Einführung in die Numerische Mathematik

Thomas Richter
richter@math.fau.de

Thomas Wick
thomas.wick@ricam.oeaw.ac.at

Universität Erlangen

3. Auflage Winter 2015/16 (2012, 2014)

Inhaltsverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] Jörg Bewersdorff. *Algebra für Einsteiger: Von der Gleichungsauflösung zur Galois-Theorie*. Wiesbaden, 2004.

[2] F. Cucker and A.G. Corbolan. An alternate proof of the continuity of the roots of a polynomial. *The American Mathematical Monthly*, 96(4):342–345, 1989.

[3] J.F. Epperson. *An introduction to numerical methods and analysis*. John Wiley & Sons, 2007.

[4] J. Douglas Faires and Richard L. Burdon. *Numerische Methoden*. Spektrum Akademischer Verlag, 1994.

[5] A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, and V. Kumar. *Introduction to Parallel Computing*. Addison-Wesley, 2003. 2nd edition.

[6] G. Hämmerlin and K.-H. Hoffmann. *Numerische Mathematik*. Springer Verlag, 1992.

[7] M. Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Vieweg-Teubner Verlag, 2009.

[8] IEEE. IEEE 754-2008: Standard for floating-point arithmetic. Technical report, IEEE Standards Association, 2008. doi:10.1109/IEEESTD.2008.4610935.

[9] Rainer Kress. *Numerical Analysis*. Springer Verlag, 1998.

[10] R. Rannacher. Einführung in die Numerische Mathematik. Vorlesungsskriptum, Universität Heidelberg, http://numerik.uni-hd.de/˜lehre/notes, 2006.

[11] R. Rannacher. Numerik partieller Differentialgleichungen. Vorlesungsskriptum, Universität Heidelberg, http://numerik.uni-hd.de/˜lehre/notes, 2008.

[12] R. Rannacher. Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen. Vorlesungsskriptum, Universität Heidelberg, http://numerik.uni-hd.de/˜lehre/notes, 2011.

[13] T. Richter. Numerik partieller Differentialgleichungen. Vorlesungsskriptum, Universität Heidelberg, http://numerik.uni-hd.de/˜richter/teaching.shtml, 2011.

[14] R. Schaback and H. Wendland. *Numerische Mathematik*. Springer, 2005.

[15] H. R. Schwarz and N. Köckler. *Numerische Mathematik*. Vieweg-Teubner Verlag, 2011.

[16] E.E. Tyrtyshnikov. *A Brief introduction to Numerical Analysis*. Birkhäuser, 1997.

[17] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. Springer, 2004.

Vorwort

Erste Auflage

Dieses Vorlesungsskriptum ist begleitend zur Vorlesung *Einführung in die Numerische Mathematik* im Sommersemester 2012 an der Universität Heidelberg entstanden. Die Vorlesung und der Inhalt des Skripts ist elementar gehalten und kann mit grundlegenden Kenntnisse aus Analysis und linearer Algebra verstanden werden. Die Numerische Mathematik unterscheidet sich wesentlich von diesen Vorlesungen. In der Analysis und linearen Algebra werden Strukturuntersuchungen zu verschiedenen Problemen angestellt: ist eine Funktion integrierbar, existiert die Lösung zu einem Gleichungssystem, wie können Vektorräume charakterisiert werden, usw. In der Numerischen Mathematik steht die Berechnung konkreter Lösungen im Mittelpunkt. Es zeigt sich, dass viele mathematische Probleme nicht - oder nur sehr aufwändig - wirklich gelöst werden können. Und selbst wenn eine einfache Lösung existiert, etwa ist $x = \sqrt{2}$ die Nullstelle von $f(x) = x^2 - 2$, so kann diese Lösung nicht exakt auf einem Taschenrechner oder Computer dargestellt werden. Da numerische Algorithmen im Allgemeinen auf einem Computer implementiert werden, müssen Fehler, welche zum Beispiel durch Rundung entstehen, mit in die Analyse einbezogen werden. Natürlich wird auch in der Numerischen Mathematik mathematisch und exakt vorgegangen, wir können jedoch nicht davon ausgehen, dass mathematische Aufgaben, wie die Berechnung der Summe zweier Zahlen $x + y$, auch auf dem Computer exakt realisiert werden können.

Das Skript ist in zwei große Abschnitte unterteilt, die numerische Betrachtung von Problemen der linearen Algebra und die Untersuchung von Problemen der Analysis. Wir versuchen dabei jeweils den Zusammenhang zwischen Problem, mathematischer Analyse und numerischem Verfahren herzustellen.

Thomas Richter, Thomas Wick *August, 2012*

Zweite Auflage

Für die Vorlesung *Einführung in die Numerische Mathematik* im Sommersemester 2014 wurde das Skriptum in einigen Teilen überarbeitet, ergänzt und korrigiert. Neu hinzugekommen ist ein Kapitel über Orthogonalisierungsverfahren. Insbesondere aber durch die intensive Korrektur aller Tutoren konnten zahllose kleine Fehler beseitigt werden.

Thomas Richter *März, 2014*

1. Einleitung

In der numerischen Mathematik werden Verfahren zum "Lösen" von mathematischen Problemen und Aufgaben entworfen und analysiert. Dabei ist die numerische Mathematik eng mit anderen Zweigen der Mathematik verbunden und kann auch nicht von dem Anwendungsgebiet, also z.B. der Chemie, Physik oder Medizin getrennt werden. Der übliche Weg von Problem zur Lösung ist lang:

1. *Mathematische Modellierung* Das zugrundeliegende Problem wird mathematisch erfasst, es werden Gleichungen entwickelt, die das Problem beschreiben. Ergebnis des mathematischen Modells kann ein lineares Gleichungssystem sein, aber z.B. auch eine Differentialgleichung.

2. *Analyse des Modells* Das mathematische Modell muss auf seine Eigenschaften untersucht werden: existiert eine Lösung, ist diese Lösung eindeutig? Hier kommen alle Teilgebiete der Mathematik zum Einsatz, von der Linearen Algebra über Statistik, Gruppentheorie zur Theorie von partiellen Differentialgleichungen.

3. *Numerische Verfahrensentwicklung* Ein numerisches Lösungs- oder Approximationsverfahren wird für das Modell entwickelt. Viele mathematische Modelle (etwa Differentialgleichungen) können nicht exakt gelöst werden und oft kann eine Lösung, auch wenn sie existiert, nicht angegeben werden. Die Lösung einer Differentialgleichung ist eine Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ und zur genauen Beschreibung müsste der Funktionswert an den unendlich-vielen Punkten des Intervalls $[a, b]$ bestimmt werden. Jede durchführbare Verfahrensvorschrift kann allerdings nur aus endlich vielen Schritten bestehen. Das Problem muss zunächst *diskretisiert* werden, also auf ein endlich-dimensionales reduziert werden. Die Numerische Mathematik befasst sich mit der Analyse der numerischen Verfahren, also mit Untersuchung von Konvergenz und Approximationsfehlern.

4. *Implementierung* Das numerische Verfahren muss auf einem Computer implementiert werden. Zur effizienten Implementierung müssen spezielle Algorithmen entwickelt werden. Um moderne Computer-Architekturen nutzen zu können muss das Verfahren z.B. für die Verwendung von Parallelrechnern modifiziert werden.

5. *Auswertung* Die numerischen Ergebnisse (etwa das Simulationsergebnis einer Flugzeugumströmung) müssen ausgewertet werden. Dies beinhaltet eine grafische Darstellung der Ergebnisse sowie in technischen Anwendungen z.B. die Auswertung von Kräften, die nur indirekt gegeben sind. Anhand von Plausibilitätsanalysen muss die Qualität der Ergebnisse beurteilt werden. Unter Umständen führt diese Überprüfung zu neuen mathematischen Modellen oder modifizierten numerischen Verfahren.

Die Teilaspekte dürfen nicht getrennt voneinander gesehen werden. Ein effizienter Algorithmus ist nichts wert, wenn das zugrundeliegende Problem überhaupt keine wohldefinierte Lösung hat, ein numerisches Verfahren für ein Anwendungsproblem ist wertlos, wenn der Computer in absehbarer Zeit zu keiner Lösung kommt.

Das Ergebnis einer numerischen Aufgabe ist im Allgemeinen eine Zahl, oder eine endliche Menge von Zahlen. Beispiele für numerische Aufgaben sind das Berechnen der Nullstellen einer Funktion, die Berechnung von Integralen, die Berechnung der Ableitung einer Funktion in einem Punkt, aber auch komplexere Aufgaben wie das Lösen einer Differentialgleichung.

Zum Lösen von numerischen Aufgaben werden wir unterschiedliche Verfahren kennenlernen. Wir grenzen zunächst ein:

Definition 1.1 (Numerisches Verfahren, Algorithmus)**.** *Ein numerisches Verfahren ist eine Vorschrift zum Lösen oder zur Approximation einer mathematischen Aufgabe. Ein numerisches Verfahren heißt* direkt*, falls die Lösung bis auf Rundungsfehler exakt berechnet werden kann. Ein Verfahren heißt* approximativ *falls die Lösung nur angenähert werden kann. Ein Verfahren heißt* iterativ*, falls die Näherung durch mehrfache Ausführung einer Vorschrift schrittweise verbessert wird.*

Beispiele für direkte Lösungsverfahren sind die p/q-Formel zur Berechnung von Nullstellen quadratischer Polynome (siehe Kapitel 7) oder der Gauß'sche Eliminationsalgorithmus (Kapitel I) zum Lösen von linearen Gleichungssysteme. Approximative Verfahren müssen z.B. zum Bestimmen von komplizierten Integralen oder auch zum Berechnen von Nullstellen allgemeiner Funktionen eingesetzt werden. Oft ist ein exaktes Lösen von Aufgaben dem Problem nicht angemessen. Wenn Eingabedaten zum Beispiel mit großen Messfehlern behaftet sind, so ist ein exaktes Lösen nicht notwendig. Wir betrachten ein Beispiel eines direkten Verfahrens:

Beispiel 1.2 (Polynomauswertung)**.** *Es sei durch*

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

ein Polynom gegeben. Dabei sei $n \in \mathbb{N}$ sehr groß. Wir werten $p(x)$ in einem Punkt $x_0 \in \mathbb{R}$ mit dem trivialen Verfahren aus:

Algorithmus 1.3 (Polynom-Auswertung)**.**

1. *Für $i = 0, 1, \dots, n$ berechne $y_i := a_i x_0^i$*
2. *Berechne $p = \sum_{i=0}^{N} y_i$.*

Wir berechnen den Aufwand *zur Polynom-Auswertung: In Schritt 1. des Algorithmus sind zur Berechnung der y_i i Multiplikationen notwendig, insgesamt*

$$0 + 1 + 2 + \cdots + n = \frac{n(n+1)}{2} = \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}.$$

In Schritt 2 sind weitere n Additionen notwendig. Der Gesamtaufwand des Algorithmus beträgt demnach $n^2/2 + n/2$ Multiplikationen sowie n Additionen. Wir fassen eine Addition und eine Multiplikation zu einer elementaren Operation *zusammen und erhalten zusammen als Aufwand der trivialen Polynomauswertung*

$$A_1(n) = \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}$$

elementare Operationen.

Wir schreiben das Polynom um

$$p(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \cdots + x(a_{n-1} + xa_n) \dots))$$

und leiten hieraus einen zweiten Algorithmus her:

Algorithmus 1.4 (Horner-Schema)**.**

1. *Setze $p := a_n$*
2. *In Schritt $i = n - 1$ bis 0 berechne $p := a_i + x \cdot p$*

Jeder der n Schritte des Verfahrens benötigt eine Multiplikation sowie eine Addition, also ergibt sich ein Aufwand von

$$A_2(n) = n$$

elementare Operationen. Das Horner-Schema *benötigt für die gleiche Aufgabe wesentlich weniger Operationen, man denke nur an Polynome $n \gg 1000$.*

Definition 1.5 (Numerischer Aufwand)**.** *Der* Aufwand *eines numerischen Verfahrens ist die Anzahl der notwendigen* elementaren Operationen*. Eine* elementare Operation *ist eine Addition und eine Multiplikation.*

Meist hängt der Aufwand eines Verfahrens von der Problemgröße ab. Die Problemgröße $N \in \mathbb{N}$ wird von Problem zu Problem definiert, beim Lösen eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ mit einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ist die Größe der Matrix die Problemgröße. Beim Auswerten eines Polynoms $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_0$ in einem Punkt x ist die Problemgröße die Anzahl der Koeffizienten n.

Zur einfachen Schreibweise definieren wir:

Definition 1.6 (Landau-Symbole)**.** (i) *Es sei $g(n)$ eine Funktion mit $g \to \infty$ für $n \to \infty$. Dann ist $f \in O(g)$ genau dann, wenn*

$$\limsup_{n\to\infty} \left| \frac{f(n)}{g(n)} \right| < \infty$$

sowie $f \in o(g)$ genau dann, wenn

$$\lim_{n\to\infty} \left| \frac{f(n)}{g(n)} \right| = 0.$$

(ii) *Sei $g(h)$ eine Funktion mit $g(h) \to 0$ für $h \to 0$. Wir definieren wie oben $f \in O(g)$ sowie $f \in o(g)$.*

Einfach gesprochen: $f \in O(g)$, falls f höchstens so schnell gegen ∞ konvergiert wie g und $f \in o(g)$, falls g schneller als f gegen ∞ geht. Entsprechend gilt für $g \to 0$. dass $f \in O(g)$, falls f mindestens so schnell gegen Null konvergiert wie g und $f \in o(g)$ falls f schneller als g gegen Null konvergiert. Mit Hilfe der Landau-Symbole lässt sich der Aufwand eines Verfahrens einfacher charakterisieren. Im Fall der trivialen Polynomauswertung in Algorithmus 1.3 gilt für den Aufwand $A_1(n)$ in Abhängigkeit der Polynomgröße n:

$$A_1(n) \in O(n^2),$$

und im Fall des Horner-Schema's von Algorithmus 1.4

$$A_2(n) \in O(n).$$

Wir sagen: der Aufwand der trivialen Polynomauswertung wächst quadratisch, der Aufwand des Horner-Schema's linear. Weiter können mit den Landau-Symbolen Konvergenzbegriffe quantifiziert und verglichen werden. In den entsprechenden Kapiteln kommen wir auf diesen Punkt zurück.

Numerische Lösungen sind oft mit Fehlern behaftet. Fehlerquellen sind zahlreich: die Eingabe kann mit einem Messfehler versehen sein, ein approximatives Verfahren wird die Lösung nicht exakt berechnen, sondern nur nähern, manche Aufgaben können nur mit Hilfe eines Computers oder Taschenrechners gelöst werden und so ist die Lösung mit *Rundungsfehlern* versehen. Wir definieren:

Definition 1.7 (Fehler)**.** *Sei $\tilde{x} \in \mathbb{R}$ die Approximation einer Größe $x \in \mathbb{R}$. Mit $|\delta x| = |\tilde{x} - x|$ bezeichnen wir den* absoluten Fehler *und mit $|\delta x|/|x|$ den* relativen Fehler.

Üblicherweise ist die Betrachtung des relativen Fehlers von größerer Bedeutung: denn ein absoluter Messfehler von $100m$ ist klein, versucht man den Abstand zwischen Erde und Sonne zu bestimmen, jedoch groß, soll der Abstand zwischen Mensa und Mathematikgebäude gemessen werden.

Messung	0.58s	0.61s	0.62s	0.54s	0.64s	0.598s
Messfehler (rel)	4%	0.5%	2%	10%	6%	1%
Größe	1.65m	1.82m	1.89m	1.43m	2.01m	1.76m
Fehler (abs)	0.15m	0.02m	0.09m	0.37m	0.21m	0.04m
Fehler (rel)	8%	1 %	5%	21%	12%	2%

Tabelle 1.1.: Experiment 1: Größenbestimmung durch Fallenlassen eines Balles.

Messung	1.60s	1.48s	1.35s	1.53s	1.45s	1.482s
Messfehler (rel)	5%	2.5%	11%	<1%	5%	2%
Größe	2.53m	1.47m	0.48m	1.90m	1.23m	1.49m
Fehler (abs)	0.73m	0.33m	1.32m	0.10m	0.57m	0.31m
Fehler (rel)	40%	18%	73%	6%	32%	17%

Tabelle 1.2.: Experiment 2: Größenbestimmung durch Hochwerfen des Balles.

1.1. Konditionierung von numerischen Problemen

Bei der Analyse von numerischen Verfahren spielen Fehler, insbesondere die Fortpflanzung von Fehlern eine entscheidende Rolle. Wir betrachten ein Beispiel:

Beispiel 1.8 (Größenbestimmung)**.** *Thomas will seine Größe h bestimmen, hat allerdings kein Maßband zur Verfügung. Dafür hat er eine Uhr, einen Ball und im Physikunterricht gut aufgepasst. Zur Lösung der Aufgabe hat er zwei Ideen:*

1. *Verfahren 1: Thomas lässt den Ball aus Kopfhöhe fallen und misst die Zeit t_0, bis der Ball auf dem Boden auskommt. Die Höhe berechnet er aus der Formel für den freien Fall,*
$$y(t) = h - \frac{1}{2}gt^2 \quad \Rightarrow \quad h = \frac{1}{2}gt_0^2,$$
mit der Gravitationskonstante $g = 9.81m/s^2$.

2. *Verfahren 2: der Ball wird 2m über den Kopf geworfen und wir messen die Zeit bis der Ball wieder auf dem Boden angekommen ist. $s = 2m$ werden in $t' = \sqrt{2s/g}$ Sekunden zurückgelegt, hierfür benötigt der Ball eine Startgeschwindigkeit von $v_0 = gt' = \sqrt{2sg} \approx 6.26\ m/s$. Es gilt für die Flugbahn:*
$$y(t) = h + v_0 t - \frac{1}{2}gt^2 \quad \Rightarrow \quad h = \frac{1}{2}gt_0^2 - v_0 t_0.$$

Das zweite Verfahren wird gewählt, weil die Zeit t_0, die der Ball in Verfahren 1 zum Fallen benötigt, sehr klein ist. Große Messfehler werden vermutet. Wir führen zunächst Algorithmus 1 durch und messen 5 mal (exakte Lösung $h = 1.80m$ und $t_0 \approx 0.606s$). Die Ergebnisse sind in Tabelle 1.1 zusammengefasst. In der letzten Spalte wurde als Zeit der

Mittelwert aller Messergebnisse gewählt. Dies geschieht in der Hoffnung den Messfehler zu optimieren.

Wir führen nun Algorithmus 2 durch und messen 5 mal (exakte Lösung $h = 1.80m$ und $t_0 \approx 1.519s$). In Tabelle 1.2 sind die Messergebnisse und ermittelten Größen zusammengefasst. In der letzten Spalte wird wieder der Mittelwert aller Messergebnisse betrachtet.

