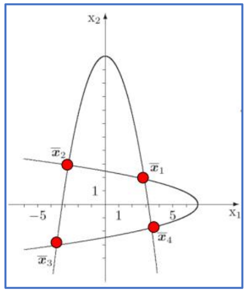
Nichtlineare Gleichungssysteme

Definition einer Funktion mit mehreren Variablen

Gegeben seine zwei Gleichungen

$$x_2 = -x_1^2 + 11$$

$$x_2 = \sqrt{-x_1 + 7}$$



In Funktionen $= 0$ umwandeln

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2 - 11 = 0$$

$$f_2(x_1, x_2) = x_1 + x_2^2 - 7 = 0$$

In Gleichungssystem umwandeln

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 - 11 \\ x_1 + x_2^2 - 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$$

Nullstellen einer nichtlinearen Funktion mit *n unabhängigen* Variablen mit Newton-Verfahren für Systeme

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n \text{ mit } f(x) = 0$$

Partielle Ableitung

In einer Dimension

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{(f(x_0 + \Delta x) - f(x_0))}{\Delta x}$$

In mehreren Dimensionen

1. Ableitung nach x: $\quad f_x = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x,y)}{\Delta x}$
2. Ableitung nach y: $\quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y+\Delta y) - f(x,y)}{\Delta y}$

Partielle Ableitung

Beispiel

$$z = f(x, y) = 3xy^3 + 10x^2y + 5y + 3y \cdot \sin(5xy)$$

- $\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 3 \cdot 1 \cdot y^3 + 10 \cdot 2x \cdot y + 0 + 3y \cdot \cos(5xy) \cdot 5 \cdot 1 \cdot y$
- $\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = 3x \cdot 3y^2 + 10x^2 \cdot 1 + 5 \cdot 1 + (3 \cdot 1 \cdot \sin(5xy) + 3y \cdot \cos(5xy) \cdot 5x \cdot 1)$

Steigung der beiden Tangenten in $x -$ resp. $y -$Richtung im Punkt $(x_0, y_0) = (-1,1)$

Linearisierung von Funktionen mit mehreren Variablen

Sei $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ mit $y = f(x)$ und $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$. Die *Jacobi-Matrix* $Df(x)$ enthält sämtliche partiellen Ableitungen 1. Ordnung von f.

$$f(x) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(x) \\ y_2 = f_2(x) \\ \vdots \\ y_m = f_m(x) \end{pmatrix}, \qquad Df(x) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

Die «verallgemeinerte Tangentengleichung»

$$g(x) = f\left(x^{(0)}\right) + Df\left(x^{(0)}\right) \cdot \left(x - x^{(0)}\right)$$

Beschreibt eine lineare Funktion und es gilt $f(x) \approx g(x)$ in einer Umgebung eines gegebenen Vektors $x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}\right)^T \in \mathbb{R}^n$. Man spricht deshalb auch von der Linearisierung der Funktion $y = f(x)$ in einer Umgebung von $x^{(0)}$.

Beispiel: Linearisieren Sie für $x^{(0)} = (\pi/4, 0, \pi)^T$ der Funktion $f(x_1, x_2, x_3)$

1. *Jacobi-Matrix* $Df(x_1, x_2, x_3)$ bilden

$$f(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} \sin(x_2 + 2x_3) \\ \cos(2x_1 + x_2) \end{pmatrix}, \qquad Df(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 0 & \cos(x_2 + 2x_3) & \cos(x_2 + 2x_3) \cdot 2 \\ -\sin(2x_1 + x_2) \cdot 2 & -\sin(2x_1 + x_2) & 0 \end{pmatrix}$$

2. Startvektor $x^{(0)}$ in *Vektorwertige Funktion* $f(x)$ und *Jacobi-Matrix* $Df(x)$ einsetzen

$$f(\pi/4, 0, \pi) = f\left(x^{(0)}\right) = \begin{pmatrix} \sin(0 + 2\pi) \\ \cos(2 \cdot \pi/4 + 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad Df\left(x^{(0)}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ -2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

3. Verallgemeinerte Tangentengleichung

$$g(x) = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{f(x_0)} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ -2 & -1 & 0 \end{pmatrix}}_{Df(x_0)} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 - \pi/4 \\ x_2 - 0 \\ x_3 - \pi \end{pmatrix}}_{x - x_0} = \begin{pmatrix} x_2 & +2x_3 & -2\pi \\ -2x_1 & -x_2 & +\pi/2 \end{pmatrix}$$

Nichtlineare Gleichungssysteme

Problemstellung zur Nullstellenbestimmung für nichtlineare Systeme

Es gibt keine einfachen Methoden, um festzustellen, ob ein nichtlineares Gleichungssystem lösbar ist und wie viele Lösungen es hat. Deshalb entscheidet die Wahl einer «geeigneten Startnäherug» meist über erfolgt oder Misserfolg der eingesetzten numerischen Verfahren.

Quadratisch konvergente Newton-Verfahren (Quadratische Konvergenz)

Lösung von $f(x) = 0$ mit $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ für $n = 0,1,2,\dots$

1. Berechne $f\left(x^{(n)}\right)$ und $Df\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right)$
2. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des lin. GS $Df\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \cdot \delta^{(n)} = -f\left(x^{(n)}\right)$
3. Setze $x^{(n+1)} := x^{(n)} + \delta^{(n)}$

Vereinfachtes Newton-Verfahren (Lineare Konvergenz)

Lösung von $f(x) = 0$ mit $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ für $n = 0,1,2,\dots$

1. Berechne $f\left(x^{(n)}\right)$ und $Df\left(\boldsymbol{x}^{(\mathbf{0})}\right)$
2. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des lin. GS $Df\left(\boldsymbol{x}^{(\mathbf{0})}\right) \cdot \delta^{(n)} = -f\left(x^{(n)}\right)$
3. Setze $x^{(n+1)} := x^{(n)} + \delta^{(n)}$

Gedämpftes Newton-Verfahren

Nur in der Nähe der Nullstelle ist Konvergenz des Verfahrens garantiert!

