-1} \int d\vec{x}_l\right] \exp\left\{-\frac{\varepsilon'}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{\vec{x}_l-\vec{x}_{l-1}}{\varepsilon'}\right)^2 + V(\vec{x}_l)\right]\right\}}{\prod_{l=0}^{n-1} \text{------} \quad n \quad \text{------}}$$

$t = -i\tau$

$\Delta t = -i\Delta\tau$

$\varepsilon \;\;\; \varepsilon'$

$\vec{x}_0 = \vec{x}$

$\vec{x}_n = \vec{x}$

$$= \frac{1}{Z}\lim_{\tau\to\infty}\prod_{l=1}^{n-1}\int d\vec{x}_l\, e^{-\frac{\varepsilon'}{\hbar}S} \quad ; \quad S = \sum_{l=1}^{n}\frac{1}{2}m\left(\frac{\vec{x}_l-\vec{x}_{l-1}}{\varepsilon'}\right)^2 + V(\vec{x}_l)$$

$$Z = \lim_{\tau\to\infty}\left[\prod_{l=0}^{n}\int d\vec{x}_l\right] e^{-\frac{\varepsilon'}{\hbar}S}$$

$$|u_0(\vec{x})|^2 = \frac{1}{Z}\lim_{\tau\to\infty}\left[\prod_{l=0}^{n-1}\int d\vec{x}_l\right]\delta(\vec{x}_0-\vec{x})\, e^{-\frac{\varepsilon'}{\hbar}S}$$

Idee: $\dfrac{e^{-\frac{\varepsilon'}{\hbar}S}}{Z} = P(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \ldots \vec{x}_{n-1})$ Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Werte $\vec{x}_l$ der Atome

---

1) aus $k(\vec{x},t \leftarrow \vec{x}',0) = \sum_n u_n(\vec{x}) \cdot e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n^*(\vec{x}')$ mit $\tau := +it$

- Fange mit einem willkürlichen Pfad $\vec{x}_0, \dots, \vec{x}_{n-1}$ an
- Wie gelangen wir ins Gleichgewicht?

$$\vec{x}_e \longrightarrow \vec{x}_e{}' \longrightarrow \Delta S$$

$$P(x, i+1) = P(x, i) + \sum_{x'} \left[P(x', i)\, W(x' \to x) - P(x, i)\, W(x \to x') \right]$$

↑ Zustand nach i Iterationen

Gleichgewicht: $P(x, i+1) = P(x, i) = P_g(x)$

→ "detailed balance":

$$P_g(x)\, W(x \to x') = P_g(x')\, W(x' \to x)$$

$$\frac{W(x \to x')}{W(x' \to x)} = \frac{P_g(x')}{P_g(x)} = \frac{e^{-\varepsilon/\hbar\, S(x')}}{e^{-\varepsilon/\hbar\, S(x)}} = e^{-\varepsilon/\hbar\, \Delta S}$$

Wähle $\begin{cases} W(x' \to x) = 1 & \text{wenn } W(x' \to x) > W(x \to x') \\ W(x \to x') = 1 & \text{sonst} \end{cases}$

$$W(x \to x') = \begin{cases} e^{-\varepsilon/\hbar\, \Delta S} & \Delta S > 0 \leftarrow \text{qm-Fluktuationen} \\ 1 & \Delta S < 0 \leftarrow \text{klassisch} \end{cases}$$

Auch wenn die Wirkung zunimmt (energetisch ungünstiger) gibt es noch eine Wahrscheinlichkeit für den Vorgang

Metropolis – Pseudocode:

MCI = Anzahl der MC-Schritte

while (i < MCI) {

wähle willkürlich ein Atom, setze

$\vec{x}_e \to x_e' = \vec{x}_e + (2 \cdot r - 1)\Delta$; r = Zufallsz. [0, 1)

Δ = max. zugelassene Auslenkung (Param) muss geschickt gewählt werden (50% sollen akzeptiert werden)

und berechne ΔS

wenn $\Delta S < 0$: akzeptiere

wenn $\Delta S > 0$: ziehe Zufallszahl r' und akzeptiere Vorschlag wenn

$r' < e^{-\frac{\varepsilon}{t_1}\Delta S}$

wenn akzeptiert:

$h(j')$++ $\vec{x}_e'$ in j'-bin

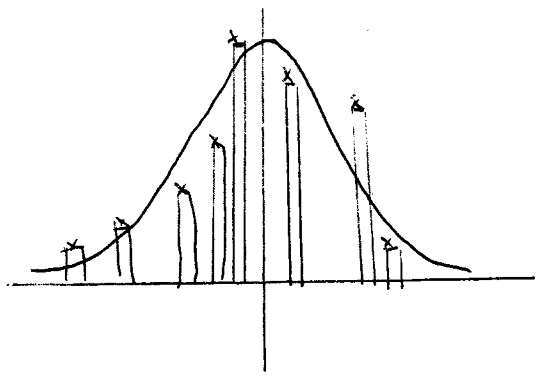
sonst

$h(j)$++ $\vec{x}_e$ in j-bin

i++

}

$$|u_0(\vec{X})|^2 = \frac{1}{\Delta x} \cdot \frac{1}{MCI} h(j) \quad ; \vec{x} \text{ in } j\text{-bin}$$