Trotz anfänglicher Zweifel erweist sich Algorithmus 1 als stabiler. Mögliche Fehlerquellen sind der Messfehler bei der Bestimmung der Zeit t_0 sowie bei Algorithmus 2 die Genauigkeit beim Erreichen der Höhe von 2m. In Algorithmus 1 führt der Messfehler zu etwa dem doppelten relativen Fehler in der Größe. Bei Algorithmus 2 führen selbst kleine Fehler $\leq 1\%$ in den Messungen zu wesentlich größeren Fehlern im Ergebnis. Der immer noch kleine Fehler von 5% bei der ersten Messung führt zu einem Ergebnisfehler von etwa 40%. Auch bei Betrachtung des Mittelwerts über alle Messwerte ist die ermittelte Größe von $1.49m$ keine gute Näherung.

Wir wollen nun untersuchen, welche Auswirkung der Fehler in der Eingabe eines Algorithmus auf das Ergebnis hat. Hierzu sei die Aufgabe wieder allgemein durch die Vorschrift $A : x \mapsto y$ beschrieben. Die Eingabe x sei mit einem Fehler δx behaftet. Die gestörte Eingabe $\tilde{x} = x + \delta x$ liefert ein gestörtes Ergebnis $\tilde{y} = y + \delta y$:

$$\tilde{y} = A(\tilde{x}), \quad \delta y = \tilde{y} - y = A(\tilde{x}) - A(x) = A(x + \delta x) - A(x).$$

Wir teilen durch $y = A(x)$ und erweitern rechts mit δx sowie mit x

$$\frac{\delta y}{y} = \frac{A(x + \delta x) - A(x)}{\delta x} \frac{x}{A(x)} \frac{\delta x}{x}$$

Auf der linken Seite verbleibt der relative Fehler im Ergebnis. Gehen wir nun davon aus, dass die Störung δx infinitesimal klein ist, so bleibt rechts ein Differenzenquotient für die erste Ableitung der Aufgabe. Im Fall $|\delta x| \to 0$ gilt

$$\left|\frac{\delta y}{y}\right| \approx \left|\frac{\partial A(x)}{\partial x} \frac{x}{A(x)}\right| \cdot \left|\frac{\delta x}{x}\right|,$$

und nennen die Größe

$$\kappa_{A,x} := \frac{\partial A(x)}{\partial x} \frac{x}{A(x)},$$

die *Konditionszahl* der Aufgabe $A(\cdot)$ in Bezug auf die Eingabe x. Die Konditionszahl beschreibt die relative Fehlerverstärkung einer Aufgabe in Bezug auf eine Eingabegröße. Wir definieren:

Definition 1.9 (Konditionszahl)**.** *Es sei $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$. Wir nennen*

$$\kappa_{i,j} := \frac{\partial A_i(x)}{\partial x_j} \frac{x_j}{A_i(x)}$$

die relative Konditionszahl *der Aufgabe. Eine Aufgabe heißt* schlecht konditioniert*, falls $|\kappa_{i,j}| \gg 1$, ansonsten* gut konditioniert*. Im Fall $|\kappa_{i,j}| < 1$ spricht man von* Fehlerdämpfung*, ansonsten von* Fehlerverstärkung*.*

Wir setzen das Beispiel zur experimentellen Größenbestimmung fort:

Beispiel 1.10 (Größenbestimmung, Fortsetzung)**.**

1. *Verfahren 1: Zum Durchführen des Verfahrens $h(t_0)$ ist als Eingabe die gemessene Zeit t_0 erforderlich. Für die Konditionszahl gilt:*

$$\kappa_{h,t_0} := \frac{\partial h(t_0)}{\partial t_0} \frac{t_0}{h(t_0)} = gt_0 \frac{t_0}{\frac{1}{2}gt_0^2} = 2.$$

Ein relativer Fehler in der Eingabe $\delta t_0/t_0$ kann demnach einen doppelt so großen relativen Fehler in der Ausgabe verursachen.

2. *Verfahren 2: Wir bestimmen die Konditionszahl in Bezug auf die Zeit t_0:*

$$\kappa_{h,t_0} = (gt_0 - v_0) \frac{t_0}{\frac{1}{2}gt_0^2 - v_0 t_0} = 2 \frac{gt_0 - v_0}{gt_0 - 2v_0}$$

Wir wissen, dass der Ball bei exaktem Wurf und ohne Messfehler $t_0 \approx 1.519\,s$ unterwegs ist bei einer Startgeschwindigkeit von $v_0 \approx 6.26m/s$. Dies ergibt:

$$\kappa_{h,t_0} \approx \kappa_{h,v_0} \approx 8.$$

Fehler in der Eingaben $\delta t_0/t_0$ sowie $\delta v_0/v_0$ werden um den Faktor 8 verstärkt. Die durch die Konditionszahlen vorhergesagten Fehlerverstärkungen lassen sich in Tabellen 1.1 und 1.2 zu Beispiel 1.8 gut wiederfinden.

1.2. Zahldarstellung

Die Analyse von Fehlern und Fehlerfortpflanzungen spielen eine zentrale Rolle in der numerischen Mathematik. Fehler treten vielfältig auf, auch ohne ungenaue Eingabewerte. Oft sind numerische Algorithmen sehr komplex, setzen sich aus vielen Operationen zusammen. Bei der Approximation mit dem Computer treten unweigerlich *Rundungsfehler* auf. Da der Speicherplatz im Computer, bzw. die Anzahl der Ziffern auf dem Taschenrechner beschränkt sind, treten Rundungsfehler schon bei der bloßen Darstellung einer Zahl auf. Auch wenn es für die numerische Aufgabe

$$x^2 = 2, \quad \Leftrightarrow x = \pm\sqrt{2},$$

mit $x = \pm\sqrt{2}$ eine einfach anzugebene Lösung gibt, so kann diese auf einem Computer nicht exakt dargestellt werden:

$$\sqrt{2} = 1.41421356237309504880\dots$$

Der naheliegende Grund für einen zwingenden Darstellungsfehler ist der beschränkte Speicher eines Computers. Ein weiterer Grund liegt in der Effizienz. Ein Computer kann effizient nicht mit beliebig langen Zahlen rechnen. Grund ist die beschränkte Datenbandbreite (das sind die 8-Bit, 16-Bit, 32-Bit oder 64-Bit der Prozessoren). Operationen mit Zahlen in längerer Darstellung müssen zusammengesetzt werden, ähnlich dem schriftlichen Multiplizieren oder Addieren aus der Schule.

Computer speichern Zahlen gerundet in Binärdarstellung, also zur Basis 2:

$$\mathrm{rd}(x) = \pm \sum_{i=-n_1}^{n_2} a_i 2^i, \quad a_i \in \{0,1\}.$$

Die Genauigkeit der Darstellung, somit der Rundungsfehler hängt von der Anzahl der Ziffern, also von n_1 und n_2 ab. Die *Fixkommadarstellung* der Zahl im Binärsystem lautet:

$$\mathrm{rd}(x) = [a_{n_2} a_{n_2-1} \dots a_1 a_0 . a_{-1} a_{-2} \dots a_{-n_1}]_2$$

Praktischer ist die *Gleitkommadarstellung* von Zahlen. Hierzu wird die Binärdarstellung normiert und ein gemeinsamer Exponent eingeführt:

$$\mathrm{rd}(x) = \pm \left(\sum_{i=-n_1-n_2}^{0} a_{i+n_2} 2^i \right) 2^{n_2}, \quad a_i \in \{0,1\}.$$

Der führende Term (die a_i) heißt die *Mantisse* und wird von uns mit M bezeichnet, den *Exponenten* bezeichnen wir mit E. Der Exponent kann dabei eine positive oder negative Zahl sein. Zur Vereinfachung wird der Exponenten E als $E = e - b$, mit einer positiven Zahl $e \in \mathbb{N}$ und dem Bias $b \in \mathbb{N}$ geschrieben. Der Biaswert b wird in einer konkreten Zahldarstellung fest gewählt und bestimmt somit den größtmöglichen negativen Exponenten. Der variable Exponentanteil e wird selbst im Binärformat gespeichert. Es bleibt, die Anzahl der Binärstellen für Mantisse und Exponent zu wählen. Hinzu kommt ein Bit für das Vorzeichen $S \in \{+,-\}$. Die Gleitkommadarstellung im Binärsystem lautet:

$$\mathrm{rd}(x) = S \cdot [m_0 . m_{-1} m_{-2} \dots m_{-\#m}]_2 \cdot 2^{[e_{\#e} \dots e_1 e_0]_2 - b}$$

Die Mantisse wird üblicherweise mit $m_0 = 1$ normiert zu $M \in [1,2)$. D.h., die führende Stelle muss nicht explizit gespeichert werden.

Auf modernen Computern hat sich das *IEEE 754*-Format zum Speichern von Zahlen etabliert:

Definition 1.11 (Normalisierte Gleitkommazahlen im IEEE 754-Format)**.** *Das IEEE-754 Format [8] beschreibt die* Gleitkommadarstellung *einer Zahl im* Binärformat*:*

$$x = s \cdot M \cdot 2^{e-b},$$

mit einem Vorzeichen $s \in \{+, -\}$*, einer Mantisse* $M \in [1, 2)$ *sowie einem Exponenten* $e \in \mathbb{N}$ *mit Bias* $b \in \mathbb{N}$*. Die Gleitkommazahl wird in Binärdarstellung gespeichert:*

$$se_{\#e} \dots e_2 e_1 m_{\#m} \dots m_2 m_1$$

mit $\#e$ *Bit für den Exponenten und* $\#m$ *Bit für die Mantisse. Der Bias wird im Allgemeinen als* $2^{\#e-1} - 1$ *gewählt. Die Interpretation der Zahlen hängt vom Exponenten ab:*

Null *Im Fall* $e = 0$ *und* $m_1 = \dots = m_{\#m} = 0$ *ist* $x = \pm 0$*. Die Unterscheidung zwischen* $+0$ *und* -0 *entsteht beim Runden kleiner Zahlen zur Null. Im direkten Vergleich interpretiert ein Computer* $+0 = -0$*.*

Unendlich *Im Fall* $e = 2^{\#e} - 1$ *(also alle Bit im Exponenten gleich 1) und* $m_1 = \dots = m_{\#m} = 0$ *ist* $x = \pm\infty$*. Unendlich entsteht etwa beim Teilen durch* 0 *(mit Vorzeichen!) oder falls das Ergebnis zu groß (oder negativ zu klein) ist um darstellbar zu sein.*

NaN *Im Fall* $e = 2^{\#e} - 1$ *und* $M > 0$ *steht der Wert für* Not a Number *und tritt zum Beispiel bei der Operation* $0/0$ *oder* $\infty - \infty$ *auf.*

Normalisierte Zahl *Im Fall* $0 \leq e < 2^{\#e-1}$ *steht die Zahl für*

$$s \cdot 1.m_{\#m} \dots m_2 m_1 \cdot 2^{e-b}.$$

Das Rechnen mit Gleitkommazahlen kann im Computer effizient realisiert werden. Im IEEE-754 Format wird die Gleitkommadarstellung durch *denormalisierte Zahlen* erweitert. Wir erwähnen dies zur Vollständigkeit:

Bemerkung 1.12 (Denormalisierte Zahlen)**.** *Denormalisierte Zahlen dienen zum Schließen der Lücke zwischen Null und der kleinsten positiven darstellbaren Zahl* $1.0\dots001 \cdot 2^{-b}$*. Im Fall* $e = 0$ *und* $M > 0$ *wird die Zahl interpretiert als:*

$$s \cdot 0.m_{\#e} \dots m_2 m_1 \cdot 2^{1-b}.$$

Die Genauigkeit bei der Rechnung mit denormalisierten Zahlen ist reduziert.

In Tabelle 1.3 sind verschiedene Gleitkommadarstellungen zusammengefasst, die historisch und aktuell benutzt werden. Derzeit wird fast ausschließlich das IEEE-Format verwendet. Hier sind zwei Darstellungen üblich, *single-precision* (in C++ float) und *double-precision*

	Größe	Vorzeichen	Exponent	Mantisse	Bias
einfache Genauigkeit (single)	32 Bit	1 Bit	8 Bit	23+1 Bit	127
doppelte Genauigkeit (double)	64 Bit	1 Bit	11 Bit	52+1 Bit	1023
Zuse Z1 (1938)	24 Bit	1 Bit	7 Bit	15 Bit	—
IBM 704 (1954)	36 Bit	1 Bit	8 Bit	27 Bit	128
i8087 Coprozessor (1980)	Erste Verwendung von IEEE (single + double)				
Intel 486 (1989)	Erste integrierte FPU in Standard PC				
NVIDIA G80 (2007)	GPU (single)				
NVIDIA Fermi (2010)	GPU (double)				

Tabelle 1.3.: IEEE-754 Format in einfacher und doppelter Genauigkeit sowie Gleitkommaformate in aktueller und historischer Hardware.

(in C++ double). Durch die Normierung der Mantisse wird ein Bit, das sogenannte *hiddenbit* gewonnen. Historisch wurden in Rechensystemen jeweils unterschiedliche Zahlendarstellungen gewählt. Während die ersten Computer noch im Prozessor integrierte Recheneinheiten für Gleitkomma-Arithmetik, die sogenannte *floating-point processing unit* (FPU) hatten, verschwand diese zunächst wieder aus den üblichen Computern und war nur in speziellen Rechnern vorhanden. In Form von *Coprozessoren* konnte eine FPU nachgerüstet werden (z.B. der Intel 8087 zum Intel 8086). Der "486er" war der erste Prozessor für Heimcomputer mit integrierter FPU. Heute können Gleitkommaberechnungen effizient auf Grafikkarten ausgelagert werden. Die Prozessoren der Grafikkarten, die *graphics processing unit* (GPU) ist speziell für solche Berechnungen ausgelegt (z.B. schnelle Berechnungen von Lichtbrechungen und Spiegelungen, Abbilden von Mustern auf 3D-Oberflächen). Spezielle Steckkarten (z.B. NVIDIA Tesla), welche gleich mehrere GPU's enthalten werden in Höchstleistungssystemen eingesetzt. Die Genauigkeit der Darstellung ist im Wesentlichen von den in der Mantisse zu Verfügung stehenden Stellen bestimmt. Größte und kleinste darstellbare Zahlen sind durch die Stellen im Exponenten bestimmt. In numerischen Verfahren ist die Verwendung von doppelt-genauer Zahlendarstellung (double) üblich. Die Recheneinheiten moderner Computer nutzen intern eine erhöhte Genauigkeit zum Durchführen von elementaren Operationen. (80 Bit bei modernen Intel-CPU's). Gerundet wird erst nach Berechnung des Ergebnis.

Beispiel 1.13 (Gleitkommadarstellung)**.** *Wir gehen von vierstelliger Mantisse und vier Stellen im Exponent aus mit Bias* $2^{4-1} - 1 = 7$.

- *Die Zahl* $x = -96$ *hat zunächst negatives Vorzeichen, also* $S = 1$. *Die Binärdarstellung von 96 ist*

  $$96_{10} = 1 \cdot 64 + 1 \cdot 32 + 0 \cdot 16 + 0 \cdot 8 + 0 \cdot 4 + 0 \cdot 2 + 0 \cdot 1 = 1100000_2,$$

  normalisiert

  $$64_{10} = 1.1000_2 \cdot 2^{6_{10}} = 1.1_2 \cdot 2^{13_{10} - 7_{10}} = 1.1_2 \cdot 2^{1101_2 - b}.$$

  Als Gleitkommadarstellung ergibt sich 111011000_2.

- *Die Zahl* $x = -384$ *hat wieder negatives Vorzeichen und* $S = 1$. *Die Binärdarstellung von 384 ist:*

  $$384_{10} = 1 \cdot 256 + 1 \cdot 128 + 0 \cdot 64 + 0 \cdot 32 + 0 \cdot 16 + 0 \cdot 8 + 0 \cdot 4 + 0 \cdot 2 + 0 \cdot 1 = 110000000_2,$$

  also normalisiert

  $$384_{10} = 1.1000 \cdot 2^{8_{10}} = 1.1000 \cdot 2^{15_{10}-7_{10}} = 1.1000_2 \cdot 2^{1111_2-b}.$$

  Alle Bits im Exponenten sind 1. Der spezielle Wert $e = 1111_2$ *ist jedoch zur Speicherung von NaN (Not a Number) vorgesehen. Die Zahl* 384 *ist zu groß um in diesem Zahlenformat gespeichert zu werden. Stattdessen wird* $-\infty$ *oder Binär* 111110000_2 *gespeichert.*

- *Die Zahl* $x = 1/3 = 0.33333\ldots$ *ist positiv, also* $S = 0$. *Die Binärdarstellung von* $1/3$ *ist*

  $$\frac{1}{3} = 0.01010101\ldots_2 .$$

  Normalisiert, mit vierstelliger Mantisse erhalten wir

  $$\frac{1}{3} \approx 1.0101_2 \cdot 2^{-2} = 1.0101_2 \cdot 2^{5_{10}-7_{10}} = 1.0101_2 \cdot 2^{0101_2-b},$$

  also die Binärdarstellung 001010101_2. *Wir mussten bei der Darstellung runden und erhalten rückwärts*

  $$1.0101_2 \cdot 2^{0101_2-7} = 1.3125 \cdot 2^{-2} = 0.328125,$$

  mit dem relativen Fehler:

  $$\left| \frac{\frac{1}{3} - 1.0101_2 \cdot 2^{0101_2-b}}{\frac{1}{3}} \right| \approx 0.016$$

- *Die Zahl* $x = \sqrt{2} \approx 1.4142135623\ldots$ *ist positiv, also* $S = 0$. *Gerundet gilt:*

  $$\sqrt{2} \approx 1.0111_2$$

  Diese Zahl liegt bereits normalisiert vor. Mit Bias $b = 7$ *gilt für den Exponenten* $e = 0 = 7 - 7$

  $$\sqrt{2} \approx 1.0111_2 \cdot 2^{0111_2-b},$$

  also 001110111. *Rückwärts in Dezimaldarstellung erhalten wir*

  $$1.0111_2 \cdot 2^{0111_2-b} = 1.4375,$$

  mit dem relativen Darstellungsfehler

  $$\left| \frac{\sqrt{2} - 1.4375}{\sqrt{2}} \right| \approx 0.016.$$

- *Schließlich betrachten wir die Zahl $x = -0.003$. Mit $S = 1$ gilt:*

$$0.003_{10} \approx 0.00000000110001_2$$

und normalisiert

$$0.003_{10} \approx 1.1001_2 \cdot 2^{-9} = 1.1001_2 \cdot 2^{-2-7}.$$

Der Exponent $-9 = -2 - b$ ist zu klein und kann in diesem Format (also vier Stellen für den Exponenten) nicht dargestellt werden. Die Zahl kann hingegen denormalisiert dargestellt werden als:

$$0.003_{10} \approx \cdot 0.0011_2 \cdot 2^{1-7}.$$

Binär ergibt dies 100000011_2. Umrechnen in Dezimaldarstellung liefert:

$$0.0011_2 \cdot 2^{1-7} = 0.1875 \cdot 2^{-6} \approx 0.0029,$$

mit dem relativen Darstellungsfehler

$$\left| \frac{0.003 - 0.0029}{0.003} \right| \approx 0.033.$$

Aus der begrenzten Anzahl von Ziffern ergibt sich zwangläufig ein Fehler bei der Durchführung von numerischen Algorithmen. Der relative Fehler, der bei der Computer-Darstellung $\tilde{x}$ einer Zahl $x \in \mathbb{R}$ entstehen kann

$$\left| \frac{\mathrm{rd}(x) - x}{x} \right|$$

ist durch die sogenannte *Maschinengenauigkeit* beschränkt:

Definition 1.14 (Maschinengenauigkeit)**.** *Die* Maschinengenauigkeit *eps ist der maximale relative Rundungsfehler der Zahldarstellung und wird bestimmt als:*

$$eps := \inf\{x > 0 : \ \mathrm{rd}(1 + x) > 1\}.$$

Sind im Zahlenformat denormalisierte Zahlen vorgesehen, so verschlechtert sich die Genauigkeit für $x \to 0$.