1. Berechne $f\left(x^{(n)}\right)$ und $Df\left(x^{(n)}\right)$
2. Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des lin. GS $Df\left(x^{(n)}\right) \cdot \delta^{(n)} = -f\left(x^{(n)}\right)$
3. Finde das minimale $k \in \{0, 1, \dots, k_{max}\}$ mit
$$\left\| f\left(x^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}\right)\right\|_2 < \left\| f\left(x^{(n)}\right)\right\|_2$$
   Kein minimales k gefunden $\to k = 0$
4. Setze
$$x^{(n+1)} := x^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}$$

Beispiel mit *Newton-Verfahren*

Gegeben sind zwei Gleichungen und der Start-Vektor $x^{(0)} = (2, -1)^T$

$$1 - x^2 = y^2, \qquad \frac{(x-2)^2}{a} + \frac{(y-1)^2}{b} = 1$$

Umwandlung in Funktionen $f_1, f_2 = 0$

$$f_1(x,y) = 1 - x^2 - y^2 = 0, \qquad f_2(x,y) = \frac{(x-2)^2}{a} + \frac{(y-1)^2}{b} - 1 = 0$$

1: *Vektorwertige Funktion* und *Jacobi-Matrix* bilden

$$Df(x,y) = \begin{pmatrix} -2x & -2y \\ \frac{2x-4}{a} & \frac{2y-2}{b} \end{pmatrix}, \qquad f(x,y) = \begin{pmatrix} 1 - x^2 - y^2 \\ \frac{(x-2)^2}{a} + \frac{(y-1)^2}{b} - 1 \end{pmatrix}$$

1: Start-Vektor $x^{(0)}$ einsetzen

$$Df(2,-1) = \begin{pmatrix} -4 & 2 \\ 0 & -4/b \end{pmatrix}, \qquad f(2,-1) = \begin{pmatrix} -4 \\ 4/b - 1 \end{pmatrix}$$

2: Berechne $\delta^{(0)}$

$$\left(Df\left(x^{(0)}\right) \middle| -f\left(x^{(0)}\right)\right) = \left(\begin{array}{cc|c} -4 & 2 & 4 \\ 0 & -4/b & -4/b + 1 \end{array}\right) \to \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\delta^{(0)}}$$

3: Berechne $x^{(1)}$

$$x^{(1)} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}}_{x^{(0)}} + \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\delta^{(0)}} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Ausgleichsrechnung - Interpolation

Die **Interpolation** ist ein Spezialfall der linearen Ausgleichsrechnung, bei dem wir zu einer Menge von vorgegebenen Punkten eine Funktion suchen, die exakt durch diese Punkte verläuft.

Interpolationsproblem

Gegeben sind $n+1$ Wertepaare $(x_i, y_i), i = 0, \dots, n$ mit $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$. Gesucht ist eine stetige Funktion g mit der Eigenschaft $g(x_i) = y_i$ für alle $i = 0, \dots, n$.

Die **Polynominterpolation** kann mittels Linearem Gleichungssystem gelöst werden (Vandermonde-Matrix). Dies führt jedoch zu einer schlechten Konditionierung. Daher müssen anderen Verfahren verwendet werden.

Lagrange Interpolationsformel

Durch $n+1$ Stützpunkte mit verschiedenen Stützstellen gibt es genau ein Polynom $P_n(x)$ vom Grade $\leq n$, welches alle Stützpunkte interpoliert, d.h. wo gilt

$$P_n(x_i) = y_i, \qquad i = 0,1, \dots, n$$

$P_n(x)$ lautet in der Lagrangeform

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) \cdot y_i$$

Dabei sind die $l_i(x)$ die *Lagrangepolynome* vom Grad n definiert durch

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \qquad (i = 0,1, \dots, n)$$

Fehlerabschätzung

Sind die y_i Funktionswerte einer genügend oft stetig differenzierbaren Funktion f (also $y_i = f(x_i)$), dann ist der Interpolationsfehler an einer Stelle x gegeben durch

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{|(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)|}{(n+1)!} \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} f^{(n+1)}(\xi)$$

Beispiel

Gegeben sind

- $x = [0, 250, 500,1000]$
- $y = [1013,747,540,226]$

Berechnung der *Lagrangepolynome*

- $l_0 = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} \cdot \frac{x-x_2}{x_0-x_2} \cdot \frac{x-x_3}{x_0-x_3} = \frac{375-250}{0-250} \cdot \frac{375-500}{0-500} \cdot \frac{375-1000}{0-1000} = -0.078$
- $l_1 = \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \cdot \frac{x-x_2}{x_1-x_2} \cdot \frac{x-x_3}{x_1-x_3} = \frac{375-0}{250-0} \cdot \frac{375-500}{250-500} \cdot \frac{375-1000}{250-1000} = 0.625$
- $l_2 = \frac{x-x_0}{x_2-x_0} \cdot \frac{x-x_1}{x_2-x_1} \cdot \frac{x-x_3}{x_2-x_3} = \frac{375-0}{500-0} \cdot \frac{375-250}{500-250} \cdot \frac{375-1000}{500-1000} = 0.469$
- $l_3 = \frac{x-x_0}{x_3-x_0} \cdot \frac{x-x_1}{x_3-x_1} \cdot \frac{x-x_2}{x_3-x_2} = \frac{375-0}{1000-0} \cdot \frac{375-250}{1000-250} \cdot \frac{375-500}{1000-500} = -0.016$