Ergebnisse folgen statistisch der Ergebniszielfunktion

Perkolationstheorie

Clusterverteilung: $n_s \sim s^{-\tau} \; e^{-\vartheta s}$; $\vartheta \propto |p-p_c|^{1/\sigma}$

↑ Entropiefaktor ↑ Boltzmanfaktor

n_s: Anzahl von Clustern mit s besetzten Gitterpunkten pro Gitterpunkt

System wird charakterisiert durch die Parameter τ und σ

p: Wahrscheinlichkeit, dass ein Gitterpunkt besetzt ist (Konzentration)

Interessant:

- mittlere Clustergröße: $S = \dfrac{\sum_s' s^2 n_s}{\sum_s' s n_s}$; $\sum'$: perkolierender Cluster ist ausgeschlossen von der Summe

$s \cdot n_s$: Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger Gitterpunkt zu einem s-Cluster gehört

$\sum_s' s n_s$: Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger Gitterpunkt zu irgendeinem endlich Cluster gehört

$\dfrac{s n_s}{\sum_s' s n_s}$: Wahrscheinlichkeit, dass ein besetzter Gitterpunkt zu einem s Cluster gehört

$\rightarrow \cdot s$ (Clustergröße) $\rightarrow \sum_s'$ mittlere Größe

P: Wahrscheinlichkeit dass ein beliebiger Gitterpunkt zum perkolierenden Cluster

$$\boxed{p = P + \sum_s' s n_s}$$

In der Nähe von p_c:

- $P \overset{!}{\sim} (p - p_c)^{\beta}$, $p > p_c$ $\boxed{\beta: \text{ kritischer Exponent}}$

In der Nähe der Perkolationsschwelle:

$$P \sim -\sum_s{}' s n_s \sim \int_0^\infty ds\, s \cdot s^{-\tau} e^{-\underbrace{\vartheta s}_{=x}}$$

$$= \vartheta^{\tau-2} \int_0^\infty dx\, x^{1-\tau} e^{-x}$$

$$\sim (p - p_c)^{\frac{\tau-2}{\sigma}}$$

- $S \sim |p - p_c|^{-\gamma}$

$$S = \frac{\sum_s{}' s^2 n_s}{\sum_s{}' s n_s} \sim \int_0^\infty ds\, s^2 s^{-\tau} e^{-\vartheta s}$$

$$\sim \vartheta^{\tau-3} \int_0^\infty dx\, x^{2-\tau} \cdot e^{-x}$$

$$\sim |p - p_c|^{\frac{\tau-3}{\sigma}}$$

$$\boxed{\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma}}$$

- $\ln \overset{\text{Zustandssumme}}{\overset{\downarrow}{Z}} \propto \sum_s{}' n_s \sim |p - p_c|^{2-\alpha}$

$$\boxed{2 - \alpha = \frac{\tau - 1}{\sigma} = 2\beta + \gamma}$$

- Gyrationsradius: $R_s^2 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^{s} |\vec{x}_i - \bar{\vec{x}}|^2$; $\bar{\vec{x}}$: Schwerpunkt $\bar{\vec{x}} = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s} \vec{x}_i$

$$\sim s^{2/D}$$

D: Hausdorff- oder fraktale Dimension

$$R_s^2 = \frac{1}{2s^2} \sum_{i,j=1}^{s} |\vec{x}_i - \vec{x}_j|^2$$

$\rightarrow R_s$ mittlerer Abstand zwischen 2 Gitterpunkten in einem s-Cluster

- Korrelationsfunktion: $g(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$: Wahrscheinlichkeit, dass $\vec{x}_i$ und $\vec{x}_j$ zum Cluster gehören

meistens $g(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = g(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)$

$\sum_{x_j} g(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ = mittlere Anzahl der Gitterpunkte die zum Cluster gehören zu dem auch $\vec{x}_i$ gehört

$= S$

- Korrelationslänge $\xi^2 = \dfrac{\sum_{x_j} |\vec{x}_i - \vec{x}_j|^2 g(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)}{\sum_{x_j} g(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)}$

mittlerer Abstand zweier Gitterpunkte die zum selben Cluster gehören

$$\xi^2_{p<p_c} = \frac{\sum_s 2 R_s^2 s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s}$$

$$\xi \sim |p-p_c|^{-\nu}$$

$$\xi^2 \sim \frac{\sum_s s^{2/D} s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s}$$