Da Rundungsfehler zwangsläufig auftreten, gelten grundlegende mathematische Gesetze wie das Assoziativgesetz oder das Distributivgesetz in Computern nicht mehr. Aufgrund von Rundungsfehlern spielt die Reihenfolge, in denen Operationen ausgeführt werden eine wichtige Rolle und verändert das Ergebnis. Auch ein einfacher Vergleich von Zahlen ist oft nicht möglich, die Abfrage **if** (3.8/10.0==0.38) kann durch Rundung das falsche Ergebnis liefern und muss durch Abfragen der Art **if** (|3.8/10.0 − 0.38| < eps) ersetzt werden.

Bemerkung 1.15. *Die Maschinengenauigkeit hat nichts mit der kleinsten Zahl zu tun, welche auf einem Computer darstellbar ist. Diese ist wesentlich durch die Anzahl der Stellen im Exponenten bestimmt. Die Maschinengenauigkeit wird durch die Anzahl der Stellen in der Mantisse bestimmt. Bei der üblichen Gleitkommadarstellung mit doppelter Genauigkeit (double in c++) gilt eps* $\approx 10^{-16}$*, bei einfacher Genauigkeit, z.B. auf Grafikkarten gilt eps* $\approx 10^{-8}$.

Rundungsfehler treten bei jeder elementaren Operation auf. Daher kommt der Konditionierung der Grundoperationen, aus denen alle Algorithmen aufgebaut sind, eine entscheidende Bedeutung zu:

Beispiel 1.16 (Konditionierung von Grundoperationen, Auslöschung)**.**

1. *Addition, Subtraktion:* $A(x,y) = x + y$*:*

$$\kappa_{A,x} = \left|\frac{x}{x+y}\right| = \left|\frac{1}{1+\frac{y}{x}}\right|$$

Im Fall $x \approx -y$ *kann die Konditionszahl der Addition (*$x \approx y$ *bei der Subtraktion) beliebig groß werden. Ein Beispiel mit vierstelliger Rechnung:*

$$x = 1.021, \quad y = -1.019 \quad \Rightarrow \quad x + y = 0.002.$$

Jetzt sei $\tilde{y} = 1.020$ *gestört. Der relative Fehler in y ist sehr klein:* $|1.019 - 1.020|/|1.019| \leq 0.1\%$*. Wir erhalten das gestörte Ergebnis*

$$x + \tilde{y} = 0.001,$$

und einen Fehler von 100%*. Die enorme Fehlerverstärkung bei der Addition von Zahlen mit etwa gleichem Betrag wird* Auslöschung *genannt. Hier gehen wesentliche Stellen verloren. Auslöschung tritt üblicherweise dann auf, wenn das Ergebnis einer numerischen Operation verglichen mit den Eingabewerten einen sehr kleinen Betrag hat. Kleine relative Fehler in der Eingabe verstärken sich zu großen relativen Fehlern im Ergebnis.*

2. *Multiplikation:* $A(x,y) = x \cdot y$*. Die Multiplikation zweier Zahlen ist stets gut konditioniert:*

$$\kappa_{A,x} = \left|y\frac{x}{xy}\right| = 1.$$

3. *Division:* $A(x,y) = x/y$*. Das selbe gilt für die Division:*

$$\kappa_{A,x} = \left|\frac{1}{y}\frac{x}{\frac{x}{y}}\right| = 1, \quad \kappa_{A,y} = \left|\frac{x}{y^2}\frac{y}{\frac{x}{y}}\right| = 1.$$

4. *Wurzelziehen:* $A(x) = \sqrt{x}$*:*

$$\kappa_{A,x} = \left|\frac{1}{2\sqrt{x}}\frac{x}{\sqrt{x}}\right| = \frac{1}{2}.$$

Ein Fehler in der Eingabe wird im Ergebnis sogar reduziert.

Die meisten numerischen Algorithmen bestehen im Kern aus der wiederholten Ausführung dieser Grundoperationen. Der Aufwand von Algorithmen wird in der Anzahl der notwendigen elementaren Operationen (in Abhängigkeit von der Problemgröße) gemessen. Die Laufzeit eines Algorithmus hängt wesentlich von der Leistungsfähigkeit des Rechners ab. Diese wird in *FLOPS*, also *floating point operations per second* gemessen. In Tabelle 1.4 fassen wir die erreichbaren FLOPS für verschiedene Computer-Systeme zusammen. Die Leistung ist im Laufe der Jahre rapide gestiegen, alle zehn Jahre wird etwa der Faktor 1000 erreicht. Die Leistungssteigerung beruht zum einen auf effizienterer Hardware. Erste Computer hatten Register mit 8 Bit Breite, die in jedem Takt (das ist die MHz Angabe) verarbeitet werden konnten. Auf aktueller Hardware stehen Register mit 64 Bit zur Verfügung. Hinzu kommt eine effizientere Abarbeitung von Befehlen durch sogenanntes *Pipelining*: die übliche Abfolge im Prozessor beinhaltet "Speicher lesen, Daten bearbeiten, Ergebnis speichern". Das Pipelining erlaubt es dem Prozessor schon den Speicher für die nächste Operation auszulesen, während die aktuelle bearbeitet wird. So konnte die Anzahl der notwendigen Prozessortakte pro Rechenoperation erheblich reduziert werden. Die Kombination aus Intel 8086 mit FPU 8087 hat bei einem Takt von 8 Mhz und 50 000 Flops etwa 150 Takte pro Fließkommaoperation benötigt. Der 486er braucht bei 66 Mhz und etwa 1 000 000 Flops nur 50 Takte pro Operation. Der Pentium III liegt bei etwa 5 Takten pro Fließkommaoperation. In den letzten Jahren beruht die Effizienzsteigerung wesentlich auf einem sehr hohen Grad an Parallelisierung. Ein aktueller Core I7 Prozessor kann mehrere Operationen gleichzeitig durchführen. Eine Nvidia 580 GPU erreicht ihre Leistung mit über 500 Rechenkernen. Um diese Leistung effizient nutzen zu können müssen die Algorithmen entsprechend angepasst werden, so dass auch alle 500 Kerne ausgelastet werden. Kann ein Algorithmus diese spezielle Architektur nicht ausnutzen, so fällt die Leistung auf etwa ein Gigaflop zurück, also auf das Niveau des Pentium III aus dem Jahr 2001. Werden die 500 Kerne hingegen optimal ausgenutzt, so erreicht eine Grafikkarte die gleiche Leistung wie der Heidelberger Linux-Cluster helics aus dem Jahr 2002. Moderne Super-Computer wie der K Computer (schnellster Computer der Welt in 2012) vernetzen über 500 000 Kerne.

1.3. Rundungsfehleranalyse und Stabilität von numerischen Algorithmen

Beim Entwurf von numerischen Algorithmen für eine Aufgabe sind oft unterschiedliche Wege möglich, welche sich z.B. in der Reihenfolge der Verfahrensschritte unterscheiden. Unterschiedliche Algorithmen zu ein und derselben Aufgabe können dabei rundungsfehlerbedingt zu unterschiedlichen Ergebnissen führen:

Beispiel 1.17 (Distributivgesetz)**.** *Wir betrachten die Aufgabe* $A(x, y, z) = x \cdot z - y \cdot z = (x - y)z$ *und zur Berechnung zwei Vorschriften:*

$$\begin{aligned} a_1 &:= x \cdot z & \qquad a_1 &:= x - y, \\ a_2 &:= y \cdot z & a &:= a_1 \cdot z, \\ a &:= a_1 - a_2. \end{aligned}$$

CPU	Jahr	Flops	Preis	Energie
Zuse Z3	1941	0.3	Einzelstücke	4 kW
IBM 704	1955	$5 \cdot 10^3$	>10 000 000 Euro	75 kW
Intel 8086 + 8087	1980	$50 \cdot 10^3$	2 000 Euro	200 W
i486	1991	$1.4 \cdot 10^6$	2 000 Euro	200 W
IPhone 4s	2011	$100 \cdot 10^6$	500 Euro	10 W
2xPentium III	2001	$800 \cdot 10^6$	2 000 Euro	200 W
Core i7	2011	$100 \cdot 10^9$	1 000 Euro	200 W
Helics I (Parallelrechner am IWR)	2002	$1 \cdot 10^{12}$	1 000 000 Euro	40 kW
Nvidia GTX 580 (GPU)	2010	$1 \cdot 10^{12}$	500 Euro	250 W
K Computer	2011	$10 \cdot 10^{15}$	> 500 000 000 Euro	12 000 kW
Tianhe-2	2013	$33 \cdot 10^{15}$	250 000 000 Euro	18 000 kW

Tabelle 1.4.: Gleitkomma-Geschwindigkeit sowie Anschaffungskosten einiger aktueller und historischer Computer.

Es sei $x = 0.519$, $y = 0.521$, $z = 0.941$. *Bei vierstelliger Arithmetik erhalten wir:*

$$\begin{aligned} a_1 &:= \mathrm{rd}(x \cdot z) = 0.4884 & b_1 &:= \mathrm{rd}(x - y) = -0.002 \\ a_2 &:= \mathrm{rd}(y \cdot z) = 0.4903 & b_2 &:= \mathrm{rd}(a_1 \cdot z) = -0.001882 \\ a_3 &:= \mathrm{rd}(a_1 - a_2) = -0.0019 \end{aligned}$$

Mit $A(x, y, z) = -0.001882$ *ergeben sich die relativen Fehler:*

$$\left| \frac{-0.0001882 - a_3}{0.0001882} \right| \approx 0.01, \quad \left| \frac{-0.0001882 - b_2}{0.0001882} \right| = 0.$$

Das Distributivgesetz gilt auf dem Computer nicht!

Die Stabilität hängt also entscheidend vom Design des Algorithmus ab. Eingabefehler, oder auch Rundungsfehler, die in einzelnen Schritten entstehen, werden in darauffolgenden Schritten des Algorithmus verstärkt. Wir analysieren nun beide Verfahren im Detail und gehen davon aus, dass in jedem der elementaren Schritte (wir haben hier nur Addition und Multiplikation) ein relativer Rundungsfehler ϵ mit $|\epsilon| \le eps$ entsteht, also

$$\mathrm{rd}(x + y) = (x + y)(1 + \epsilon), \quad \mathrm{rd}(x \cdot y) = (x \cdot y)(1 + \epsilon),$$

Zur Analyse eines gegebenen Algorithmus verfolgen wir die in Rundungsfehler, welche in jedem Schritt entstehen und deren Akkumulation:

Beispiel 1.18 (Stabilität des Distributivgesetzes)**.** *Wir berechnen zunächst die Konditionszahlen der Aufgabe:*

$$\kappa_{A,x} = \left| \frac{1}{1 - \frac{y}{x}} \right|, \quad \kappa_{A,y} = \left| \frac{1}{1 - \frac{x}{y}} \right|, \quad \kappa_{A,z} = 1.$$

Für $x \approx y$ ist die Aufgabe schlecht konditioniert. Wir starten mit Algorithmus 1 und schätzen in jedem Schritt den Rundungsfehler ab. Zusätzlich betrachten wir Eingabefehler (oder Darstellungsfehler) von x, y und z. Wir berücksichtigen stets nur Fehlerterme erster Ordnung und fassen alle weiteren Terme mit den Landau-Symbolen (für kleine ϵ) zusammen:

$$\begin{aligned}
a_1 =& x(1+\epsilon_x)z(1+\epsilon_z)(1+\epsilon_1) = xz(1+\epsilon_x+\epsilon_z+\epsilon_1+O(eps^2)) \\
&= xz(1+3\epsilon_1+O(eps^2)), \\
a_2 =& y(1+\epsilon_y)z(1+\epsilon_z)(1+\epsilon_2) = yz(1+\epsilon_y+\epsilon_z+\epsilon_2+O(eps^2)) \\
&= yz(1+3\epsilon_2+O(eps^2)), \\
a_3 =& (xz(1+3\epsilon_1) - yz(1+3\epsilon_2) + O(eps^2))(1+\epsilon_3) \\
&= (xz-yz)(1+\epsilon_3) + 3xz\epsilon_1 - 3yz\epsilon_2 + O(eps^2)
\end{aligned}$$

Wir bestimmen den relativen Fehler:

$$\left|\frac{a_3-(xz-yz)}{xz-yz}\right| = \frac{|(xz-yz)\epsilon_3 + 3xz\epsilon_1 - 3yz\epsilon_2|}{|xz-yz|} \le eps + 3\frac{|x|+|y|}{|x-y|}eps.$$

Die Fehlerverstärkung dieses Algorithmus kann für $x \approx y$ groß werden und entspricht etwa (Faktor 3) der Konditionierung der Aufgabe. Wir nennen den Algorithmus daher stabil.

Wir betrachten nun Algorithmus 2:

$$\begin{aligned}
a_1 =& (x(1+\epsilon_x) - y(1+\epsilon_y))(1+\epsilon_1) \\
&= (x-y)(1+\epsilon_1) + x\epsilon_x - y\epsilon_y + O(eps^2) \\
a_2 =& z(1+\epsilon_z)\big((x-y)(1+\epsilon_1) + x\epsilon_x - y\epsilon_y + O(eps^2)\big)(1+\epsilon_2) \\
&= z(x-y)(1+\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_z+O(eps)^2) + zx\epsilon_x - zy\epsilon_y + O(eps^2).
\end{aligned}$$

Für den relativen Fehler gilt in erster Ordnung:

$$\left|\frac{a_2-(xz-yz)}{xz-yz}\right| = \frac{|z(x-y)(\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_z) + zx\epsilon_x - zy\epsilon_y|}{|xz-yz|} \le 3eps + \frac{|x|+|y|}{|x-y|}eps$$

Die Fehlerverstärkung kann für $x \approx y$ wieder groß werden. Der Verstärkungsfaktor ist jedoch geringer als bei Algorithmus 1. Insbesondere fällt auf, dass dieser zweite Algorithmus bei fehlerfreien Eingabedaten keine Fehlerverstärkung aufweist. (Das ist der Fall $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_z = 0$).

Beide Algorithmen sind stabil, der zweite hat bessere Stabilitätseigenschaften als der erste.

Wir nennen zwei Algorithmen stabil, obwohl der eine wesentlich bessere Stabilitätseigenschaften hat. Der Stabilitätsbegriff dient daher oft zum relativen Vergleich verschiedener Algorithmen. Wir definieren

Definition 1.19 (Stabilität)**.** *Ein numerischer Algorithmus zum Lösen einer Aufgabe heißt* stabil*, falls die bei der Durchführung akkumulierten Rundungsfehler den durch die Kondition der Aufgabe gegebenen unvermeidlichen Fehler nicht übersteigen.*

Wir halten fest: für ein schlecht konditioniertes Problem existiert kein stabiler Algorithmus mit einer geringeren Fehlerfortpflanzung als durch die Konditionierung bestimmt. Für gut konditionierte Probleme können jedoch beliebig instabile Verfahren existieren.

Der wesentliche Unterschied zwischen beiden Algorithmen aus dem Beispiel ist die Reihenfolge der Operationen. In Algorithmus 1 ist der letzte Schritt eine Subtraktion, deren schlechte Kondition wir unter dem Begriff *Auslöschung* kennengelernt haben. Bereits akkumulierte Rundungsfehler zu Beginn des Verfahrens werden hier noch einmal wesentlich verstärkt. Bei Algorithmus 2 werden durch die abschließende Multiplikation die Rundungsfehler, die zu Beginn auftreten, nicht weiter verstärkt. Aus dem analysierten Beispiel leiten wir einer Regel her:

"Bei dem Entwurf von numerischen Algorithmen sollen schlecht konditionierte Operationen zu Beginn durchgeführt werden."

Teil I.

Numerische Methoden der Linearen Algebra

2. Grundlagen der Linearen Algebra

In der linearen Algebra wird die Struktur von linearen Abbildungen $T : V \to W$ zwischen endlich-dimensionalen Vektorräumen V und W untersucht. In der *numerischen linearen Algebra* befassen wir uns mit einigen praktischen Fragestellungen der linearen Algebra. Schwerpunkt der Anwendung ist das Lösen von linearen Gleichungssystemen, also das Auffinden von $x \in V$, so dass für ein $b \in W$ gilt $T(x) = b$. Weiter werden wir Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten linearer Abbildungen (welche sich als Matrizen darstellen lassen) sowie zur Orthogonalisierung von Vektoren kennenlernen. Die meisten Probleme der linearen Algebra treten als Teilprobleme anderer Verfahren auf. Große lineare Gleichungssysteme müssen zur Diskretisierung von Differentialgleichungen, aber z.B. auch bei der Approximation von Funktionen gelöst werden. Effiziente numerische Quadraturregeln benötigen zur Konstruktion die Nullstellen orthogonaler Polynome. Orthogonalisierungsverfahren spielen aber auch eine Rolle bei der Lösung von großen Gleichungssystemen.

Wir sammeln zunächst einige Definitionen und grundlegende Resultate. Es sei V stets ein Vektorraum über dem Körper $\mathbb{K}$. Üblicherweise betrachten wir den Raum der reellwertigen Vektoren $V = \mathbb{R}^n$.

Definition 2.1 (Basis)**.** *Eine Teilmenge $B = \{v_1, \dots, v_n\} \subset V$ eines Vektorraums über $\mathbb{K}$ heißt* Basis*, falls sich jedes Element $v \in V$ eindeutig als Linearkombination der* Basisvektoren *B darstellen lässt:*

$$v = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i, \quad \alpha_i \in \mathbb{K}.$$

Die eindeutige Darstellbarkeit jedes $v \in V$ durch Basisvektoren erlaubt es, den Vektorraum V mit dem Vektorraum der Koeffizientenvektoren $\alpha \in \mathbb{K}^n$ zu identifizieren. Daher können wir uns in diesem Abschnitt im wesentlichen auf diesen Raum (bzw. auf $\mathbb{R}^n$) beschränken. Alle Eigenschaften und Resultate übertragen sich auf V. Zum Beispiel ist ein Polynom eindeutig sowohl in Monom-, Newton- oder Lagrangebasis darstellbar und dann durch entsprechende Koeffizienten bestimmt.