Gesucht ist der y - Wert an der Stelle $x = 375$

$$P_n(375) = \sum_{i=0}^{n} l_i(375) \cdot y_i$$

$P_n(375) = -0.078 \cdot 1013 + 0.625 \cdot 747 + 0.469 \cdot 540 + -0.016 \cdot 226$

$P_n(375) = 637.328\, hPa$

Ausgleichsrechnung - Interpolation

Algorithmus *natürliche kubische Splinefunktion*

Gegeben seien $n+1$ Stützpunkte (x_i, y_i) mit monoton aufsteigenden Stützstellen (Knoten) $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ $(n \geq 2)$. Gesucht ist die natürliche kubische Splinefunktion $S(x)$, welche in jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit $= 0,1,\ldots,n-1$ durch ein kubisches Polynom

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

Berechnung der Polynome $S_i(x)$ für $i = 0,1,\ldots,n-1$:

1: Koeffizienten a_i, h_i, c_0, c_n

$$a_i = y_i, \qquad h_i = x_{i+1} - x_i, \qquad c_0 = 0, \qquad c_n = 0$$

2: Koeffizienten $c_1, c_2, \ldots c_{n-1}$ aus dem Gleichungssystem $(Ac = z)$

- $i = 1$
  $2(h_0 + h_1) \cdot c_1 + h_1 c_2 \quad = 3\frac{(y_2 - y_1)}{h_1} - 3\frac{(y_1 - y_0)}{h_0}$
- $n \geq 4 \to i = 2, \ldots, n-2$
  $h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i) \cdot c_i + h_i c_{i+1} \quad = 3\frac{(y_{i+1} - y_i)}{h_i} - 3\frac{(y_i - y_{i-1})}{h_{i-1}}$
- $i = n-1$
  $h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \cdot c_{n-1} \quad = 3\frac{(y_n - y_{n-1})}{h_{n-1}} - 3\frac{(y_{n-1} - y_{n-2})}{h_{n-2}}$

3: Koeffizienten b_i und d_i

- $b_i = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{h_i} - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} + 2c_i)$
- $d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)$

<u>Beispiel</u>

$$x = [4, 6, 8, 10], \qquad y = [6, 3, 9, 0], \qquad i = [0, 1, 2, 3], \quad n = 3$$

Koeffizienten a_i, h_i, c_0, c_n

- $a_i = y_i \qquad a = [6, 3, 9]$
- $h_i = x_{i+1} - x_i \qquad h = [2, 2, 2]$
- $c_0 = 0, \ c_n = 0$

Koeffizienten $c_1, c_2, \ldots c_{n-1}$ aus dem Gleichungssystem $(Ac = z)$

$$A = \begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) \end{pmatrix}, \qquad z = \begin{pmatrix} 3\frac{(y_2 - y_1)}{h_1} - 3\frac{(y_1 - y_0)}{h_0} \\ 3\frac{(y_3 - y_2)}{h_2} - 3\frac{(y_2 - y_1)}{h_1} \end{pmatrix}$$

$$Ac = z \to \left(\begin{array}{cc|c} 8 & 2 & 6 \\ 2 & 8 & -3 \end{array}\right), \qquad c = \begin{pmatrix} 2.55 \\ -3.45 \end{pmatrix}$$

Koeffizienten b_i und d_i

…

$$A = \begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & \square & \square \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & \ddots & \square \\ \square & \ddots & \ddots & h_{n-2} \\ \square & \square & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{pmatrix}, \qquad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \qquad z = \begin{pmatrix} 3\frac{(y_2 - y_1)}{h_1} - 3\frac{(y_1 - y_0)}{h_0} \\ \vdots \\ 3\frac{(y_n - y_{n-1})}{h_{n-1}} - 3\frac{(y_{n-1} - y_{n-2})}{h_{n-2}} \end{pmatrix}$$

Ausgleichsrechnung

Interpolation

- $S_0(x_0) = y_0$
- $S_1(x_1) = y_1$
- $S_2(x_2) = y_2$
- $S_2(x_3) = y_3$

Stetiger Übergang

- $S_0(x_1) = S_1(x_1)$
- $S_1(x_2) = S_2(x_2)$

Gleiche Steigung

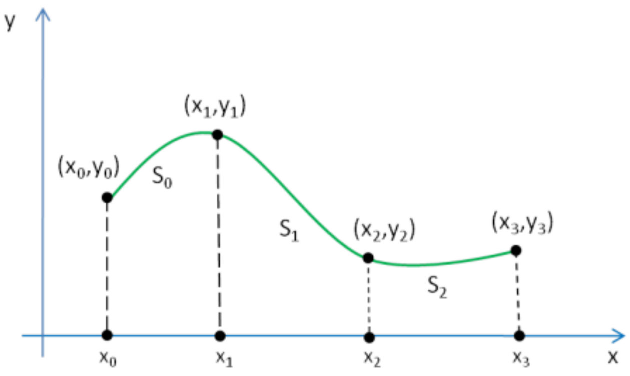
- $S_0'(x_1) = S_1'(x_1)$
- $S_1'(x_2) = S_2'(x_2)$

Gleiche Krümmung

- $S_0''(x_1) = S_1''(x_1)$
- $S_1''(x_2) = S_2''(x_2)$

Zwei Bedingungen sind frei wählbar

- Natürliche kubische Splinefunktion
  - $S_0''(x_0) = 0$
  - $S_2''(x_3) = 0$
- Periodische kubische Splinefunktion
  - $S_0'(x_0) = S_2'(x_3)$
  - $S_0''(x_0) = S_2''(x_3)$
- «not a knot» kubische Splinefunktion
  - $S_0'''(x_1) = S_1'''(x_1)$
  - $S_1'''(x_2) = S_2'''(x_2)$



Ausgleichsrechnung

Ziel der **Ausgleichsrechnung** ist eine Funktion zu finden, die die n Datenpunkte möglichst gut approximiert, wobei die Punkte nicht genau getroffen werden müssen.