$$\sim \sigma^{-2/D} \sim |p-p_c|^{\frac{-2}{\sigma D}}$$

$$\boxed{\nu = \frac{1}{\sigma D}}$$

- Potenzgesetz: $g(|\vec{x}|) \sim |\vec{x}|^{-(d-2+\eta)} e^{-|\vec{x}|/\xi}$

$$S = \sum_{\vec{x}} g(|\vec{x}|)$$

$$|p-p_c|^{-\gamma} = \sum_{\vec{x}} \frac{e^{-|\vec{x}|/\xi}}{|\vec{x}|^{d-2+\eta}}$$

$$\sim \xi^{d-(d-2+\eta)}$$

$$\sim \xi^{2-\eta} \quad ; \quad \xi \sim |p-p_c|^{-\nu}$$

$$\sim |p-p_c|^{-(2-\eta)\nu}$$

$$\rightarrow \quad \boxed{\gamma = \nu(2-\eta)}$$

1.2.07

- Hyperscaling: $\ln Z \sim \xi^{-d}$ aus Dimensionsbetrachtungen

$$\sim |p-p_c|^{d\nu}$$
$$\doteq |p-p_c|^{2-\alpha}$$

$$\rightarrow \boxed{d\nu = 2-\alpha}$$

$$\rightarrow \frac{d}{\sigma D} = \frac{\tau-1}{\sigma}$$

$$\rightarrow \boxed{\tau = \frac{d}{D}+1}$$

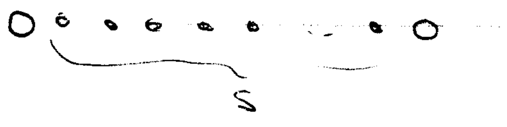
$$\frac{\beta}{\nu} = \frac{\tau-2}{\sigma}\cdot\sigma D = \left(\frac{d}{D}-1\right)D = d-D$$

$$\frac{\gamma}{\nu} = \frac{3-\tau}{\sigma}\sigma D = \left(2-\frac{d}{D}\right)D \doteq 2-\eta$$

$$\rightarrow 2D = d+2-\eta$$

$\eta = 0$: $\boxed{D = \frac{1}{2}(d+2)}$ (de-Gennes, vgl. Flory)

Eindimensionales Gitter



$$n_s = \underset{\substack{\uparrow\\ s\\ \text{besetzte}}}{p^s}\ \underset{\substack{\uparrow\\ 2\\ \text{unbesetzte}}}{(1-p)^2} \quad ; \quad p<1$$

$\rightarrow$ im unendlichen System gibt es immer Löcher

$p_c = 1$

$$\sum_s s n_s \stackrel{?}{=} p \qquad (p < p_c)$$

$$\sum_{s=1}^{\infty} s n_s = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} s p^s$$

$$= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p \frac{d}{dp} p^s$$

$$= (1-p)^2 \, p \cdot \frac{d}{dp} \sum p^s$$

$$= (1-p)^2 \, p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right) = p. \qquad \checkmark$$

$$S \stackrel{?}{=} \frac{\sum s^2 n_s}{\sum s n_s} \qquad (p < p_c)$$

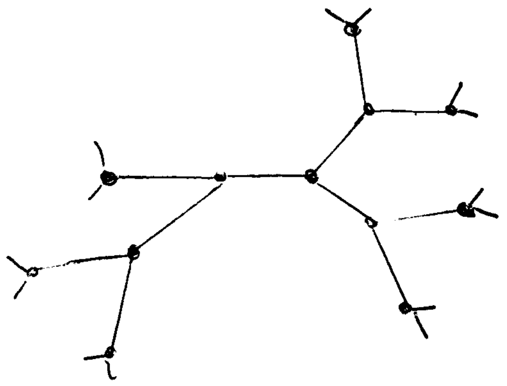
$$= \frac{1}{p} (1-p)^2 \sum s^2 p^2$$

$$= \frac{(1-p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum p^s$$

$$= \frac{1+p}{1-p}$$ tatsächlich divergent für $p \to p_c$ ✓

. . .

Bethe - Gitter



Gitterdimension ist unendlich
(keine Schleifen)

1. Generation: 3 Punkte
2. Generation: 6 Punkte
3. Generation: 12 Punkte

Eine Kugel mit r Generationen enthält

$$V(r) = 1 + 3\,(1 + 2 + 4 + \dots 2^{r-1})$$

$$\Rightarrow 1 + z\,\left(1 + (z-1) + \dots + (z-1)^{r-1}\right)$$

$$\Rightarrow V(r) = 1 + z \sum_{i=1}^{r} (z-1)^{i-1}$$

$$= 1 + z\,\frac{(z-1)^r - 1}{(z-1) - 1}$$

$$\Rightarrow V(r) = \frac{z(z-1)^r}{z-2} - \frac{2}{z-2}$$

- die letzte Generation aus $z\,(z-1)^{r-1}$ Punkte bildet die Oberfläche $S(r)$

$$S(r) = z\,(z-1)^{r-1}$$

Für große r: $\dfrac{S(r)}{V(r)} = \dfrac{z-2}{z-1}$

Perkolationsschwelle:

Im Mittel: $p(z-1)$ neu besetzte Nachbarn