Definition 2.2 (Norm)**.** *Eine Abbildung $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}_+$ heißt* Norm*, falls sie die folgenden drei Eigenschaften besitzt:*

1. *positive Definitheit:* $\|x\| \geq 0 \quad \forall x \in V, \qquad \|x\| = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0,$
2. *Linearität:* $\|\alpha x\| = |\alpha|\,\|x\| \qquad \forall x \in V,\ \alpha \in \mathbb{K},$
3. *Dreiecksungleichung:* $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \qquad \forall x, y \in V.$

Ein Vektorraum mit einer Norm heißt *normierter Raum.* Im $\mathbf{K}^n$ häufig verwendete Normen sind die *Maximumsnorm* $\|\cdot\|_\infty$, die *euklidische Norm* $\|\cdot\|_2$ sowie die l_1*-Norm* $\|\cdot\|_1$:

$$\|x\|_\infty := \max_{i=1,\dots,n} |x_i|, \quad \|x\|_2 := \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}, \quad \|x\|_1 := \sum_{i=1}^n |x_i|.$$

Im Vektorraum $\mathbb{R}^n$ sowie in allen endlich-dimensionalen Vektorräumen gilt der folgende wichtige Satz:

Satz 2.3 (Normäquivalenz)**.** *Zu zwei beliebigen Normen $\|\cdot\|$ sowie $\|\cdot\|'$ im endlich-dimensionalen Vektorraum V existiert eine Konstante $c > 0$ so dass gilt:*

$$\frac{1}{c}\|x\| \le \|x\|' \le c\|x\| \quad \forall x \in V.$$

Dieser Satz bedeutet, dass alle Normen in endlich-dimensionalen Vektorräumen äquivalent sind. Da Normen wesentlich für den Konvergenzbegriff sind, bedeutet dieses Resultat, dass eine Folge $x_n \to x$, welche bzgl. einer Norm $\|\cdot\|$ konvergiert auch bzgl. jeder anderen Norm $\|\cdot\|'$ konvergiert. Dieser Zusammenhang ist typisch für endlich-dimensionale Räume und gilt z.B. nicht in Funktionenräumen. So gilt z.B. für die Funktionenfolge $f_n(x) = \exp(-nx^2)$:

$$\|f_n - 0\|_{L^2([-1,1])} \xrightarrow{n\to\infty} 0, \quad \text{jedoch } \|f_n - 0\|_\infty \not\xrightarrow{n\to\infty} 0,$$

bezüglich der L^2-Norm sowie der Maximumsnorm:

$$\|f\|_{L^2([-1,1])} := \left(\int_{-1}^1 |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}}, \quad \|f\|_\infty := \sup_{x\in[-1,1]} |f(x)|.$$

Neben Normen spielen Räume, in denen ein *Skalarprodukt* existiert eine wichtige Rolle:

Definition 2.4 (Skalarprodukt)**.** *Eine Abbildung $(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{K}$ heißt Skalarprodukt, falls sie die folgenden Eigenschaften besitzt:*

1. *Definitheit:* $(x,x) > 0 \quad \forall x \in V,\ x \neq 0,$
   $(x,x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0$
2. *Linearität:* $(x, \alpha y + z) = \alpha(x,y) + (x,z) \quad \forall x,y,z \in V,\ \alpha \in \mathbb{K},$
3. *Hermitesch:* $(x,y) = \overline{(y,x)} \quad \forall x,y \in V,$

dabei ist $\bar z$ die komplexe Konjugation von $z \in \mathbb{C}$.

In reellen Räumen gilt die echte Symmetrie $(x,y) = (y,x)$. Weiter folgt aus 2. und 3.

$$(\alpha x, y) = \bar\alpha(x,y).$$

Das bekannteste Skalarprodukt ist das *euklidische Skalarprodukt* für Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$:

$$(x,y)_2 = x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Vektorräume mit Skalarprodukt werden *Prähilberträume* genannt. Komplexe Vektorräumen mit Skalarprodukt nennt man auch *unitäre Räume*, im Reellen spricht man von *euklidischen Räumen.*

Skalarprodukte sind eng mit Normen verwandt:

Satz 2.5 (Induzierte Norm)**.** *Es sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt. Dann ist durch*

$$\|x\| = \sqrt{(x,x)}, \quad x \in V,$$

auf V die induzierte Norm *gegeben.*

Beweis: Übung! □

Ein Prähilbertraum ist somit immer auch ein normierter Raum Falls der Prähilbertraum V bzgl. dieser Norm vollständig ist, also ein Banachraum ist, so heißt V *Hilbertraum.*

Die euklidische Norm ist die vom euklidischen Skalarprodukt induzierte Norm:

$$\|x\|_2 = (x,x)_2^{\frac{1}{2}}.$$

Einige wichtige Sätze gelten für Paare aus Skalarprodukt und induzierter Norm:

Satz 2.6. *Es sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt $(\cdot,\cdot)$ und induzierter Norm $\|\cdot\|$. Dann gilt die* Cauchy-Schwarzsche Ungleichung*:*

$$|(x,y)| \le \|x\|\,\|y\| \quad \forall x,y \in V,$$

sowie die Parallelogrammidentität*:*

$$\|x+y\|^2 + \|x-y\|^2 = 2\|x\|^2 + 2\|y\|^2 \quad \forall x,y \in V.$$

Beweis: Übung. □

Wir definieren weiter

Definition 2.7 (Orthogonalität)**.** *Zwei Vektoren $x,y \in V$ eines Prähilbertraums heißen* orthogonal*, falls $(x,y) = 0$.*

Die Einführung einer Normabbildung auf V ermöglicht es, den Abstand $\|x-y\|$ zu definieren. Die Existenz eines Skalarprodukts ermöglicht es, zwei Elementen einen Winkel zuzuordnen. Es gilt im euklidischen Skalarprodukt

$$\cos(\sphericalangle(x,y)) = \frac{(x,y)_2}{\|x\|_2\|y\|_2},$$

und hieraus folgt $x \perp y$ falls $(x,y)_2 = 0$. Dieser euklidische Winkelbegriff und Orthogonalitätsbegriff lässt sich auf beliebige Räume mit Skalarprodukt übertragen.

Eine der Aufgaben der numerischen linearen Algebra ist die Orthogonalisierung (oder auch Orthonormalisierung) von gegebenen Systemen von Vektoren:

Definition 2.8 (Orthonormalbasis)**.** *Eine Basis $B = \{v_1, \dots, v_n\}$ von V heißt* Orthogonalbasis *bezüglich des Skalarproduktes $(\cdot,\cdot)$, falls gilt:*

$$(\phi_i, \phi_j) = 0 \quad \forall i \neq j,$$

und Orthonormalbasis *falls gilt:*

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$$

mit dem Kronecker-Symbol

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}.$$

Mit unterschiedlichen Skalarprodukten existieren unterschiedliche Orthonormalbasen zu ein und demselben Vektorraum V. Orthogonalität stimmt dann im Allgemeinen nicht mit dem geometrischen Orthogonalitätsbegriff des euklidischen Raums überein:

Beispiel 2.9 (Skalarprodukte und Orthonormalbasis)**.** *Es sei $V = \mathbb{R}^2$. Durch*

$$(x,y)_2 := x_1y_1 + x_2y_2, \quad (x,y)_\omega := 2\,x_1y_1 + x_2y_2,$$

sind zwei verschiedene Skalarprodukte gegeben. Das erste ist das euklidische Skalarprodukt. Die Skalarprodukteigenschaften des zweiten sind einfach zu überprüfen. Durch

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^T, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1)^T,$$

ist eine Orthonormalbasis bezüglich $(\cdot,\cdot)_2$ gegeben. Es gilt jedoch:

$$(x_1, x_2)_\omega = \frac{1}{2}(2-1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \neq 0.$$

Eine Orthonormalbasis bzgl. $(\cdot,\cdot)_\omega$ erhalten wir z.B. durch

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1)^T, \quad x_2 = \frac{1}{2}(-1,2)^T.$$

Orthonormalbasen werden für zahlreiche numerische Verfahren benötigt, bei der Gauß'schen Quadratur, bei der Gauß-Approximation von Funktionen und z.B. für die QR-Zerlegung einer Matrix.

Wir betrachten nun den Vektorraum aller $\mathbb{R}^{n\times m}$-Matrizen. Auch dieser Vektorraum ist endlich-dimensional und prinzipiell können wir den Vektorraum der $n \times m$-Matrizen mit dem Vektorraum der (nm)-Vektoren identifizieren. Von besonderem Interesse ist für uns der Vektorraum der quadratischen $\mathbb{R}^{n\times n}$-Matrizen:

Definition 2.10 (Eigenwerte, Eigenvektoren)**.** *Die* Eigenwerte λ *einer Matrix* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *sind definiert als Nullstellen des charakteristischen Polynoms:*

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Die Menge aller Eigenwerte einer Matrix A *heißt das* Spektrum *von* A

$$\sigma(A) := \{\lambda \in \mathbb{C},\ \lambda \textit{ Eigenwert von } A\}.$$

Der Spektralradius $\operatorname{spr} : \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}_+$ *ist der betragsmäßig größte Eigenwert:*

$$\operatorname{spr}(A) := \max\{|\lambda|,\ \lambda \in \sigma(A)\}.$$

Ein Element $w \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ *heißt* Eigenvektor *zum Eigenwert* λ*, falls gilt:*

$$Aw = \lambda w.$$

Bei der Untersuchung von linearen Gleichungssystemen $Ax = b$ stellt sich zunächst die Frage, ob ein solches Gleichungssystem überhaupt lösbar ist und ob die Lösung eindeutig ist. Wir fassen zusammen:

Satz 2.11 (Reguläre Matrix)**.** *Für eine quadratische Matrix* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *sind die folgenden Aussagen äquivalent:*

1. *Die Matrix* A *ist regulär.*
2. *Die transponierte Matrix* A^T *ist regulär.*
3. *Die Inverse* A^{-1} *ist regulär.*
4. *Das lineare Gleichungssystem* $Ax = b$ *ist für jedes* $b \in \mathbb{R}^n$ *eindeutig lösbar.*
5. *Es gilt* $\det(A) \neq 0$.
6. *Alle Eigenwerte von* A *sind ungleich Null.*

Beweis: Übung. □

Wir definieren weiter:

Definition 2.12 (positiv definit)**.** *Eine Matrix* $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$ *heißt positiv definit, falls*

$$(Ax, x) > 0 \quad \forall x \neq 0, \quad x \in \mathbb{K}^n.$$

Umgekehrt können wir aus der definierenden Eigenschaft der positiven Definitheit einer Matrix ablesen: Falls A positiv definit ist, so ist durch $(A\cdot,\cdot)$ ein Skalarprodukt gegeben. Es gilt:

Satz 2.13 (Positiv definite Matrizen)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische Matrix. Dann ist A genau dann positiv definit, falls alle (reellen) Eigenwerte von A positiv sind. Ist A symmetrisch positiv definit, so sind alle Diagonalelemente von A positiv, d.h. echt größer Null, und das betragsmäßig größte Element steht auf der Diagonalen.*

Beweis: *(i)* Es sei A eine symmetrische Matrix mit einer Orthonormalbasis aus Eigenvektoren $w_1, \dots, w_n$. A sei positiv definit. Dann gilt für einen beliebigen Eigenvektor w_i mit Eigenwert λ_i:

$$0 < (Aw_i, w_i) = \lambda_i(w_i, w_i) = \lambda_i.$$

Umgekehrt seien alle λ_i positiv. Für $x = \sum_{i=1}^n \alpha_i w_i$ mit $x \neq 0$ gilt:

$$(Ax, x) = \sum_{i,j}(\lambda_i \alpha_i \omega_i, \alpha_j \omega_j) = \sum_i \lambda_i \alpha_i^2 > 0.$$

(ii) A sei nun eine reelle, positiv definite Matrix. Es sei e_i der i-te Einheitsvektor. Dann gilt:

$$0 < (Ae_i, e_i) = a_{ii}.$$

D.h., alle Diagonalelemente sind positiv.

(iii) Entsprechend wählen wir nun $x = e_i - \operatorname{sign}(a_{ij})e_j$. Wir nehmen an, dass $a_{ji} = a_{ij}$ das betragsmäßig größte Element der Matrix sei. Dann gilt:

$$0 < (Ax, x) = a_{ii} - \operatorname{sign}(a_{ij})(a_{ij} + a_{ji}) + a_{jj} = a_{ii} + a_{ij} - 2|a_{ij}| \leq 0.$$

Aus diesem Widerspruch folgt die letzte Aussage des Satzes: Das betragsmäßig größte Element muss ein Diagonalelement sein. □

Für Normen auf dem Raum der Matrizen definieren wir weitere Struktureigenschaften:

Definition 2.14 (Matrixnormen)**.** *Eine Norm $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}_+$ heißt* Matrizenorm*, falls sie submultiplikativ ist:*

$$\|AB\| \leq \|A\|\,\|B\| \quad \forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Sie heißt verträglich *mit einer Vektornorm $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$, falls gilt:*

$$\|Ax\| \leq \|A\|\,\|x\| \quad \forall A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ x \in \mathbb{R}^n.$$

Eine Matrixnorm $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}_+$ heißt von einer Vektornorm $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$ induziert*, falls gilt:*

$$\|A\| := \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}.$$

Für eine induzierte Matrixnorm gilt stets

$$\|A\| := \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sup_{\|x\|\leq 1} \|Ax\|.$$

Es ist leicht nachzuweisen, dass jede von einer Vektornorm induzierte Matrixnorm mit dieser auch verträglich ist. Verträglich mit der euklidischen Norm ist aber auch die *Frobeniusnorm*

$$\|A\|_F := \left(\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

welche nicht von einer Vektor-Norm induziert ist. Für allgemeine Normen auf dem Vektorraum der Matrizen gilt nicht notwendigerweise $\|I\| = 1$, wobei $I \in \mathbb{R}^{n\times n}$ die Einheitsmatrix ist. Dieser Zusammenhang gilt aber für jede von einer Vektornorm induzierte Matrixnorm. Wir fassen im folgenden Satz die wesentlichen induzierten Matrixnormen zusammen:

Satz 2.15 (Induzierte Matrixnormen)**.** *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Die aus der euklidischen Vektornorm, der Maximumsnorm sowie der l_1-Norm induzierten Matrixnormen sind die* Spektralnorm $\|\cdot\|_2$*, die maximale Zeilensumme $\|\cdot\|_\infty$, sowie die maximale Spaltensumme $\|\cdot\|_1$:*

$$\|A\|_2 = \sqrt{\operatorname{spr}(A^TA)}, \quad \operatorname{spr}(B) := \max\{|\lambda|,\ \lambda \textit{ ist Eigenwert von } B\},$$

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

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

Beweis: *(i)* Es gilt:

$$\|A\|_2^2 = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_2^2}{\|x\|_2^2} = \sup_{x\neq 0} \frac{(Ax,Ax)}{\|x\|_2^2} = \sup_{x\neq 0} \frac{(A^TAx,x)}{\|x\|_2^2}$$

Die Matrix A^TA ist symmetrisch und hat als solche nur reelle Eigenwerte. Sie besitzt eine Orthonormalbasis $\omega_i \in \mathbb{R}^n$ von Eigenvektoren mit Eigenwerten $\lambda_i \geq 0$. Alle Eigenwerte λ_i sind größer gleich Null, denn:

$$\lambda_i = \lambda_i(\omega_i,\omega_i) = (A^TA\omega_i,\omega_i) = (A\omega_i,A\omega_i) = \|A\omega_i\|^2 \geq 0. \tag{2.1}$$

Es sei $x \in \mathbb{R}^n$ beliebig mit Basisdarstellung $x = \sum_i \alpha_i\omega_i$. Es gilt dann wegen $(\omega_i,\omega_j)_2 = \delta_{ij}$ die Beziehung $\|x\|_2^2 = \sum_i \alpha_i^2$ mit $\alpha_i \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}\|A\|_2^2 &= \sup_{\alpha\neq 0} \frac{(\sum_i \alpha_i A^TA\omega_i, \sum_i \alpha_i\omega_i)}{\sum_i \alpha_i^2} = \sup_{\alpha\neq 0} \frac{(\sum_i \alpha_i\lambda_i\omega_i, \sum_i \alpha_i\omega_i)}{\sum_i \alpha_i^2} \\ &= \sup_{\alpha\neq 0} \frac{\sum_i \lambda_i\alpha_i^2}{\sum_i \alpha_i^2} \leq \max_i \lambda_i.\end{aligned}$$

Es sei nun umgekehrt durch λ_k der größte Eigenwert gegeben. Dann gilt wegen (2.1) mit $\alpha_i = \delta_{ki}$:

$$0 \leq \max_i \lambda_i = \lambda_k = \sum_i \lambda_i\alpha_i^2 = \sum_{i,j} (\lambda_i\alpha_i\omega_i, \alpha_j\omega_j) = (A^TAx,x) = \|Ax\|_2^2. \tag{2.2}$$

Also gilt $\max_i \lambda_i \leq \|A\|_2^2$.

(ii) Wir zeigen das Ergebnis exemplarisch für die Maximumsnorm:

$$\|Ax\|_\infty = \sup_{\|x\|_\infty=1} \left(\max_i \sum_{j=1}^m a_{ij} x_j \right).$$

Diese Summe mit $\|x\|_\infty = 1$ nimmt ihr Maximum an, falls $|x_j| = 1$ und falls das Vorzeichen x_j so gewählt wird, dass $a_{ij} x_j \geq 0$ für alle $j = 1, \dots, m$. Dann gilt:

$$\|Ax\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^m |a_{ij}|.$$

□

Als Nebenresultat erhalten wir aus (2.2), dass jeder Eigenwert betragsmäßig durch die Spektralnorm der Matrix A beschränkt ist. Es gilt sogar mit beliebiger Matrixnorm und verträglicher Vektornorm für einen Eigenwert λ mit zugehörigem Eigenvektor $w \in \mathbb{R}^n$ von A:

$$|\lambda| = \frac{|\lambda| \, \|w\|}{\|w\|} = \frac{\|Aw\|}{\|w\|} \leq \frac{\|A\| \, \|w\|}{\|w\|} = \|A\|.$$

Eine einfache Schranke für den betragsmäßig größten Eigenwert erhält man also durch Analyse beliebiger (verträglicher) Matrixnormen.

Aus Satz 2.15 folgern wir weiter, dass für symmetrische Matrizen die $\| \cdot \|_2$-Norm mit dem Spektralradius der Matrix selbst übereinstimmt, daher der Name Spektralnorm.

3. Lineare Gleichungssysteme

Das Lösen von linearen Gleichungssystemen ist eine der wichtigsten numerischen Aufgaben. Viele Probleme sind nicht unmittelbar als lineares Gleichungssystem formuliert, in vielen Anwendungen treten allerdings ständig (unter Umständen sehr große) lineare Gleichungssysteme auf. Groß bedeutet in Anwendungen, dass Gleichungssysteme mit vielen Millionen Unbekannten gelöst werden müssen. Wir werden uns in diesem Abschnitt ausschließlich mit reellwertigen Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ befassen. Methoden zum Lösen von linearen Gleichungsystemen klassifiziert man als *direkte Verfahren*, welche die Lösung des Gleichungssystems unmittelbar und bis auf Rundungsfehlereinflüsse exakt berechnen und *iterative Verfahren*, welche die Lösung durch eine Fixpunktiteration approximieren. Hier befassen wir uns ausschließlich mit direkten Methoden. Iterative Verfahren sind Gegenstand von Kapitel 8.