Bei der ***linearen Ausgleichsrechnung*** ist die gesuchte Funktion $f(x)$ eine Linearkombination von m sogn. Basisfunktionen $f_i(x)$.

$$f(x) = \lambda_1 f_1(x) + \cdots + \lambda_m f_m(x), \qquad (i = 1,2,\ldots,m \text{ und } m \leq n)$$

Beispiele

$$f(x) = a \cdot e^x + c \cdot ln(x) + dx$$

$$f(x) = a \cdot \sin(x) + b$$

$$f(x) = a \cdot \sin(x) + bx^2$$

Bei der ***nicht-linearen Ausgleichrechnung*** treten die Parameter λ_i «verwoben» in der Funktionsgleichung auf

$$f = f(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m, x)$$

Beispiele

$$f(x) = a \cdot e^x + c \cdot ln(\boldsymbol{b}x) + dx$$

$$f(x) = \sin(\boldsymbol{a}x + \boldsymbol{b}) + cx$$

$$f(x) = \sin(\boldsymbol{a}x) + b$$

Ausgleichsproblem

Gegeben sind n Wertepaare $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ mit $x_i \neq x_j$ für $i \neq j$

Gesucht ist eine stetige Funktion $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, die die Wertepaare bestmöglich annähert, d.h. dass für alle $i = 1, \ldots, n$ möglichst genau gilt

$$f(x_i) \approx y_i$$

Gegeben sei eine Menge F von stetigen ***Ansatzfunktionen*** f auf dem Intervall $[a, b]$ sowei n Wertepaare $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$.

Ein Element $f \in F$ heisst ***Ausgleichsfunktion*** von F zu den gegebenen Wertepaaren, falls das ***Fehlerfunktional*** $E(f)$

$$E(f) \coloneqq \|y - f(x)\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \big(y_i - f(x_i)\big)^2$$

für f minimal wird, d.h. $F(f) = \min\{E(g) | g \in F\}$.

Man nennt das so gefundene f dann optimal im Sinne der ***kleinsten Fehlerquadrate***.

Vereinfachung eines ***nicht-linearen*** zu einem ***linearen Ausgleichsproblem***

Gegeben sei eine Funktion der Form $f(x) = ae^{bx}$. Hierbei handelt es sich um ein *nicht lineares Ausgleichsproblem*. Dieses kann jedoch zu einem linearen Ausgleichsproblem vereinfach werden.

$$\ln\big(f(x)\big) = \ln\big(ae^{bx}\big) = \ln(a) + b \cdot \ln(e^x) = \ln(a) \cdot \underbrace{1}_{f_1(x)} + b \cdot \underbrace{x}_{f_2(x)}$$

Achtung: Als Konsequenz müssen die y_i logarithmiert werden, weil aus $y = f(x)$ folgt $\tilde{y} = \ln\big(f(x)\big) = \tilde{f}(x)$.

Ausgleichsrechnung

Lineare Ausgleichsprobleme

Gegeben seien

- n Wertepaare $(x_i, x_i), i = 1, \dots, n$, und
- m Basisfunktionen $f_1, \dots, f_m$ auf einem Intervall $[a, b]$.

F ist die Menge der Ansatzfunktionen $f := \lambda_1 f_1 + \dots + \lambda_m f_m$ mit $\lambda_j \in \mathbb{R}$

$$F = \{f = \lambda_1 f_1 + \dots + \lambda_m f_m | \lambda_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, m\}$$

Lineares Ausgleichsproblem mit dem *Fehlerfunktional* $E(f)$

$$E(f) = \|y - f(x)\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f(x_i)\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j f_j(x_i)\right)^2 = \|y - A\lambda\|_2^2$$

Vor, wobei

$$A = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_1(x_n) & f_2(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{pmatrix}, \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \qquad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix}$$

Das System $A\lambda = y$ heisst *Fehlergleichungssystem*.

Gleichungen der folgenden Art heissen **Normalgleichungen** des lin. Ausgleichsproblems

$$\frac{\partial E(f)(\lambda_1, \dots, \lambda_m)}{\partial \lambda_j} = 0, \qquad j = 1, \dots, m$$

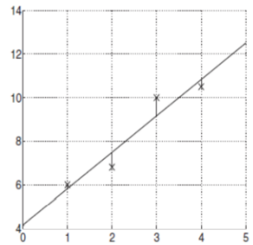
Das System sämtlicher Normalgleichungen heisst **Normalgleichungssystem**

$$A^T A \lambda = A^T y$$

Die Lösung $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$ des Normalgleichungssystems beinhaltet die gesuchten Parameter des linearen Ausgleichproblems.

Beispiel: Gegeben sei die Ansatzfunktion $f(x) = ax + b$ für die Werte

- $x = [1, 2, 3, 4]$
- $y = [6, 6.8, 10, 10.5]$



1: Basisfunktionen bestimmen

$$f(x) = a \cdot \underbrace{x}_{f_1(x)} + b \cdot \underbrace{1}_{f_2(x)}$$

2: Matrix A definieren für $n = 4$ und $m = 2$

$$A = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) \\ f_1(x_3) & f_2(x_3) \\ f_1(x_4) & f_2(x_4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

3: Normalgleichungssystem aufstellen $A^T A \lambda = A^T y$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 4 \end{pmatrix}$$

$$A^T y = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ 6.8 \\ 10 \\ 10.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 91.6 \\ 33.3 \end{pmatrix}$$

4: Gleichung auflösen

$$\begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 91.6 \\ 33.3 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.67 \\ 4.15 \end{pmatrix}$$

Ausgleichsrechnung

Allgemeines Ausgleichsprobleme

Gegeben sind n Wertepaare (x_i, x_i) und Ansatzfunktionen $f_p = f_p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, x)$ mit m Parametern $\lambda_j \in \mathbb{R}$.