Als einführendes Beispiel betrachten wir das einfache Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 0.988 & 0.960 \\ 0.992 & 0.963 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.084 \\ 0.087 \end{pmatrix}$$

mit der Lösung $(x,y)^T = (3,-3)^T$. Wir bestimmen die Lösung numerisch durch Gauß-Elimination mit dreistelliger Rechengenauigkeit. Die Gauß-Elimination setzen wir dabei als bekannt voraus:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0.988 & 0.960 & 0.084 \\ 0.992 & 0.963 & 0.087 \end{array}\right) \quad \times 0.988/0.992$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0.988 & 0.960 & 0.084 \\ 0.988 & 0.959 & 0.0866 \end{array}\right) \quad \downarrow -$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0.988 & 0.959 & 0.084 \\ 0 & 0.001 & -0.0026 \end{array}\right)$$

Mit Hilfe der Gauß-Elimination haben wir die Matrix A auf eine Dreiecksgestalt transformiert. Die rechte Seite b wurde entsprechend modifiziert. Das resultierende Dreieckssystem kann nun sehr einfach durch Rückwärtseinsetzen gelöst werden (bei dreistelliger Rechnung):

$$0.001y = -0.0026 \ \Rightarrow\ y = -2.6, \quad 0.988x = 0.087 - 0.959 \cdot (-2.6) \approx 2.58 \ \Rightarrow\ x = 2.61$$

Wir erhalten also $(x, y) = (2.61, -2.60)$. Der relative Fehler der numerischen Lösung beträgt somit mehr als 10%. Die numerische Aufgabe, ein Gleichungssystem zu lösen scheint also entweder generell sehr schlecht konditioniert zu sein (siehe Kapitel 1), oder aber das Eliminationsverfahren zur Lösung eines linearen Gleichungssystems ist numerisch sehr instabil und nicht gut geeignet. Der Frage nach der Konditionierung und Stabilität gehen wir im folgenden Abschnitt auf den Grund.

In der praktischen Anwendung treten sehr große Gleichungssysteme $Ax = b$ auf. Bei der numerischen Approximation von partiellen Differentialgleichungen müssen Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ der Dimension $n > 1\,000\,000$ invertiert werden. (Man nennt das Lösen eines linearen Gleichungssystems oft invertieren, auch wenn die Inverse A^{-1} nicht wirklich aufgestellt wird). Hinzu kommt, dass ein solches lineares Gleichungssystem oft wiederholt (viele 1 000 mal) gelöst werden muss (z.B. bei der Diskretisierung von instationären Differentialgleichungen, oder bei nichtlinearen Gleichungen). Neben der Stabilität des Lösungsprozesses wird auch die numerische Effizienz eine große Rolle spielen. Man versuche, eine 20×20-Matrix mit dem Gauß'schen Eliminationsverfahren zu invertieren!

3.1. Störungstheorie & Stabilitätsanalyse von linearen Gleichungssystemen

Zu einer quadratischen, regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sowie einem Vektor $b \in \mathbb{R}^n$ betrachten wir das lineare Gleichungssystem

$$Ax = b.$$

Durch numerische Fehler, Rundungsfehler oder bloße Eingabefehler zum Beispiel durch Messungenauigkeiten liegen sowohl A als auch b nur gestört vor:

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}.$$

Dabei sei $\tilde{A} = A + \delta A$ sowie $\tilde{b} = b + \delta b$, mit den Störungen δA sowie δb.

Wir kommen nun zur Kernaussage dieses Abschnitts und wollen die Fehlerverstärkung beim Lösen von linearen Gleichungssystemen betrachten. Fehler können dabei in der Matrix A als auch in der rechten Seite b auftauchen. Wir betrachten zunächst Störungen der rechten Seite:

Satz 3.1 (Störung der rechten Seite)**.** *Durch $x \in \mathbb{R}^n$ sei die Lösung des linearen Gleichungsystems $Ax = b$ gegeben. Es sei δb eine Störung der rechten Seite $\tilde{b} = b + \delta b$ und $\tilde{x}$ die Lösung des gestörten Gleichungssystems $A\tilde{x} = \tilde{b}$. Dann gilt:*

$$\delta x := \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \operatorname{cond}(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|},$$

mit der Konditionszahl *der Matrix*

$$\operatorname{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|.$$

Beweis: Es sei $\|\cdot\|$ eine beliebige Matrixnorm mit verträglicher Vektornorm $\|\cdot\|$. Für die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ und gestörte Lösung $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ gilt:

$$\tilde{x} - x = A^{-1}(A\tilde{x} - Ax) = A^{-1}(\tilde{b} - b) = A^{-1}\delta b.$$

Also:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|x\|} \cdot \frac{\|b\|}{\|b\|} = \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \cdot \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \le \underbrace{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|}_{=:\mathrm{cond}(A)} \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

□

Bemerkung 3.2 (Konditionszahl einer Matrix)**.** *Die Konditionszahl einer Matrix spielt die entscheidende Rolle in der numerischen Linearen Algebra. Betrachten wir etwa die Konditionierung der Matrix-Vektor Multiplikation $y = Ax$ so erhalten wir bei gestörter Eingabe $\tilde{x} = x + \delta x$ wieder:*

$$\frac{\|\delta y\|}{\|y\|} \le \mathrm{cond}(A) \frac{\|\delta x\|}{\|x\|}$$

Die Konditionszahl einer Matrix hängt von der gewählten Norm ab. Da jedoch alle Matrixnormen im $\mathbb{R}^{n\times n}$ äquivalent sind, sind auch alle Konditionsbegriffe äquivalent. Mit Satz 2.15 folgern wir für symmetrische Matrizen für den Spezialfall $\mathrm{cond}_2(A)$:

$$\mathrm{cond}_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\max\{|\lambda|,\ \lambda \textit{ Eigenwert von } A\}}{\min\{|\lambda|,\ \lambda \textit{ Eigenwert von } A\}}.$$

Wir betrachten nun den Fall, dass die Matrix A eines linearen Gleichungssystems mit einer Störung δA versehen ist. Es stellt sich zunächst die Frage, ob die gestörte Matrix $\tilde{A} = A + \delta A$ überhaupt noch regulär ist.

Hilfsatz 3.3. *Es sei durch $\|\cdot\|$ eine von der Vektornorm induzierte Matrixnorm gegeben. Weiter sei $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Matrix mit $\|B\| < 1$. Dann ist die Matrix $I + B$ regulär und es gilt die Abschätzung:*

$$\|(I+B)^{-1}\| \le \frac{1}{1 - \|B\|}.$$

Beweis: Es gilt:

$$\|(I+B)x\| \ge \|x\| - \|Bx\| \ge (1 - \|B\|)\|x\|$$

Da $1 - \|B\| > 0$ ist durch $I + B$ eine injektive Abbildung gegeben. Also ist $I + B$ eine reguläre Matrix. Weiter gilt:

$$\begin{aligned} 1 = \|I\| &= \|(I+B)(I+B)^{-1}\| = \|(I+B)^{-1} + B(I+B)^{-1}\| \\ &\ge \|(I+B)^{-1}\| - \|B\|\,\|(I+B)^{-1}\| = \|(I+B)^{-1}\|(1 - \|B\|) > 0. \end{aligned}$$

□

Mit diesem Hilfsatz können wir im Folgenden auch auf die Störung der Matrix eingehen:

Satz 3.4 (Störung der Matrix)**.** *Es sei* $x \in \mathbb{R}^n$ *die Lösung des linearen Gleichungssystems* $Ax = b$ *und* $\tilde{A} = A + \delta A$ *einer gestörte Matrix mit* $\|\delta A\| \leq \|A^{-1}\|^{-1}$*. Für die gestörte Lösung* $\tilde{x} = x + \delta x$ *von* $\tilde{A}\tilde{x} = b$ *gilt:*

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A)\|\delta A\|/\|A\|} \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}.$$

Beweis: Wir betrachten den Fall, dass die rechte Seite nicht gestört ist: $\delta b = 0$. Dann gilt für die Lösung x sowie die gestörte Lösung $\tilde{x}$ und den Fehler $\delta x := \tilde{x} - x$:

$$\begin{aligned} (A + \delta A)\tilde{x} &= b \\ (A + \delta A)x &= b + \delta A x \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \delta x = -[A + \delta A]^{-1} \delta A x.$$

Da laut Voraussetzung $\|A^{-1}\delta A\| \leq \|A^{-1}\|\,\|\delta A\| < 1$ folgt mit Hilfsatz 3.3:

$$\begin{aligned} \|\delta x\| &\leq \|A^{-1}[I + A^{-1}\delta A]^{-1}\delta A\|\,\|x\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\delta A\|}\|\delta A\|\,\|x\| \\ &\leq \frac{\text{cond}_2(A)}{1 - \|A^{-1}\|\|\delta A\|} \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\|x\|. \end{aligned}$$

Das Ergebnis erhalten wir durch Erweitern mit $\|A\|/\|A\|$. □

Diese beiden Störungssätze können einfach kombiniert werden, um gleichzeitig die Störung durch rechte Seite und Matrix abschätzen zu können:

Satz 3.5 (Störungssatz für lineare Gleichungssysteme)**.** *Es sei* $x \in \mathbb{R}^n$ *die Lösung des linearen Gleichungssystems* $Ax = b$ *mit einer regulären Matrix* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$*. Für die Lösung* $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ *des gestörten Systems* $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ *mit Störungen* $\delta b = \tilde{b} - b$ *und* $\delta A = \tilde{A} - A$ *gilt unter der Voraussetzung*

$$\|\delta A\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$$

die Abschätzung:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A)\|\delta A\|/\|A\|} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right),$$

mit der Konditionszahl

$$\text{cond}(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|.$$

Beweis: Wir kombinieren die Aussagen von Satz 3.1 und 3.4. Hierzu sei x die Lösung von $Ax = b$, $\tilde{x}$ die gestörte Lösung $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ und $\hat{x}$ die Lösung zu gestörter rechter Seite $A\hat{x} = \tilde{b}$. Dann gilt:

$$\|x - \tilde{x}\| \leq \|x - \hat{x}\| + \|\hat{x} - \tilde{x}\| \leq \text{cond}(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\|x\| + \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\|x\|$$

Beachte $\|\delta A\| < \|A^{-1}\|^{-1}$

$$0 \leq \mathrm{cond}(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} < \|A\|\,\|A^{-1}\|\,\frac{1}{\|A\|\,\|A^{-1}\|} \leq 1.$$

Also gilt

$$\mathrm{cond}(A) \leq \frac{\mathrm{cond}(A)}{1 - \mathrm{cond}(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}.$$

Damit folgt die Aussage. $\square$

Mit diesem Ergebnis kehren wir zum einführenden Beispiel aus Abschnitt 3 zurück:

$$A = \begin{pmatrix} 0.988 & 0.959 \\ 0.992 & 0.963 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad A^{-1} \approx \begin{pmatrix} 8302 & -8267 \\ -8552 & 8517 \end{pmatrix}$$

In der maximalen Zeilensummennorm $\|\cdot\|_\infty$ gilt:

$$\|A\|_\infty = 1.955, \quad \|A^{-1}\|_\infty \approx 17069, \quad \mathrm{cond}_\infty(A) \approx 33370.$$

Das Lösen eines linearen Gleichungssystems mit der Matrix A ist also äußerst schlecht konditioniert. Hieraus resultiert der enorme Rundungsfehler im Beispiel zu Beginn des Kapitels. Wir halten hier fest: Bei großer Konditionszahl ist die Konditionierung des Problems sehr schlecht, d.h. der große Fehler ist immanent mit der Aufgabe verbunden und nicht unbedingt auf ein Stabilitätsproblem des Verfahrens zurückzuführen.

3.2. Das Gauß'sche Eliminationsverfahren und die LR-Zerlegung

Das wichtigste Verfahren zum Lösen eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ mit quadratischer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist das Gauß'sche Eliminationsverfahren: durch Elimination der Einträge unterhalb der Diagonale wird die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ in den ersten $n-1$ Schritten auf eine obere rechte Dreiecksgestalt gebracht:

$$\begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ * & * & * & & * \\ * & * & * & & * \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ * & * & * & \cdots & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & & * \\ 0 & * & * & & * \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix} \to \cdots \to \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & & * \\ 0 & 0 & * & & * \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & * \end{pmatrix}$$

Mit der rechten oberen Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ($R = (r_{ij})_{i,j=1}^n$ mit $r_{ij} = 0$ für $i > j$) kann das reduzierte Gleichungssystem

$$Rx = \tilde{b},$$

durch *Rückwärtseinsetzen* gelöst werden, wobei $\tilde{b}$ aus b durch Anwenden der Eliminationsschritte entsteht. Wir betrachten zunächst diese Rückwärtseinsetzen:

Algorithmus 3.6 (Rückwärtseinsetzen)**.** *Es sei $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre rechte obere Dreiecksmatrix, d.h. $r_{ii} \neq 0$. Die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Rx = b$ ist gegeben durch:*

1. *Setze $x_n = r_{nn}^{-1} b_n$.*
2. *Für $i = n-1, \ldots, 1$*

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

Es gilt:

Satz 3.7 (Rückwärtseinsetzen)**.** *Es sei $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine rechte obere Dreiecksmatrix mit $r_{ii} \neq 0$. Dann ist die Matrix R regulär und das Rückwärtseinsetzen erfordert*

$$N_R(n) = \frac{n^2}{2} + O(n)$$

arithmetische Operationen.

Beweis: Es gilt $\det(R) = \prod r_{ii} \neq 0$. Also ist die Matrix R regulär.

Jeder Schritt des Rückwärtseinsetzens besteht aus Additionen, Multiplikationen und Division durch die Diagonalelemente. Bei $r_{ii} \neq 0$ ist jeder Schritt durchführbar.

Zur Berechnung von x_i sind $n-i$ Multiplikationen und Additionen notwendig. Hinzu kommt eine Division pro Schritt. Dies ergibt:

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

$\square$

Die Transformation von A auf Dreiecksgestalt geschieht durch zeilenweise Elimination:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \ddots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(3)} & \ddots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \to$$

$$\to \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \ddots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix} \to \cdots \to A^{(n-1)} =: R.$$

Beginnend mit $A^{(0)} := A$ werden sukzessive Matrizen $A^{(i)}$ erzeugt, mit $A^{(n-1)} =: R$. Dabei wird in Schritt i des Verfahrens die i-te Spalte von $A^{(i-1)}$ unterhalb der Diagonalen eliminiert. Dies geschieht durch Subtraktion des $g_k^{(i)}$-fachen der i-ten Zeile von der k-ten. Hierbei gilt für $k = i+1, \dots, n$

$$g_k^{(i)} := \frac{a_{ki}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}},$$

und die neue Zeile berechnet sich zu

$$a_{kj}^{(i)} = a_{kj}^{(i-1)} - g_k^{(i)} a_{ij}^{(i-1)}, \quad k = i+1, \dots, n, \quad j = i, \dots, n.$$

Damit diese Vorschrift durchgeführt werden kann muss stets $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0$ gelten. Dies folgt nicht zwingend aus der Regularität von A und aller $A^{(i)}$. Wir gehen zunächst davon aus, dass $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0$ erfüllt ist und kommen später auf den allgemeinen Fall zurück. Im i-ten Eliminationschritt bleiben die ersten $i-1$ Zeilen und Spalten unverändert. Der i-te Eliminationsschritt lässt sich kompakt in Form einer Matrix-Matrix Multiplikation schreiben

$$A^{(i)} = F^{(i)} A^{(i-1)},$$

mit der Eliminationsmatrix (alle nicht spezifizierten Einträge sind Null):

$$F^{(i)} := \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -g_{i+1}^{(i)} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -g_n^{(i)} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad g_k^{(i)} := \frac{a_{ki}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}}.$$

Mehrfache Anwendung von Eliminationsmatrizen führt zu der Darstellung:

$$R = A^{(n-1)} = F^{(n-1)} A^{(n-2)} = F^{(n-1)} F^{(n-2)} A^{(n-3)} = \underbrace{F^{(n-1)} \cdots F^{(1)}}_{=:F} A^{(0)} = FA. \quad (3.1)$$

Matrizen mit der Gestalt der Eliminationsmatrizen $F^{(i)}$ heißen *Frobeniusmatrizen*. Es gilt der folgende Satz:

Satz 3.8 (Frobeniusmatrix)**.** *Jede Frobeniusmatrix $F^{(i)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist regulär und es gilt:*

$$F^{(i)} := \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -g_{i+1} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -g_n & & & 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad [F^{(i)}]^{-1} := \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & g_{i+1} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & g_n & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Für zwei Frobeniusmatrizen $F^{(i_1)}$ und $F^{(i_2)}$ mit $i_1 < i_2$ gilt:

$$F^{(i_1)}F^{(i_2)} = F^{(i_1)} + F^{(i_2)} - I = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & -g^{(i_1)}_{i_1+1} & 1 & & & \\ & & \vdots & & \ddots & & \\ & & \vdots & & & 1 & & \\ & & \vdots & & & -g^{(i_2)}_{i_2+1} & \ddots & \\ & & \vdots & & & \vdots & & \ddots & \\ & & -g^{(i_1)}_n & & & -g^{(i_2)}_n & & & 1 \end{pmatrix}$$

Beweis: Nachrechnen! □

Bei der Multiplikation von Frobeniusmatrizen ist darauf zu achten, dass diese nicht kommutativ ist. Es gilt:

$$F^{(i_2)}F^{(i_1)} \neq F^{(i_1)} + F^{(i_2)} - I \text{ für } i_1 < i_2!$$

Aus dem Multiplikationsverhalten von Frobeniusmatrizen können wir für $i_1 < i_2 < i_3$ eine einfache Verallgemeinerung ableiten:

$$\begin{aligned} F^{(i_1)}F^{(i_2)}F^{(i_3)} &= F^{(i_1)}\big(F^{(i_2)} + F^{(i_3)} - I\big) = F^{(i_1)}F^{(i_2)} + F^{(i_1)}F^{(i_3)} - F^{(i_1)} \\ &= F^{(i_1)} + F^{(i_2)} - I + F^{(i_1)} + F^{(i_3)} - I - F^{(i_1)} \\ &= F^{(i_1)} + F^{(i_2)} + F^{(i_3)} - 2I. \end{aligned}$$

Wir setzen nun (3.1) fort und mit $F^{-(i)} := [F^{(i)}]^{-1}$ gilt bei Verwendung von Satz 3.8 zunächst, dass F als Produkt von regulären Matrizen selbst regulär ist. Also folgt:

$$A = F^{-1}R = [F^{(n-1)} \cdots F^{(1)}]^{-1}R = \underbrace{F^{-(1)} \cdots F^{-(n-1)}}_{=:L} R.$$

Die Matrix L ist nach der Verallgemeinerung von Satz 3.8 eine untere Dreiecksmatrix mit Diagonaleinträgen 1:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ g_2^{(1)} & 1 & & & & \\ g_3^{(1)} & g_3^{(2)} & 1 & & & \\ g_4^{(1)} & g_4^{(2)} & g_4^{(3)} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ g_n^{(1)} & g_n^{(2)} & \dots & \dots & g_n^{(n-1)} & 1. \end{pmatrix}$$

Wir fassen zusammen:

Satz 3.9 (LR-Zerlegung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine quadratische, reguläre Matrix. Angenommen alle bei der Elimination auftretenden Diagonalelemente $a_{ii}^{(i-1)}$ seien ungleich Null. Dann existiert die eindeutig bestimmte LR-Zerlegung in eine rechte obere reguläre Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sowie in eine linke untere reguläre Dreiecksmatrix $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit Diagonaleinträgen 1. Die Aufwand zur Durchführung der LR-Zerlegung beträgt*

$$\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$$

arithmetische Operationen.

Beweis: *(i) Eindeutigkeit.* Angenommen, es existieren zwei LR-Zerlegungen

$$A = L_1 R_1 = L_2 R_2 \quad \leftrightarrow \quad L_2^{-1} L_1 = R_2 R_1^{-1}.$$

Das Produkt von Dreiecksmatrizen ist wieder eine Dreiecksmatrix, also müssen beide Produkte Diagonalmatrizen sein. Das Produkt $L_2^{-1}L_1$ hat nur Einsen auf der Diagonale, also folgt

$$L_2^{-1} L_1 = R_2 R_1^{-1} = I,$$

und somit $L_1 = L_2$ und $R_1 = R_2$.

(ii) Durchführbarkeit. Jeder Schritt der Elimination ist durchführbar, solange nicht durch $a_{ii}^{(i-1)} = 0$ geteilt werden muss. Die Matrix F ist per Konstruktion regulär und somit existiert auch die Matrix L.

(iii) Aufwand. Im i-ten Eliminationsschritt

$$A^{(i)} = F^{(i)} A^{(i-1)}$$

sind zunächst $n-i$ arithmetische Operationen zur Berechnung der $g_j^{(i)}$ für $j = i+1, \dots, n$ notwendig. Die Matrix-Matrix Multiplikation betrifft nur alle Elemente a_{kl} mit $k > i$ sowie $l > i$. Es gilt:

$$a_{kl}^{(i)} = a_{kl}^{(i-1)} - g_k^{(i)} a_{ik}^{(i)}, \quad k, l = i+1, \dots, n.$$

Hierfür sind $(n-i)^2$ arithmetische Operationen notwendig. Insgesamt summiert sich der Aufwand in den $n-1$ Schritten zu:

$$N_{LR}(n) = \sum_{i=1}^{n-1} \{n - i + (n-i)^2\} = \sum_{i=1}^{n-1} \{i + i^2\},$$

und mit den bekannten Summenformeln folgt:

$$N_{LR}(n) = \frac{n^3}{3} + \frac{n}{3}.$$

$\square$

Die LR-Zerlegung kann nun zum Lösen von linearen Gleichungssystemen verwendet werden:

Algorithmus 3.10 (Lösen von linearen Gleichungsystemen mit der LR-Zerlegung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix, für welche die LR-Zerlegung existiert.*

1. *Berechne die LR-Zerlegung $A = LR$ in linke untere und rechte obere Dreiecksmatrix.*
2. *Löse das Gleichungssystem $Ax = b$ durch Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen:*

$$\begin{aligned} (i) \quad & \textit{Suche } y \in \mathbb{R}^n: \quad && Ly = b \\ (ii) \quad & \textit{Suche } x \in \mathbb{R}^n: \quad && Rx = y. \end{aligned}$$

Die Vorwärtselimination läuft entsprechend des Rückwärtseinsetzens in Algorithmus 3.6 und gemäß Satz 3.7 benötigt sie $O(n^2)$ Operationen. Das eigentliche Lösen eines linearen Gleichungsystems ist also weit weniger aufwendig als das Erstellen der Zerlegung. In vielen Anwendungsproblemen, etwa bei der Diskretisierung von parabolischen Differentialgleichungen, müssen sehr viele Gleichungssysteme mit unterschiedlichen rechten Seiten aber identischen Matrizen hintereinander gelöst werden. Hier bietet es sich an, die Zerlegung nur einmal zu erstellen und dann wiederholt anzuwenden.

Bemerkung 3.11 (Praktische Aspekte)**.** *Die Matrix L ist eine linke untere Dreiecksmatrix mit Einsen auf der Diagonale. Die bekannten Diagonalelemente müssen demnach nicht gespeichert werden. Ebenso müssen die Nullelemente der Matrizen $A^{(i)}$ unterhalb der Diagonale nicht gespeichert werden. Es bietet sich an, die Matrizen L und R in der gleichen quadratischen Matrix zu speichern. In Schritt i gilt dann:*

$$\tilde{A}^{(i)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ \boldsymbol{l_{21}} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & & & & \vdots \\ \boldsymbol{l_{31}} & \boldsymbol{l_{32}} & a_{33}^{(2)} & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & \boldsymbol{l_{i+1,i}} & a_{i+1,i+1}^{(i)} & \cdots & a_{i+1,n}^{(i)} \\ \vdots & & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{l_{n1}} & \boldsymbol{l_{n2}} & \boldsymbol{\cdots} & \boldsymbol{l_{n,i}} & a_{n,i+1}^{(i)} & \cdots & a_{nn}^{(i)} \end{pmatrix}$$

Dabei sind die fett gedruckten Werte die Einträge von L. Die Werte oberhalb der Linie ändern sich im Verlaufe des Verfahrens nicht mehr und bilden bereits die Einträge L sowie R.

Pivotierung Das Element $a_{ii}^{(i-1)}$ wird das *Pivot-Element* genannt. Bisher musste dieses Element stets ungleich Null sein. Dies ist jedoch für reguläre Matrizen nicht zwingend notwendig. Wir betrachten als Beispiel die Matrix

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 \\ 2 & 8 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Im ersten Schritt zur Erstellung der LR-Zerlegung ist $a_{11}^{(0)} = 1$ und es gilt:

$$A^{(1)} = F^{(1)} A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 \\ 2 & 8 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & -3 \\ 0 & -2 & -1 \end{pmatrix}.$$

An dieser Stelle bricht der Algorithmus ab, denn es gilt $a_{22}^{(1)} = 0$. Wir könnten den Algorithmus jedoch mit der Wahl $a_{32}^{(i)} = -2$ als neues Pivot-Element weiterführen. Dies geschieht systematisch durch Einführen einer *Pivotisierung*. Im i-ten Schritt des Verfahrens wird zunächst ein geeignetes Pivot-Element a_{ki} in der i-ten Spalte mit $k \geq i$ gesucht. Die k-te und i-te Zeile werden getauscht und die LR-Zerlegung kann weiter durchgeführt werden. Das Tauschen von k-ter und i-ter Zeile erfolgt durch Multiplikation mit einer

Pivot-Matrix:

$$P^{ki} := \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & \\ & & & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & & & \\ & & & 0 & 1 & & & 0 & & & \\ & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & & \\ & & & 0 & & & 1 & 0 & & & \\ & & & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & & & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Es gilt $p_{jj}^{ki} = 1$ für $j \neq k$ und $j \neq i$ sowie $p_{ki}^{ki} = p_{ik}^{ki} = 1$, alle anderen Elemente sind Null. Wir fassen einige Eigenschaften von P zusammen:

Satz 3.12 (Pivot-Matrizen)**.** *Es sei $P = P^{ki}$ die Pivot-Matrix mit $P_{jj}^{ki} = 1$ für $j \neq k, i$ und $P_{ki}^{ki} = P_{ik}^{ki} = 1$. Die Anwendung $P^{ki}A$ von links tauscht k-te und i-te Zeile von A, die Anwendung AP^{ki} von rechts tauscht k-te und i-te Spalte. Es gilt:*

$$P^2 = I \text{ und somit } P^{-1} = P.$$

Beweis: Übung. □

In Schritt i der LR-Zerlegung suchen wir nun zunächst das Pivot-Element:

Algorithmus 3.13 (Pivot-Suche)**.** *In Schritt i suche Index $k \geq i$, so dass*

$$|a_{ki}| = \max_{j \geq i} |a_{ji}|.$$

Bestimme die Pivot-Matrix als $P^{(i)} := P^{ki}$.

Im Anschluss bestimmen wir $A^{(i)}$ als

$$A^{(i)} = F^{(i)} P^{(i)} A^{(i-1)}.$$

Die Pivotisierung sorgt dafür, dass alle Elemente $g_k^{(i)} = a_{ki}^{(i-1)}/a_{ii}^{(i-1)}$ von $F^{(i)}$ im Betrag durch 1 beschränkt sind. Insgesamt erhalten wir die Zerlegung:

$$R = A^{(n-1)} = F^{(n-1)} P^{(n-1)} \cdots F^{(1)} P^{(1)} A. \tag{3.2}$$

Die Pivot-Matrizen kommutieren nicht mit A oder den $F^{(i)}$. Daher ist ein Übergang zur LR-Zerlegung nicht ohne weiteres möglich. Wir definieren:

$$\tilde{F}^{(i)} := P^{(n-1)} \cdots P^{(i+1)} F^{(i)} P^{(i+1)} \cdots P^{(n-1)}.$$

Die Matrix $\tilde{F}^{(i)}$ entsteht durch mehrfache Zeilen- und Spaltenvertauschung von $F^{(i)}$. Dabei werden nur Zeilen und Spalten $j > i$ vertauscht. Die Matrix $\tilde{F}^{(i)}$ hat die gleiche Besetzungsstruktur wie $F^{(i)}$ und insbesondere nur Einsen auf der Diagonale. D.h, sie ist wieder eine Frobeniusmatrix und Satz 3.8 gilt weiter. Es sind lediglich die Einträge in der i-ten Spalte unterhalb der Diagonale permutiert. Für die Inverse gilt entsprechend

$$\tilde{L}^{(i)} := [\tilde{F}^{(i)}]^{-1} = P^{(n-1)} \cdots P^{(i+1)} L^{(i)} P^{(i+1)} \cdots P^{(n-1)}.$$

Die gleichzeitige Vertauschung von Zeilen und Spalten lässt die Diagonalelemente unverändert. Die Matrix $\tilde{L}^{(i)}$ ist wieder eine Frobeniusmatrix, es werden nur die Elemente der Spalte $l_{ij}, i > j$ permutiert. Wir formen (3.2) durch geschicktes Einfügen von Permutationsmatrizen um:

$$R = \tilde{F}^{(n-1)} \tilde{F}^{(n-2)} \ldots \tilde{F}^{(1)} \underbrace{P^{(n-1)} \ldots P^{(1)}}_{=:P} A$$

Diesen Prozess mache man sich anhand eines einfachen Beispiels klar:

$$\begin{aligned}
R &= F^{(3)} P^{(3)} F^{(2)} P^{(2)} F^{(1)} P^{(1)} A \\
&= F^{(3)} P^{(3)} F^{(2)} \underbrace{P^{(3)} P^{(3)}}_{=I} P^{(2)} F^{(1)} \underbrace{P^{(2)} P^{(3)} P^{(3)} P^{(2)}}_{=I} P^{(1)} A \\
&= \underbrace{F^{(3)}}_{=\tilde{F}^{(3)}} \underbrace{P^{(3)} F^{(2)} P^{(3)}}_{=\tilde{F}^{(2)}} \underbrace{P^{(3)} P^{(2)} F^{(1)} P^{(2)} P^{(3)}}_{=\tilde{F}^{(1)}} \underbrace{P^{(3)} P^{(2)} P^{(1)}}_{=P} A
\end{aligned}$$

Mit $\tilde{L}^{(i)} = [\tilde{F}^{(i)}]^{-1}$ gilt dann:

$$\underbrace{\tilde{L}^{(1)} \cdots \tilde{L}^{(n-1)}}_{=:\tilde{L}} R = PA.$$

Da $\tilde{L}^{(i)}$ wieder Frobeniusmatrizen sind, gilt weiter mit Satz 3.8:

$$\begin{aligned}
\tilde{L} &= \tilde{L}^{(1)} \cdots \tilde{L}^{(n-1)} \\
&= \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{L}^{(i)} - (n-2)I \\
&= P^{(n-1)} \Big(L^{(n-1)} + P^{(n-1)} \Big(L^{(n-2)} + \cdots + P^{(2)} F^{(1)} P^{(2)} \Big) \ldots P^{(n-2)} \Big) P^{(n-1)} - (n-2)I.
\end{aligned}$$

Beim Erstellen der LR-Zerlegung müssen also nicht nur die $A^{(i)}$ sondern auch die bisher berechneten $L^{(i)}$ permutiert werden.

Wir fassen zusammen:

Satz 3.14 (LR-Zerlegung mit Pivotisierung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Es existiert eine LR-Zerlegung*

$$PA = LR,$$

wobei P ein Produkt von Pivot-Matrizen ist, L eine untere Dreiecksmatrix mit Diagonaleinträgen eins und R eine rechte obere Dreiecksmatrix. Die LR-Zerlegung ohne Pivotisierung $P = I$ ist eindeutig, falls sie existiert.

Beweis: Übung. □

Die Pivotisierung dient einerseits dazu, die Durchführbarkeit der LR-Zerlegung sicherzustellen. Auf der anderen Seite kann durch geeignete Pivotisierung die Stabilität der Gauß-Elimination verbessert werden. Durch Wahl eines Pivot-Elements a_{ki} mit maximaler relativer Größe (bezogen auf die Zeile) kann die Gefahr der Auslöschung verringert werden.

Beispiel 3.15 (LR-Zerlegung ohne Pivotierung)**.** *Es sei:*

$$A = \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ 1.4 & 1.1 & -0.7 \\ 0.8 & 4.3 & 2.1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1.2 \\ -2.1 \\ 0.6 \end{pmatrix},$$

und die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ ist gegeben durch (Angabe mit fünfstelliger Genauigkeit):

$$x \approx \begin{pmatrix} 0.34995 \\ -0.98023 \\ 2.1595 \end{pmatrix}.$$

Für die Matrix A gilt $\operatorname{cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty \, \|A^{-1}\|_\infty \approx 7.2 \cdot 1.2 \approx 8.7$. Die Aufgabe ist also gut konditioniert, ein Verstärkungsfaktor von 7.2 lässt eine Verstärkung des Fehlers um etwa eine Stelle erwarten. Wir erstellen zunächst die LR-Zerlegung (dreistellige Rechnung). Dabei schreiben wir die Einträge von L fettgedruckt in die Ergebnismatrix:

$$F^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1.4}{2.3} & 1 & 0 \\ -\frac{0.8}{2.3} & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.609 & 1 & 0 \\ -0.348 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad [L^{(1)}, A^{(1)}] \approx \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ \mathbf{0.609} & 0.0038 & -1.31 \\ \mathbf{0.348} & 3.67 & 1.75 \end{pmatrix}$$

Im zweiten Schritt gilt:

$$F^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{3.67}{0.0038} & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -966 & 1 \end{pmatrix}, \quad [L^{(2)}L^{(1)}, A^{(2)}] \approx \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ \mathbf{0.609} & 0.0038 & -1.31 \\ \mathbf{0.348} & \mathbf{966} & 1270 \end{pmatrix}$$

Die LR-Zerlegung ergibt sich als:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.609 & 1 & 0 \\ 0.348 & 966 & 1 \end{pmatrix}, \quad R := \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ 0 & 0.0038 & -1.31 \\ 0 & 0 & 1270 \end{pmatrix}$$

Wir lösen das Gleichungssystem nun durch Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen:

$$A\tilde{x} = L \underbrace{R\tilde{x}}_{=y} = b.$$

Zunächst gilt:

$$y_1 = 1.2, \; y_2 = -2.1 - 0.609 \cdot 1.2 \approx -2.83, \; y_3 = 0.6 - 0.348 \cdot 1.2 + 966 \cdot 2.83 \approx 2730.$$

Und schließlich:

$$\tilde{x}_3 = \frac{2730}{1270} \approx 2.15,\ \tilde{x}_2 = \frac{-2.83 + 1.31 \cdot 2.15}{0.0038} \approx -3.55,\ \tilde{x}_1 = \frac{1.2 + 1.8 \cdot 3.55 - 1 \cdot 2.15}{2.3} \approx 2.37.$$

Für die Lösung $\tilde{x}$ gilt:

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 2.37 \\ -3.55 \\ 2.15 \end{pmatrix}, \quad \frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \approx 1.4,$$

d.h. einen relativen Fehler von 140 *Prozent, obwohl wir nur Rundungsfehler und noch keine gestörte Eingabe betrachtet haben.*

Dieses Negativbeispiel zeigt die Bedeutung der Pivotisierung. Im zweiten Schritt wurde als Pivot-Element mit 0.0038 ein Wert Nahe bei 0 gewählt. Hierdurch entstehen Werte von sehr unterschiedlicher Größenordnung in den Matrizen L und R. Dies wirkt sich ungünstig auf die weitere Stabilität aus.

Beispiel 3.16 (LR-Zerlegung mit Pivotisierung)**.** *Wir setzen das Beispiel in Schritt 2 fort und suchen zunächst das Pivot-Element:*

$$[L^{(1)}, A^{(1)}] = \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ \mathbf{0.609} & 0.0038 & -1.31 \\ \mathbf{0.348} & \boxed{3.67} & 1.75 \end{pmatrix}, \quad P^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Also, pivotisiert:

$$[\tilde{L}^{(1)}, \tilde{A}^{(1)}] = \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ \mathbf{0.348} & 3.67 & 1.75 \\ \mathbf{0.609} & 0.0038 & -1.31 \end{pmatrix}.$$

Weiter folgt nun:

$$F^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{0.0038}{3.67} & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -0.00104 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[L^{(2)}\tilde{L}^{(1)}, \tilde{A}^{(2)}] \approx \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ \mathbf{0.348} & 3.67 & 1.75 \\ \mathbf{0.609} & \mathbf{0.00104} & -1.31 \end{pmatrix}$$

Wir erhalten die Zerlegung:

$$\tilde{L}R = PA, \quad \tilde{L} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.348 & 1 & 0 \\ 0.609 & 0.00104 & 1 \end{pmatrix}, \quad R := \begin{pmatrix} 2.3 & 1.8 & 1.0 \\ 0 & 3.67 & 1.75 \\ 0 & 0 & -1.31 \end{pmatrix}, \quad P := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Das Lineare Gleichungssystem lösen wir in der Form:

$$PAx = \tilde{L}\underbrace{Rx}_{=y} = Pb.$$

Zunächst gilt für die rechte Seite: $\tilde{b} = Pb = (1.2, 0.6, -2.1)^T$ *und Vorwärtseinsetzen in* $\tilde{L}y = \tilde{b}$ *ergibt*

$$y_1 = 1.2, \quad y_2 = 0.6 - 0.348 \cdot 1.2 \approx 0.182, \quad y_3 = -2.1 - 0.609 \cdot 1.2 - 0.00104 \cdot 0.182 \approx -2.83.$$

Als Näherung $\tilde{x}$ *erhalten wir:*

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.350 \\ -0.980 \\ 2.160 \end{pmatrix}$$

mit einem relativen Fehler

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \approx 0.0002,$$

also von nur 0.02% *statt* 140%.