Gesucht sind m Parameter $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)^T$so, dass das **nichtlineare** Fehlerfunktional $E(f)$

$$E(f) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f_p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, x_i)\right)^2 \to min$$

$$\equiv \|y - f(\lambda)\|_2^2 \to min$$

minimal wird unter allen zulässigen **Belegungen** der Parameter λ, wobei

$$f(\lambda) \coloneqq f(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \coloneqq \begin{pmatrix} f_1(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \\ f_2(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \\ \vdots \\ f_n(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \end{pmatrix} \coloneqq \begin{pmatrix} f_p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, x_1) \\ f_p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, x_2) \\ \vdots \\ f_p(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, x_n) \end{pmatrix}$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \qquad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_m \end{pmatrix}$$

Das System $A\lambda = y$ heisst Fehlergleichungssystem.

Beispiel

Gegeben sei die Ansatzfunktion $f(x) = ae^{bx}$ für die Werte

- $x = [0,1,2,3,4]$
- $y = [3,1,0.5,0.2,0.05]$

Fehlerfunktional

$$E(f) = \sum_{i=1}^{5} \left(y_i - f_p(a, b, x_i)\right)^2 = \sum_{i=1}^{5} (y_i - ae^{bx})^2$$

Vektorwertige Funktion $f(a, b)$ bilden

$$f(a, b) = \begin{pmatrix} ae^{bx_1} \\ \vdots \\ ae^{bx_5} \end{pmatrix}, \qquad y = \begin{pmatrix} 3 \\ \vdots \\ 0.05 \end{pmatrix}$$

Funktion $g(a, b)$ und *Jacobi-Matrix* $Df(a, b)$ bilden

$$g(a, b) = y - f(a, b) = \begin{pmatrix} y_1 - ae^{bx_1} \\ \vdots \\ y_5 - ae^{bx_5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 - ae^{bx_1} \\ \vdots \\ 0.05 - ae^{bx_5} \end{pmatrix}$$

$$Dg(a, b) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -e^{b\cdot 1} & -1ae^{b\cdot 1} \\ -e^{b\cdot 2} & -2ae^{b\cdot 2} \\ -e^{b\cdot 3} & -3ae^{b\cdot 3} \\ -e^{b\cdot 4} & -4ae^{b\cdot 4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -e^{-1.5} & -1e^{-1.5} \\ -e^{-3} & -2e^{-3} \\ -e^{-4.5} & -3e^{-4.5} \\ -e^{-6} & -4e^{-6} \end{pmatrix}$$

Nicht Lineares Ausgleichsproblem mit entsprechendem Verfahren lösen…

- Gauss-Newton oder gedämpftes Gauss-Newton

Gauss-Newton-Verfahren / Gedämpftes Gauss-Newton-Verfahren

Berechne die Funktion $g(\lambda)$ sowie deren Jacobi-Matrix

$$g(\lambda) := y - f(\lambda), \qquad Dg(\lambda)$$

Für $k = 0,1 \ldots$:

Schritt 1: Berechne $\delta^{(k)}$ als Lösung des linearen Ausgleichsproblems

$$min\left\|g(\lambda^{(k)} + Dg(\lambda^{(k)}) \cdot \delta^{(k)}\right\|_2^2$$

d.h. löse konkret das folgende Normalgleichungssystem nach $\delta^{(k)}$ auf

$$Dg(\lambda^{(k)})^T Dg(\lambda^{(k)})\delta^{(k)} = -Dg(\lambda^{(k)})^T \cdot g(\lambda^{(k)})$$

Dies wird am stabilsten mit der QR-Zerlegung von $Dg(\delta^{(k)})$ erreicht

$$Dg(\lambda^{(k)}) = Q^{(k)}R^{(k)}, \qquad R^{(k)}\delta^{(k)} = -Q^{(k)\,T}g(\lambda^{(k)})$$

Schritt 2: (Nur beim gedämpften Gauss-Newton)

Finde das minimale $p \in \{0,1,\ldots,p_{max}\}$ mit

$$\left\|g\underbrace{\left(\lambda^{(k)} + \frac{\delta^{(k)}}{2^p}\right)}_{\lambda^{(k+1)}}\right\|_2^2 < \left\|g(\lambda^{(k)})\right\|_2^2$$

Falls kein minimales p gefunden werden kann, rechne mit $p = 0$ weiter

Schritt 3: (Gauss-Newton)

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \delta^{(k)}$$

Schritt 3: (gedämpftes Gauss-Newton)

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \frac{\delta^{(k)}}{2^p}$$

<u>Beispiel Fortsetzung</u>

Gegeben sei...

$$f(a,b) = \begin{pmatrix} ae^{bx_1} \\ \vdots \\ ae^{bx_5} \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 3 \\ \vdots \\ 0.05 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \lambda_0 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1.5 \end{pmatrix}$$

Funktion $g(a,b)$ und *Jacobi-Matrix* $Df(a,b)$ bilden

$$g(a,b) = y - f(a,b) = \begin{pmatrix} y_1 - ae^{bx_1} \\ \vdots \\ y_5 - ae^{bx_5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3-1 \\ \vdots \\ 0.05 - e^{-6} \end{pmatrix}$$

$$Dg(a,b)\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -e^{b\cdot 1} & -1ae^{b\cdot 1} \\ -e^{b\cdot 2} & -2ae^{b\cdot 2} \\ -e^{b\cdot 3} & -3ae^{b\cdot 3} \\ -e^{b\cdot 4} & -4ae^{b\cdot 4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -e^{-1.5} & -1e^{-1.5} \\ -e^{-3} & -2e^{-3} \\ -e^{-4.5} & -3e^{-4.5} \\ -e^{-6} & -4e^{-6} \end{pmatrix}$$

Schritt 1:

- QR-Zerlegung $\quad Dg(\lambda^{(0)}) = Q^{(0)}R^{(0)}$
- Auflösen nach $\delta^{(k)}$ $\quad R^{(0)}\delta^{(0)} = -Q^{(0)\,T}g(\lambda^{(0)})$

$$\delta^{(0)} = \begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.89 \end{pmatrix}$$

Schritt 3:

- Lambda berechnen $\quad \lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \delta^{(k)}$

$$\lambda^{(1)} = \lambda^{(0)} + \delta^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1.5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.89 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.99 \\ 0.392 \end{pmatrix}$$

Numerische Integration

Problemstellung

Für viele Funktionen $f(x)$ existiert keine Stammfunktion $F(x)$, mit der das bestimmte Integral berechnet werden könnte.

Rechteckregel / Trapezregel

Die Rechteckregel Rf und die Trapezregel Tf zur Approximation von $I(f)$

$$Rf = f\left(\frac{a+b}{2}\right) \cdot (b-a), \qquad Tf = \frac{f(a)+f(b)}{2} \cdot (b-a)$$

Numerische Berechnungen auf einem Intervall $[a, b]$

- n — Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$
- $h = \frac{b-a}{n}$ — Breite der Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$
- x_i — $x_i = a + i \cdot h$
- $[x_0, \dots, x_n]$ — $x_0 = a,\ x_n = b$

summierte Rechtecksregel

$$Rf(h) = h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right)$$

summierte Trapezregel

$$Tf(h) = h \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$

Simpson-Regel

$$Sf(h) = \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{(x_{i-1}+x_i)}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

Fehlerabschätzung für summierte Quadraturformeln

$$\left|\int_a^b f(x)dx - Rf(h)\right| \le \frac{h^2}{24}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left|\int_a^b f(x)dx - Tf(h)\right| \le \frac{h^2}{12}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left|\int_a^b f(x)dx - Sf(h)\right| \le \frac{h^4}{2880}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

<u>Beispiel</u>

Berechnen Sie das Integral $I(x)$ mit der summierten Trapezregel mit $n = 4$

$$I(x) = \int_a^b \frac{1}{x} = \int_2^4 \frac{1}{x}, \qquad f(x) = \frac{1}{x}$$

$$a = 2, \qquad b = 4, \qquad x_i = [2, 2.5, 3, 3.5, 4], \qquad h = \frac{b-a}{n} = 0.5$$

$$Tf(h) = 0.5 \cdot \left(\frac{f(2)+f(4)}{2} + f(2.5) + f(3) + f(3.5)\right) = 0.95$$

Berechnen Sie den maximalen absoluten Fehler E_{max}

$$f''(x) = \frac{2}{x^3}, \qquad \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = |f''(2)| = \frac{1}{4}$$

$$\frac{h^2}{12}(b-a) \cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{24}$$

$$E_{max} = \frac{1}{24}$$

Numerische Integration

Gauss-Formeln

Die Stützstellen x_i müssen jedoch nicht zwingend äquidistant sein, sondern können so gewählt werden, dass sie das Integral $\int_a^b f(x)dx$ optimal approximieren. Man erhält dann die sogenannte Gauss-Formeln. Dafür werden die Stützstellen x_i und die Gewichte a_i in der generellen Quadraturformel

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$$

So gewählt, dass die 'Fehlerordnung' möglichst hoch wird bzw. der Fehler E möglichst klein.

$$E = \left| \int_a^b f(x)dx - I(f) \right|$$

Die Gauss Formel für $n = 1, 2, 3$ für $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} a_i\, f(x_i)$ lauten:

- $n = 1$: $G_1 f = (b-a) \cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)$
- $n = 2$: $G_2 f = \frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$
- $n = 3$: $G_3 f = \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(-\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + \frac{8}{9} \cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)\right] + \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$

<u>Beispiel</u>

Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} e^{-x^2} dx$$

Mit der summierten Trapezformel und Extrapolation für die Schrittweiten $h_j = \frac{(b-a)}{2^j}$ $(j = 0,1,2,3)$.

- $Tf\left(\frac{b-a}{2^0}\right) = \frac{0.5}{1} \cdot \left(\frac{f(0)+f(0.5)}{2}\right)$
- $Tf\left(\frac{b-a}{2^1}\right) = \frac{0.5}{2} \cdot \left(\frac{f(0)+f(0.5)}{2} + \sum_{i=0}^{1} f(x_i)\right)$
- $Tf\left(\frac{b-a}{2^2}\right) = \frac{0.5}{4} \cdot \left(\frac{f(0)+f(0.5)}{2} + \sum_{i=0}^{3} f(x_i)\right)$
- $Tf\left(\frac{b-a}{2^3}\right) = \frac{0.5}{8} \cdot \left(\frac{f(0)+f(0.5)}{2} + \sum_{i=0}^{7} f(x_i)\right)$

Romberg Extrapolation

Für die summierte Trapezregel $Tf(h)$ zur näherungsweisen Berechnung von $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ gilt:

Sei $T_{j0} = Tf\left(\frac{b-a}{2^j}\right)$ für $j = 0, 1, \dots, m$. Dann sind durch die Rekursion

$$T_{jk} = \frac{4^k \cdot T_{j+1,k-1} - T_{j,k-1}}{4^k - 1}$$

Für $k = 1, 2, \dots, m$ und $j = 0, 1, \dots, m-k$ Näherungen der Fehlerordnung $2k+2$ gegeben. Diese Methode heisst Romberg-Extrapolation. Die verwendete Schrittweitenfolge $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ heisst auch Romberg-Folge.