Die Beispiele zeigen, dass die berechnete LR-Zerlegung in praktischer Anwendung natürlich keine echte Zerlegung, sondern aufgrund von Rundungsfehlern nur eine Näherung der Matrix $A \approx LR$ ist. Man kann durch Berechnung von LR leicht die Probe machen und den Fehler $A - LR$ bestimmen.

Die LR-Zerlegung ist eines der wichtigsten direkten Verfahren zum Lösen von linearen Gleichungssystemen. Der Aufwand zur Berechnung der LR-Zerlegung steigt allerdings mit dritter Ordnung sehr schnell. Selbst auf modernen Computern übersteigt die Laufzeit für große Gleichungssysteme schnell eine sinnvolle Grenze:

n	Operationen ($\approx \frac{1}{3}n^3$)	Zeit
100	300 000	30 μs
1 000	$300 \cdot 10^6$	30 ms
10 000	$300 \cdot 10^9$	30 s
100 000	$300 \cdot 10^{12}$	10 h
1 000 000	$300 \cdot 10^{15}$	1 Jahr

Tabelle 3.1.: Rechenzeit zum Erstellen der LR-Zerlegung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ auf einem Rechner mit 10 GigaFLOPS.

Bei der Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen treten Gleichungssysteme mit $n = 10^6 \sim 10^9$ auf. Die Matrizen verfügen dann aber über Struktureigenschaften wie Symmetrie, oder über ein besonders dünnes Besetzungsmuster (in jeder Zeile sind nur einige wenige Einträge ungleich Null). Die linearen Gleichungsysteme, die bei der Finite-Elemente Diskretisierung der Laplace-Gleichung (beschreibt die Ausdehnung einer Membran) entstehen haben z.B. unabhänging von n nur 5 Einträge pro Zeile. Die so entstehenden linearen Gleichungsysteme lassen sich bei effizienter Implementierung der LR-Zerlegung auch bei $n = 1\,000\,000$ in weniger als einer Minute lösen.

3.3. LR-Zerlegung für diagonaldominante Matrizen

Satz 3.14 besagt, dass die LR-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen mit Pivotierung möglich ist. Es gibt allerdings auch viele Matrizen, bei denen die LR-Zerlegung ohne Pivotisierung stabil durchführbar ist. Beispiele hierfür sind positiv definite oder *diagonaldominante Matrizen*:

Definition 3.17 (Diagonaldominanz). *Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt* diagonaldominant, *falls*

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j\neq i} |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Eine diagonaldominante Matrix hat das betragsmäßig größte Element auf der Diagonalen, bei regulären Matrizen sind die Diagonalelemente zudem ungleich Null.

Satz 3.18 (LR-Zerlegung diagonaldominanter Matrizen). *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre, diagonaldominante Matrix. Dann ist die LR-Zerlegung ohne Pivotierung durchführbar und alle auftretenden Pivot-Elemente $a_{ii}^{(i-1)}$ sind von Null verschieden.*

Beweis: Wir führen den Beweis über Induktion und zeigen, dass alle Untermatrizen $A_{kl>i}^{(i)}$ wieder diagonaldominant sind. Für eine diagonaldominante Matrix gilt

$$|a_{11}| \geq \sum_{j>1} |a_{1j}| \geq 0,$$

und da A regulär ist auch zwingend $|a_{11}| > 0$. Der erste Schritt der LR-Zerlegung ist durchführbar.

Es sei nun A eine reguläre Matrix, wir wollen zeigen, dass die Matrix $\tilde{A}$ nach einem Eliminationsschritt eine diagonaldominante Untermatrix $\tilde{A}_{ij>1}$ hat. Für deren Einträge $\tilde{a}_{ij}$ gilt:

$$\tilde{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{i1}a_{1j}}{a_{11}}, \quad i,j = 2, \dots, n.$$

Also gilt für die Untermatrix:

$$\begin{aligned} i = 2,\dots,n: \quad \sum_{j=2,\, j\neq i}^{n} |\tilde{a}_{ij}| &\leq \underbrace{\sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} |a_{ij}|}_{\leq |a_{ii}|} - |a_{i1}| + \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|} \underbrace{\sum_{j=2}^{n} |a_{1j}|}_{\leq |a_{11}|} - \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|}|a_{1i}| \\ &\leq |a_{ii}| - \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|}|a_{1i}| \leq |a_{ii} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1i}| = |\tilde{a}_{ii}|. \end{aligned}$$

Die resultierende Matrix ist wieder diagonaldominant. □

Die Definition der Diagonaldominanz scheint zunächst willkürlich. Es zeigt sich aber, dass viele Matrizen, die in Anwendungen, zum Beispiel bei der Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen auftreten, diese Eigenschaft erfüllen. Zudem ist die Diagonaldominanz einer Matrix sehr einfach zu überprüfen und daher ein gutes Kriterium um die Notwendigkeit der Pivotierung abzuschätzen.

3.4. Die Cholesky-Zerlegung für positiv definite Matrizen

Eine wichtige Klasse von Matrizen sind die positiv definiten Matrizen, siehe Definition 2.12 sowie Satz 2.13. Es zeigt sich, dass für symmetrisch positiv definite Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische Zerlegung $A = \tilde{L}\tilde{L}^T$ in eine untere Dreiecksmatrix $\tilde{L}$ erstellt werden kann. Diese ist immer ohne Pivotisierung durchführbar und wird *Cholesky-Zerlegung* genannt. Der Aufwand zum Erstellen der Cholesky-Zerlegung ist erwartungsgemäß nur halb so groß wie der Aufwand zum Erstellen der LR-Zerlegung.

Satz 3.19 (LR-Zerlegung einer positiv definiten Matrix)**.** *Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sei symmetrisch, positiv definit. Dann existiert eine eindeutige LR-Zerlegung ohne Pivotierung.*

Beweis: Wir gehen ähnlich vor wie bei diagonaldominanten Matrizen und führen den Beweis per Induktion. Dazu sei A eine positiv definite, symmetrische Matrix. Ein Schritt der LR-Zerlegung ist durchführbar, da laut Satz 2.13 gilt $a_{11} > 0$. Wir zeigen, dass die Teilmatrix $\tilde{A}_{ij>1}$ nach einem Eliminationsschritt wieder symmetrisch positiv definit ist. Es gilt aufgrund der Symmetrie von A:

$$\tilde{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{1j}a_{i1}}{a_{11}} = a_{ji} - \frac{a_{1i}a_{j1}}{a_{11}} = \tilde{a}_{ji},$$

d.h., $\tilde{A}_{ij>1}$ ist symmetrisch.

Nun sei $x \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor $x = (x_1, \tilde{x}) \in \mathbb{R}^n$ mit $\tilde{x} = (x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n-1}$ beliebig. Den Eintrag x_1 werden wir im Laufe des Beweises spezifizieren. Es gilt wegen der positiven Definitheit von A:

$$\begin{aligned}
0 < (Ax, x) &= \sum_{ij} a_{ij}x_ix_j = a_{11}x_1^2 + 2x_1\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j + \sum_{i,j=2}^n a_{ij}x_ix_j \\
&= a_{11}x_1^2 + 2x_1\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j + \sum_{i,j=2}^n \underbrace{\left(a_{ij} - \frac{a_{1j}a_{i1}}{a_{11}}\right)}_{=\tilde{a}_{ij}} x_ix_j + \sum_{i,j=2}^n \frac{a_{1j}a_{i1}}{a_{11}}x_ix_j \\
&= a_{11}\left(x_1^2 + 2x_1\frac{1}{a_{11}}\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j + \frac{1}{a_{11}^2}\sum_{i,j=2}^n a_{1j}a_{i1}x_ix_j\right) + \sum_{i,j=2}^n \tilde{a}_{ij}x_ix_j \\
&= a_{11}\left(x_1 + \frac{1}{a_{11}}\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j\right)^2 + (\tilde{A}_{i,j>1}\tilde{x}, \tilde{x}).
\end{aligned}$$

Die positive Definitheit von $\tilde{A}_{ij>1}$ folgt somit bei der Wahl

$$x_1 = -\frac{1}{a_{11}}\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j.$$

□

Für eine symmetrisch positiv definite Matrix A ist die LR-Zerlegung immer ohne Pivotisierung durchführbar. Dabei treten nur positive Pivot-Elemente $a_{ii}^{(i-1)}$ auf. Das heißt, die Matrix R hat nur positive Diagonalelemente $r_{ii} > 0$. Es sei $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ die Diagonalmatrix mit $d_{ii} = r_{ii} > 0$. Dann gilt:

$$A = LR = LD\tilde{R},$$

mit einer rechten oberen Dreiecksmatrix $\tilde{R}$, welche nur Einsen auf der Diagonalen hat. Da A symmetrisch ist folgt:

$$A = LR = LD\tilde{R} = \tilde{R}^T DL^T = A^T.$$

Aufgrund der Eindeutigkeit der LR-Zerlegung gilt $L = \tilde{R}^T$ und $R = DL^T$. Da D nur positive Diagonaleinträge hat existiert die Matrix $\sqrt{D}$ und wir schreiben:

$$A = LR = \underbrace{LD^{\frac{1}{2}}}_{=:\tilde{L}}\underbrace{D^{-\frac{1}{2}}R}_{=\tilde{L}^T}.$$

Wir fassen zusammen:

Satz 3.20 (Cholesky-Zerlegung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrisch, positiv definite Matrix. Dann existiert die Cholesky-Zerlegung:*

$$A = \tilde{L}\tilde{L}^T,$$

in eine untere linke Dreiecksmatrix $\tilde{L}$. Sie kann ohne Pivotierung in

$$\frac{n^3}{6} + O(n^2)$$

arithmetische Operationen durchgeführt werden.

Anstelle eines Beweises geben wir einen effizienten Algorithmus zur direkten Berechnung der Cholesky-Zerlegung an. Hier kann der notwendige Aufwand leicht aus Koeffizientenvergleich bei $A = L^T L$ abgelesen werden:

Algorithmus 3.21 (Direkte Berechnung der Cholesky-Zerlegung)**.** *Gegeben sei eine symmetrisch, positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Dann sind die Einträge l_{ij}, $j \le i$ der Cholesky-Zerlegung bestimmt durch die Vorschrift:*

$$j = 1, \dots, n: \quad \begin{aligned} &(i) \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \qquad \textit{bzw. } l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2} \\ &(ii) \quad l_{ij} = l_{jj}^{-1}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}\right), \quad i = j+1, \dots, n. \end{aligned}$$

Der Algorithmus kann iterativ aus der Beziehung $\tilde{L}\tilde{L}^T = A$ hergeleitet werden. Es gilt:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} l_{jk}.$$

Wir gehen Spaltenweise $j = 1, 2, \dots$ vor. Das heißt, L sei für alle Spalten bis $j-1$ bekannt. Dann gilt in Spalte j zunächst für das Diagonalelement:

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2 \quad \Rightarrow \quad l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}.$$

Ist das j-te Diagonalelement l_{jj} bekannt, so gilt für $i > j$:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} l_{jk} \quad \Rightarrow \quad l_{ij} l_{jj} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \quad \Rightarrow \quad l_{ij} = l_{jj}^{-1} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right).$$

3.5. Dünn besetzte Matrizen und Bandmatrizen

Der Aufwand zum Erstellen der LR-Zerlegung wächst sehr schnell mit der Größe der Matrix an. In vielen Anwendungsproblemen treten *dünn besetzte Matrizen* auf:

Definition 3.22 (Dünn besetzte Matrix)**.** *Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt* dünn besetzt, *falls die Matrix A nur $O(n)$ von Null verschiedene Einträge besitzt. Das* Besetzungsmuster *(Sparsity Pattern) $B \subset \{1, \dots, n\}^2$ von A ist die Menge aller Indexpaare (i, j) mit $a_{ij} \neq 0$.*

Andere, weniger strenge Definitionen von dünn besetzten Matrizen verlangen, dass die Matrix $O(n \log(n))$ oder auch $O(n\sqrt{n})$ beziehungsweise einfach $o(n^2)$ von Null verschiedene Einträge besitzt.

Ein Beispiel für dünn besetzte Matrizen sind *Tridiagonalmatrizen* der Form

$$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad a_{ij} = 0 \quad \forall |i-j| > 1.$$

Für Tridiagonalmatrizen kann die LR-Zerlegung sehr effizient durchgeführt werden:

Satz 3.23 (Thomas-Algorithmus)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Tridiagonalmatrix. Die LR-Zerlegung ist wieder eine Tridiagonalmatrix und kann in $O(n)$ Operationen durchgeführt werden.*

Beweis: Übung. □

Eine Verallgemeinerung von Tridiagonalsystemen sind die Bandmatrizen:

Definition 3.24 (Bandmatrix)**.** *Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt* Bandmatrix *mit* Bandbreite $m \in \mathbb{N}$*, falls:*

$$a_{ij} = 0 \quad \forall |i-j| > m.$$

Eine Bandmatrix hat höchstens $n(2m+1)$ von Null verschiedene Einträge.

Es zeigt sich, dass die LR-Zerlegung einer Bandmatrix wieder eine Bandmatrix ist und daher effizient durchgeführt werden kann.

Satz 3.25 (LR-Zerlegung einer Bandmatrix)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Bandmatrix mit Bandbreite m. Die LR-Zerlegung (ohne Permutierung):*

$$LR = A,$$

ist wieder eine Bandmatrix, d.h.:

$$L_{ij} = R_{ij} = 0 \quad \forall |i-j| > m,$$

und kann in

$$O(nm^2)$$

Operationen durchgeführt werden.

Beweis: Wir zeigen induktiv, dass die entstehenden Eliminationsmatrizen $\tilde{A}_{ij>1}$ wieder Bandmatrizen sind. Es gilt:

$$\tilde{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{1j}a_{i1}}{a_{11}}, \quad i,j = 2,\dots,n.$$

Es sei nun $|i-j| > m$. Dann ist $a_{ij} = 0$. Ebenso müssen $a_{1j} = a_{i1} = 0$ sein, da $1 \le i,j$.

Zur Aufwandsberechnung vergleiche den Beweis zu Satz 3.9. Im Fall einer Bandmatrix müssen in Schritt i der Elimination nicht mehr $(n-i)^2$ arithmetische Operationen sondern höchstens m^2 arithmetische Operationen durchgeführt werden. Ebenso müssen nur m Elemente der Frobeniusmatrix zur Reduktion bestimmt werden. Insgesamt ergibt sich:

$$\sum_{i=1}^{n}(m+m^2) = nm^2 + O(nm).$$

□

Der Unterschied, eine LR-Zerlegung für eine voll besetzte Matrix und eine Bandmatrix durchzuführen ist enorm. Zur Diskretisierung der Laplace-Gleichung mit Finiten Differenzen müssen lineare Gleichungssysteme mit der sogenannten Modellmatrix gelöst werden:

$$A = \begin{pmatrix} A_m & -I_m & 0 & \cdots & 0 \\ -I_m & A_m & -I_m & & \vdots \\ 0 & -I_m & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -I_m \\ 0 & \cdots & 0 & -I_m & A_m \end{pmatrix}, \quad A_m = \left.\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & & \vdots \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}\right\} m,$$

Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (für eine Quadratzahl n) hat Bandbreite $m = \sqrt{n}$. In Tabelle 3.2 geben wir die notwendigen Rechenzeiten zum Erstellen der LR-Zerlegung auf aktueller Hardware an. Man vergleiche mit Tabelle 3.1.

n	Operationen	Zeit	Zeit (voll besetzt)
100	10^5	1 μs	30 μs
1 000	10^6	100 μs	30 ms
10 000	10^8	10 ms	30 s
100 000	10^{10}	1 s	10 h
1 000 000	10^{12}	2 min	1 Jahr

Tabelle 3.2.: Rechenzeit zum Erstellen der LR-Zerlegung einer Bandmatrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit Bandbreite $m = \sqrt{n}$ auf einem Rechner mit 10 GigaFLOPS. Zum Vergleich die Zeiten für eine vollbesetzte Matrix, siehe Tabelle 3.1

Die Modellmatrix ist eine Bandmatrix mit Bandbreite $m = \sqrt{n}$, hat aber in jeder Zeile neben dem Diagonalelement höchsten 4 von Null verschiedene Einträge $a_{i,i\pm 1}$ und $a_{i,i\pm m}$. Bei so dünn besetzten Matrizen stellt sich die Frage, ob die LR-Zerlegung, also die Matrizen L und R das gleiche dünne Besetzungsmuster haben. Es zeigt sich jedoch, dass die LR-Zerlegung einer dünn besetzten Bandmatrix im Allgemeinen selbst eine dicht besetzte Bandmatrix ist. Aus der dünnen Besetzungsstruktur kann kein Nutzen gezogen werden.

Der Aufwand zur Berechnung der LR-Zerlegung einer dünn besetzten Matrix hängt wesentlich von der Sortierung, also der Pivotierung, der Matrix ab. Wir betrachten hierzu ein einfaches Beispiel:

Beispiel 3.26 (LR-Zerlegung dünn besetzter Matrix)**.** *Wir betrachten die beiden Matrizen:*

$$A_1 := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Die beiden Matrizen gehen durch simultane Vertauschen der ersten und vierten, sowie zweiten und dritten Zeile und Spalte auseinander hervor. Die LR-Zerlegung der Matrix A_1 (ohne Permutierung) lautet:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ 4 & \frac{8}{3} & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad R_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & -3 & -6 & -8 \\ 0 & 0 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} \end{pmatrix},$$

und für die Matrix A_2 erhalten wie (wieder ohne Pivotierung):

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad R_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -28 \end{pmatrix}.$$

Obwohl beide Matrizen bis auf Zeilen und Spaltentausch das gleiche lineare Gleichungssystem beschreiben, haben die LR-Zerlegungen ein gänzlich unterschiedliches Besetzungsmuster: die LR-Zerlegung von Matrix A_1 ist voll besetzt, während die LR-Zerlegung zu Matrix A_2 mit dem gleichen dünnen Besetzungsmuster auskommt wie die Matrix A_2 selbst.

Dieses Beispiel lässt sich auf die entsprechende $n \times n$-Matrix verallgemeinern. In Fall 1 sind n^2 Einträge zum Speichern der LR-Zerlegung notwendig, in Fall 2 nur $3n$. Für $n \gg 1\,000$ ist dieser Unterschied entscheidend.

Dünn besetzte Matrizen treten in der Anwendung oft auf, etwa bei der Diskretisierung von Differentialgleichungen, aber auch bei der Berechnung von kubischen Splines. Damit die LR-Zerlegung aus der dünnen Besetzungsstruktur Nutzen ziehen kann, muss die Matrix entsprechend permutiert (man sagt hier sortiert) sein. Werden Nulleinträge in A in der LR-Zerlegung überschrieben, so spricht man von *fill-in*. Die aktuelle Forschung zur Weiterentwicklung der LR-Zerlegung befasst sich weniger mit der Berechnung der LR-Zerlegung selbst, als mit effizienten Sortierverfahren zur Reduktion der *fill-ins*. Wir wissen, dass die LR-Zerlegung einer Bandmatrix mit Bandbreite m wieder eine (voll besetzte) Bandmatrix mit Bandbreite m ist und in $O(nm^2)$ Operationen durchgeführt werden kann. Eine Idee zur Sortierung der Matrix A besteht nun darin, die Einträge so anzuordnen, dass die sortierte Matrix eine Bandmatrix mit möglichst dünner Bandbreite ist.