T_{j0}	T_{j1}	T_{j2}	T_{j3}
T_{00}			
	$T_{01} = \frac{4T_{10}-T_{00}}{3}$		
T_{10}		$T_{02} = \frac{16T_{11}-T_{01}}{15}$	
	$T_{11} = \frac{4T_{20}-T_{10}}{3}$		$T_{03} = \frac{64T_{12}-T_{02}}{63}$
T_{20}		$T_{12} = \frac{16T_{21}-T_{11}}{15}$	
	$T_{21} = \frac{4T_{30}-T_{20}}{3}$		
T_{30}			

Gewöhnliche Differentialgleichung n-ter Ordnung

Eine Gleichung, in der Ableitungen einer unbekannten Funktion $y = y(x)$ bis zur n-ten Ordnung auftreten

- *Gewöhnliche DGL 1-ter Ordnung* $y'(x) = f\big(x, y(x)\big)$
- *Gewöhnliche DGL n-ter Ordnung* $y^{(n)}(x) = f\left(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n-1)}(x)\right)$

Gesucht sind die Lösungen $y = y(x)$ dieser Gleichung, wobei die Lösungen y auf einem Intervall $[a, b]$ definiert sein sollen, $y: [a, b] \to \mathbb{R}$.

Anfangswertproblem

Bei einem Anfangswertproblem (AWP) für eine Differentialgleichung n-ter Ordnung werden der Lösungsfunktion $y = y(x)$ noch n Werte vorgeschrieben, nämlich der Funktionswert an einer bestimmten Stelle x_0 sowie die Werte der ersten $n - 1$ Ableitung an der gleichen Stelle.

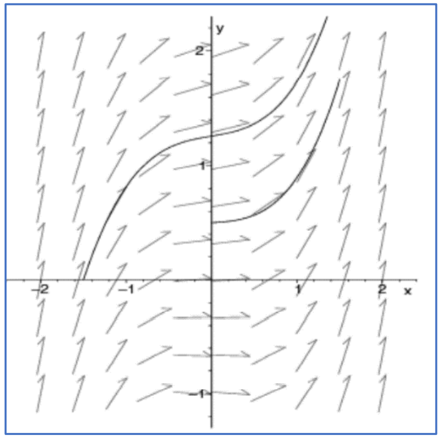
Für die hier betrachteten Differentialgleichungen 1. Und 2. Ordnung heisst das:

- DGL 1. Ordnung: Eindeutig lösbar, wenn… Startwert für $y(x)$ bei x_0: $y'(x) = f\big(x, y(x)\big)$ mit $y(x_0) = y_0$
- DGL 2. Ordnung: Eindeutig lösbar, wenn… Startwert für $y(x)$ und $y'(x)$ bei x_0: $y''(x) = f(x, y(x), y'(x))$ mit $y(x_0) = y_0$ und $y'(x_0) = y_1$

Richtungsfelder für Differentialgleichungen 1. Ordnung

DGL 1. Ordnung und ihre Lösungen lassen sich mit Hilfe von sogenannten Richtungsfeldern veranschaulichen. Ausgangspunkt ist die geometrische Interpretation

$$y'(x) = f\big(x, y(x)\big)$$



<u>Beispiel</u>

$$y'(x) = f\big(x, y(x)\big) = x^2 + 0.1 \cdot y(x)$$

Wir erhalten das Richtungsfeld, indem wir für jeden Punkt in der (x, y)-Ebene die zugehörige Steigung einzeichnen.

- $P(-1, 1)$ $y'(-1) = (-1)^2 + 0.1 \cdot 1 = 1.1$
- $P(0.5, 1)$ $y'(0.5) = (0.5)^2 + 0.1 \cdot 1 = 0.35$

Gezeigt sind die Lösungen für die Anfangswerte für die Anfangswerte $y(-1.5) = 0$ und $y(0) = 0.5$

Einführung in gewöhnliche Differentialgleichung

Gegeben sei für $x \in [a,b]$ das AWP

$$y' = f(x,y), \qquad y(a) = y_0$$

Wobei gilt

$$x_0 = a, x_i = a + ih \text{ für } i = 0, \dots, n-1 \text{ und } h = \frac{b-a}{n}$$

Klassische Euler-Verfahren

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$

Mittelpunkt-Verfahren

- $x_{\frac{h}{2}} = x_i + \frac{h}{2}$
- $y_{\frac{h}{2}} = y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i)$

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f\left(x_{\frac{h}{2}}, y_{\frac{h}{2}}\right)$$

Modifizierte Euler-Verfahren

Führe das klassische Euler-Verfahren durch

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$

Berechne die Tangentensteigungen k_1 und k_2

$$k_1 = f(x_i, y_i), \qquad k_2 = f(x_{i+1}, y_{i+1})$$

Bilde den Durchschnitt der Steigungen und mache einen Schritt h ausgehend vom ursprünglichen Punkt (x_i, y_i)

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{k_1 + k_2}{2}$$

<u>Beispiel</u>: Gegeben sei eine DGL y'

- Intervall $0 \le x \le 10$
- Anfangswertproblem $y(0) = 2$
- $h = 2$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{y}$$

Lösung mit *klassischem Euler-Verfahren*

Schritt 1:

- $x_1 = x_0 + h = 0 + 5 = 5$
- $y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 2 + 5 \cdot \frac{0^2}{2} = 2$

Schritt 2:

- $x_2 = x_1 + h = 5 + 5 = 10$
- $y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1) = 2 + 5 \cdot \frac{5^2}{2} = 64.5$

Klass. vierstufige Runge-Kutta Verfahren

- $k_1 = f(x_i, y_i)$
- $k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_1\right)$
- $k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_2)$
- $k_4 = f(x_i + h, y_i + h \cdot k_3)$

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{1}{6}(k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4)$$

Allg. s - stufige Runge-Kutta-Verfahren

Für $(n = 1, \dots, s)$ gilt

$$k_n = f\left(x_i + c_n h, y_i + h \sum_{m=1}^{n-1} a_{nm} k_m\right)$$

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{n=1}^{s} b_n k_n$$

Hierbei ist s die Stufenzahl und a_{nm}, b_n, c_n sind Konstanten.

$$\begin{array}{c|ccccc}
c_1 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & & & & & \\
c_n & a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & \\
\vdots & & & & & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
\end{array}$$

$$\text{klass. Runge-Kutta Verfahren, } s = 4: \quad \begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
0.5 & 0.5 & & & \\
0.5 & 0 & 0.5 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}$$

Rezept für das Zurückführen auf ein System erster Ordnung

1. Die Differentialgleichung nach der höchsten vorkommenden Ableitung der unbekannten Funktionen auflösen.
2. Neue Hilfsfunktionen für die unbekannte Funktion und deren Abteilungen bis Ordnung der höchsten Abteilung minus 1 einführen.
3. Das System erster Ordnung durch Ersetzen der höheren Ableitungen durch die neuen Funktionen aufstellen.
4. Das entsprechende Anfangswertproblem in vektorieller Form aufschreiben.

Beispiel: Gegeben sei die Differentialgleichung 3. Ordnung

$$y''' + 5y'' + 8y' + 6y = 10e^{-x}$$

Mit der Anfangsbedingung

$$y(0) = 2, \qquad y'(0) = y''(0) = 0$$

1. Auflösen nach der höchsten Ableitung
$$y''' = 10e^{-x} - 5y'' - 8y' - 6y$$
2. Einführen von Hilfsfunktionen z_1, z_2, z_3 bis zur zweiten Ableitung
$$z_1(x) = y(x)$$
$$z_2(x) = y'(x)$$
$$z_3(x) = y''(x)$$
3. Ableiten der Hilfsfunktionen
$$z_1' = y'(= z_2)$$
$$z_2' = y''(= z_3)$$
$$z_3' = y'''$$
$$= 10e^{-x} - 5y'' - 8y' - 6y$$
$$= 10e^{-x} - 5z_3 - 8z_2 - 6z_1$$
4. DGL in vektorieller Form schreiben
$$z' = \begin{pmatrix} z_1' \\ z_2' \\ z_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ 10e^{-x} - 5z_3 - 8z_2 - 6z_1 \end{pmatrix} = f(x, z),$$
$$z(0) = \begin{pmatrix} y(0) \\ y'(0) \\ y''(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1(0) \\ z_2(0) \\ z_3(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Rezept für das Lösen eines Systems von k DGL 1. Ordnung

Ist ein Lösungsverfahren

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y_{i+1} = y_i + Steigung \cdot h$$

Für die eindimensionale Gleichung

$$y'(x) = f\big(x, y(x)\big), \qquad y(x_0) = y_0$$

Definiert, so kann es völlig analog erweitert werden als

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + Steigung \cdot h$$

Für ein System

$$y' = f\big(x, y(x)\big) \; mit \; y(x_0) = y^{(0)}$$

Dabei werden ersetzt

- y' durch den Vektor y' der Abteilung der einzelnen Komponenten
- $f(x, y(x))$ durch die vektorwertige Funktion $f(x, y(x))$ und
- Die Anfangsbedingung $y(x_0) = y_0$ durch $y(x_0) = y^{(0)}$

$$y(x) = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \\ \vdots \\ y_n(x) \end{pmatrix}, y' = \begin{pmatrix} y_1'(x) \\ y_2'(x) \\ \vdots \\ y_n'(x) \end{pmatrix}$$

$$f\big(x, y(x)\big) = \begin{pmatrix} f_1\big(x, y(x)\big) \\ f_2\big(x, y(x)\big) \\ \vdots \\ f_n\big(x, y(x)\big) \end{pmatrix}, y(x_0) = y^{(0)} = \begin{pmatrix} y_1(x_0) \\ y_2(x_0) \\ \vdots \\ y_n(x_0) \end{pmatrix}$$

$$y^{(4)} + 1.1y''' - 0.1y'' - 0.3y = \sin x + 5$$

$$y(0) = y''(0) = y'''(0) = 0, \qquad y'(0) = 2$$

Umformung der DGL

$$y^{(4)} = -1.1y''' + 0.1y'' + 0.4y + \sin x + 5$$

$z_1 = y(x)$ $z_2 = y'(x)$ $z_3 = y''(x)$ $z_4 = y'''(x)$	$z_1' = y'(= z_2)$ $z_2' = y''(= z_3)$ $z_3' = y'''$ $z_4' = y^{(4)} = -1.1y''' + 0.1y'' + 0.4y + \sin x + 5$ $= -1.1z_4 + 0.1z_3 + 0.4z_1 + \sin x + 5$

$$z' = \begin{pmatrix} z_1' \\ z_2' \\ z_3' \\ z_4' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ -1.1z_4 + 0.1z_3 + 0.4z_1 + \sin x + 5 \end{pmatrix} = f(x, z)$$

$$z(0) = \begin{pmatrix} y(0) \\ y'(0) \\ y''(0) \\ y'''(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1(0) \\ z_2(0) \\ z_3(0) \\ z_4(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Auflösen mit Euler-Verfahren

$$h = 0.1, \qquad y^{(0)} = (0, 2, 0, 0)^T, \qquad x_0 = 0$$

$$x_1 = x_0 + 0.1 = 0.1, \qquad y^{(i+1)} = y^{(i)} + Steigung \cdot h$$

$$y^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 0.1 \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \\ -1.1 \cdot 0 + 0.1 \cdot 0 + 0.4 \cdot 0 + \sin x_0 + 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 2 \\ 0 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$