Ein bekanntes Verfahren ist der *Cuthill-McKee-Algorithmus*. Dieser erstellt eine Sortierung $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$ der n Indizes, so dass miteinander verbundene Indizes nahe beieinander stehen. Zur Herleitung des Verfahrens benötigen wir einige Begriffe. Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine dünn besetzte Matrix mit Besetzungsmuster $(i,j) \in B = \{1,\dots,n\}^2$. Dabei gehen wir der Einfachheit davon aus, dass B symmetrisch ist. Aus $(i,j) \in B$ folgt $(j,i) \in B$. Zu einem Index $i \in \{1,\dots,n\}$ sei $\mathcal{N}(i)$ die Anzahl aller mit i verbundenen Indizes:

$$\mathcal{N}(i) := \{j \in \{1,\dots n\} :\ (i,j) \in B\},$$

Und für eine beliebige Menge $N \subset \{1,\dots,n\}$ bezeichnen wir mit $\#N$ die Menge der Elemente in N, d.h. mit $\#\mathcal{N}(i)$ die Anzahl der Nachbarn von i.

Der Algorithmus füllt schrittweise eine Indexliste $I = (i_1, i_2, \dots)$ bis alle Indizes $1,\dots,n$ einsortiert sind. Wir starten mit dem Index $I = (i_1)$, welcher die geringste Zahl von Nachbarn $\#\mathcal{N}(i_1) \le \#\mathcal{N}(j), \forall j$ besitzt. Im Anschluss fügen wir die Nachbarn $j \in \mathcal{N}(i_1)$ von i_1 hinzu, in der Reihenfolge der jeweiligen Zahl von Nachbarn. Auf diese Weise hangelt sich der Algorithmus von Nachbar zu Nachbar und arbeitet die Besetzungsstruktur der Matrix ab bis alle Indizes zur Liste hinzugefügt wurden.

Bei der genauen Definition des Algorithmus sind noch einige Sonderfälle zu betrachten, so dass der Algorithmus auch wirklich terminiert und alle Indizes findet:

Algorithmus 3.27 (Cuthill-McKee)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine dünn besetzte Matrix mit symmetrischem Besetzungsmuster $B \in (i,j)$. Starte mit leerer Indexmenge $I = (\cdot)$ und iteriere für $k = 1, \dots, n$:*

(0) Stopp, falls die Indexmenge I bereits n Elemente besitzt.

(1) Falls die Indexmenge I nur $k-1$ Elemente besitzt, bestimme Indexelement i_k als (noch nicht verwendeter) Index, d.h. $i_k \notin I$ mit minimaler Nachbarzahl:

$$i_k = \arg \min_{j \in \{1,\dots,n\}\setminus I} \#\mathcal{N}(j),$$

und füge i_k zu I hinzu.

(2) Erstelle Liste aller Nachbarn von i_k, welche noch nicht in I enthalten sind:

$$N_k := \mathcal{N}(i_k) \setminus I.$$

Falls $N_k = \emptyset$, Neustart mit $k+1$.

(3) Sortiere Liste N_k aufsteigend nach Anzahl von Nachbarn:

$$N_k = \{s_1^k, s_2^k, \dots\}, \quad \#\mathcal{N}(s_i^k) \le \#\mathcal{N}(s_{i+1}^k).$$

Füge Indizes $\{s_1^k, s_2^k, \dots\}$ in dieser Reihenfolge zu Liste I hinzu.

Wir betrachten zur Veranschaulichung ein Beispiel:

Beispiel 3.28 (Cuthill-McKee)**.** *Es sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{8\times 8}$ mit folgendem Besetzungsmuster gegeben:*

$$A := \begin{pmatrix} * & * & & & & & & * \\ * & * & & & * & * & & * \\ & & * & & * & & * & * \\ & & & * & & & & \\ & * & * & & * & & * & \\ & * & & & & * & & \\ & & * & & * & & * & \\ * & * & * & & & & & * \end{pmatrix}$$

Index	*$N(i)$*	*$\#N(i)$*
1	*1,2,8*	*3*
2	*1,2,5,6,8*	*5*
3	*3,5,7,8*	*4*
4	*4*	*1*
5	*2,3,5,7*	*4*
6	*2,6*	*2*
7	*3,5,7*	*3*
8	*1,2,3,8*	*4*

Schritt $k=1$: (1) Die Indexliste I ist leer. Der Index 4 hat nur einen Nachbarn (sich selbst), d.h.

$$i_1 = 4, \quad I = (4).$$

(2) Für den Index 4 gilt $N_1 = \mathcal{N}(4) \setminus I = \emptyset$, d.h. weiter mit $k = 2$.

Schritt $k=2$: (1) Die Indexliste hat nur $k-1 = 1$ Element. Von den verbliebenden Indizes hat Index 6 die minimale Zahl von zwei Nachbarn, d.h.

$$i_2 = 6, \quad I = (4, 6).$$

(2) Es gilt $N_2 = \mathcal{N}(6) \setminus I = \{2,6\} \setminus \{4,6\} = \{2\}$.

(3) Ein einzelnes Element ist natürlich sortiert, d.h.

$$i_3 = 2, \quad I = (4,6,2)$$

Schritt $k = 3$*: (1) Diese Schritt greift nicht, da* I *bereits 3 Elemente besitzt, es ist* $i_3 = 2$.

(2) Es gilt $N_3 = \mathcal{N}(2) \setminus I = \{1,2,5,6,8\} \setminus \{4,6,2\} = \{1,5,8\}$.

(3) Es gilt $\#N(1) = 3$, $\#N(5) = 4$ *und* $\#N(8) = 4$, *d.h. wir fügen sortiert hinzu:*

$$i_4 = 1,\ i_5 = 5,\ i_6 = 8, \quad I = (4,6,2,1,5,8).$$

Schritt $k = 4$*: (1)* I *hat mehr als* 3 *Elemente.*

(2) $i_4 = 1$. *Es ist* $N_4 = \mathcal{N}(1) \setminus I = \{1,2,8\} \setminus \{4,6,2,1,5,8\} = \emptyset$. *Daher weiter mit* $k = 5$

Schritt $k = 5$*: (1)* I *hat genug Elemente.*

(2) $i_5 = 5$. *Es ist* $N_5 = \mathcal{N}(5) \setminus I = \{2,3,5,7\} \setminus \{4,6,2,1,5,8\} = \{3,7\}$

(3) Es gilt $\#\mathcal{N}(3) = 4$ *und* $\#\mathcal{N}(7) = 3$, *d.h. Index* 7 *wird zuerst angefügt*

$$i_7 = 7,\ i_8 = 3, \quad I = (4,6,2,1,5,8,7,3).$$

Schritt $k = 6$*: (0) Stopp, da* $\#I = 8$.

Wir erhalten mit $I_0 = (1,2,3,4,5,6,7,8)$, $(I_0)_j :\mapsto I_j$ *die Sortierung:*

$$1 \to 4,\ 2 \to 6,\ 3 \to 2,\ 4 \to 1,\ 5 \to 5,\ 6 \to 8,\ 7 \to 7,\ 8 \to 3.$$

Wir erstellen die sortiere Matrix $\tilde{A}$ *gemäß* $\tilde{a}_{kj} = a_{i_k i_j}$*:*

$$A := \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccc} 4 & 6 & 2 & 1 & 5 & 8 & 3 & 7 \end{array} \\ \begin{pmatrix} * & & & & & & & \\ & * & * & & & & & \\ & * & * & * & * & * & & \\ & & * & * & & * & & \\ & & * & & * & & * & * \\ & & * & * & & * & & * \\ & & & & * & & * & * \\ & & & & * & * & * & * \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \\ 4 \\ 6 \\ 2 \\ 1 \\ 5 \\ 8 \\ 7 \\ 3 \end{array}$$

Die so sortierte Matrix ist eine Bandmatrix mit Bandbreite $m = 3$.

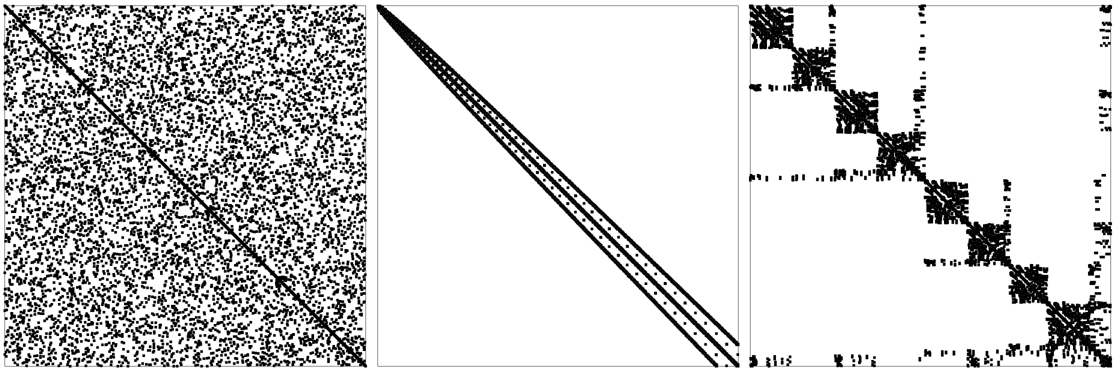


Abbildung 3.1.: Besetzungsstruktur einer dünn besetzten Matrix $A \in \mathbb{R}^{1089\times 1089}$ mit insgesamt 9 409 von Null verschiedenen Einträgen. Links: vor Sortierung, Mitte: Cuthill-McKee Algorithmus und rechts: nach Sortierung mit einem Multi-Fronten-Verfahren aus [5].

Die meisten Verfahren basieren auf Methoden der Graphentheorie. Der Cuthill-McKee Algorithmus sucht eine Permutierung des Besetzungsmusters, so dass eng benachbarte Indizes auch in der Reihenfolge nahe beieinander stehen. Andere Methoden versuchen den durch das Besetzungsmuster aufgespannten Graphen möglichst in Teilgraphen zu zerlegen. Diese Teilgraphen entsprechen Blöcken in der Matrix A. Die anschließende LR-Zerlegung erzeugt dann voll besetzte, dafür kleine Blöcke. Die einzelnen Blöcke sind nur schwach gekoppelt. Ein Vorteil dieser Sortierung ist die Möglichkeit, effiziente Parallelisierungsverfahren für die einzelnen Blöcke zu verwenden.

In Abbildung 3.1 zeigen wir die Besetzungsstruktur einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{1\,089\times 1\,089}$ vor und nach entsprechender Sortierung. Die Matrix hat eine symmetrische Besetzungsstruktur und 9 409 Einträge ungleich Null (das sind weniger als 1% aller Einträge). Die LR-Zerlegung der unsortierten Matrix ist nahezu voll belegt mit etwa 1 000 000 Einträgen und deren Berechnung erfordert etwa $400 \cdot 10^6$ Operationen. Der Cuthill-McKee Algorithmus erzeugt eine Bandmatrix mit sehr dünner Bandbreite $m \approx 70$. Zur Speicherung der LR-Zerlegung sind etwa 150 000 Einträge notwendig und die Berechnung erfordert etwa $5 \cdot 10^6$ Operationen, also nur $\frac{1}{80}$ des Aufwands. Schließlich zeigen wir zum Vergleich die Sortierung mit einem sogenannten *Multi-Fronten-Verfahren*. Hier wird die Matrix in einzelne Blöcke geteilt. Zur Berechnung der LR-Zerlegung sind hier $3 \cdot 10^6$ Operationen notwendig ($\frac{1}{133}$ des Aufwands). Details hierzu finden sich in [5].

3.6. Nachiteration

Die numerisch durchgeführte LR-Zerlegung stellt aufgrund von Rundungsfehlern nur eine Näherung dar $A \approx LR$ und die so approximierte Lösung $LR\tilde{x} = b$ ist mit einem Fehler $x - \tilde{x}$ behaftet. Es stellt sich nun die Frage nach einer auswertbaren Abschätzung für diesen

Fehler, also eine Auswertung, die ohne die echte, aber unbekannte Lösung x auskommt. Ein erster Anhaltspunkt wird durch den *Defekt* gegeben, siehe auch Definition 7.19:

Definition 3.29 (Defekt (LGS)). *Es sei $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ die Näherung zur Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$. Die Größe*

$$d(\tilde{x}) := b - A\tilde{x},$$

bezeichnet den Defekt.

Für die exakte Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$ gilt $d(x) = 0$. Je genauer unsere Lösung ist, umso kleiner ist der Defekt. Für allgemeine Approximationen erhalten wir die folgende *a posteriori* Fehlerabschätzung:

Satz 3.30 (Fehlerabschätzung für lineare Gleichungssysteme). *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix und $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ die Approximation zur Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$. Dann gilt:*

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \le \operatorname{cond}(A)\frac{\|d(\tilde{x})\|}{\|b\|}.$$

Beweis: Es gilt:

$$x - \tilde{x} = A^{-1}(b - A\tilde{x}) = A^{-1}d(\tilde{x}) \quad \Rightarrow \quad \|x - \tilde{x}\| \le \|A^{-1}\|\,\|d(\tilde{x})\|.$$

Teilen durch $\|b\| = \|Ax\| \le \|A\|\,\|x\|$ liefert das gewünschte Ergebnis

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \le \|A\|\,\|A^{-1}\|\,\frac{\|d(\tilde{x})\|}{\|b\|}.$$

□

Zur Veranschaulichung betrachten wir die Beispiele 3.15 und 3.16 mit:

$$x \approx \begin{pmatrix} 0.34995 \\ -0.98023 \\ 2.1595 \end{pmatrix}, \quad \tilde{x}_1 = \begin{pmatrix} 2.37 \\ -3.55 \\ 2.15 \end{pmatrix}, \quad \tilde{x}_2 = \begin{pmatrix} 0.35 \\ -0.98 \\ 2.16 \end{pmatrix}$$

mit den relativen Fehlern

$$\frac{\|x - \tilde{x}_1\|_2}{\|x\|_2} \approx 1.4, \quad \frac{\|x - \tilde{x}_2\|_2}{\|x\|_2} \approx 0.00023,$$

sowie Defekten:

$$\frac{\|d(x_1)\|_2}{\|b\|_2} \approx 3.8, \quad \frac{\|d(x_2)\|_2}{\|b\|_2} \approx 0.0009.$$

Der Spektralkondition der Matrix A ist $\operatorname{cond}_2(A) \approx 6$, d.h., es ergeben sich die Fehlerschranken:

$$\frac{\|x - \tilde{x}_1\|_2}{\|x\|_2} \le 6 \cdot 3.8 \approx 23, \quad \frac{\|x - \tilde{x}_2\|_2}{\|x\|_2} \le 6 \cdot 0.0009 \approx 0.005.$$

In beiden Fällen wir der Fehler um einen Faktor $10 \sim 20$ überschätzt. Zur praktischen Auswertung dieser Fehlerabschätzung wird die Konditionszahl der Matrix A benötigt. Diese ist im Allgemeinen jedoch nicht verfügbar, da A^{-1} weder bekannt, noch einfach zu berechnen ist.

Neben seiner Rolle zur Fehlerabschätzung kommt dem Defekt eine weitere wichtige Bedeutung zu. Wir gehen davon aus, dass wir den Defekt $d(\tilde{x})$ ohne Rundungsfehler berechnen können. Weiter nehmen wir an, dass wir auch die *Defekt-Gleichung*

$$Aw = d(\tilde{x}) = b - A\tilde{x},$$

exakt nach $w \in \mathbb{R}^n$ lösen können. Dann gilt für $\tilde{x} + w$:

$$\tilde{x} + w = \tilde{x} + A^{-1}(b - A\tilde{x}) = \tilde{x} + x - \tilde{x} = x.$$

Dieser Vorgang wird *Defektkorrektur* oder *Nachiteration* genannt. Die Annahme, dass Defekt und Defektgleichung ohne Rundungsfehler gelöst werden können ist natürlich nicht realistisch (dann könnte ja auch das Original-System exakt gelöst werden). Dennoch erhalten wir als Grundlage der Nachiteration das folgende Ergebnis:

Satz 3.31 (Nachiteration)**.** *Es sei ε (klein genug) die Fehlertoleranz. Durch $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ sei eine Approximation zu $Ax = b$ gegeben. Weiter sei $\tilde{d}$ eine Approximation zu $d(\tilde{x})$ mit doppelter Genauigkeit, d.h.*

$$\frac{\|d(\tilde{x}) - \tilde{d}\|}{\|d(\tilde{x})\|} \le \mathrm{cond}(A)\varepsilon^2. \tag{3.3}$$

Es sei $\tilde{w}$ eine Approximation der Defektgleichung $Aw = \tilde{d}$ mit einfacher Genauigkeit, d.h.

$$\frac{\|w - \tilde{w}\|}{\|w\|} \le \mathrm{cond}(A)\varepsilon. \tag{3.4}$$

Dann gilt für die Korrektur $\tilde{x} + \tilde{w}$ die Abschätzung

$$\frac{\|x - (\tilde{x} + \tilde{w})\|}{\|x\|} \le \varepsilon c(A) \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|},$$

mit einer Konstante $c(A)$, die von der Konditionszahl $\mathrm{cond}(A)$ *abhängt.*

Beweis: Wir definieren zunächst eine Hilfsgröße: Es sei $\hat{w}$ die exakte Lösung der exakten Defektgleichung $A\hat{w} = d(\tilde{x})$:

$$A\hat{w} = b - A\tilde{x} \quad \Rightarrow \quad \hat{w} = A^{-1}b - A^{-1}A\tilde{x} = x - \tilde{x}. \tag{3.5}$$

Für den Fehler $\hat{w} - w$ zwischen den exakten Lösungen von $A\hat{w} = d(\tilde{x})$ und $Aw = \tilde{d}$ gilt laut Störungssatz 3.5:

$$\frac{\|\hat{w} - w\|}{\|\hat{w}\|} \le \mathrm{cond}(A) \underbrace{\frac{\|d(\tilde{x}) - \tilde{d}\|}{\|d(\tilde{x})\|}}_{(3.3)} \le \varepsilon^2 \,\mathrm{cond}(A)^2 \tag{3.6}$$

Jetzt folgt durch Einschieben von $\pm\hat{w}$ sowie $\pm w$ in den Fehler $\|x - (\tilde{x} + \tilde{w})\|$:

$$\begin{aligned}
\|x - (\tilde{x} + \tilde{w})\| &\le \underbrace{\|x - (\tilde{x} + \hat{w})\|}_{=0 \text{ wegen (3.5)}} + \underbrace{\|\hat{w} - w\|}_{(3.6)} + \underbrace{\|w - \tilde{w}\|}_{(3.4)} \\
&\le \varepsilon^2 \operatorname{cond}(A)^2 \|\hat{w}\| + \varepsilon \operatorname{cond}(A) \|w\| \\
&\le \varepsilon \operatorname{cond}(A) \big(\varepsilon \operatorname{cond}(A) \|\hat{w}\| + \|\hat{w}\| + \underbrace{\|w - \hat{w}\|}_{(3.6)} \big) \\
&\le \varepsilon \operatorname{cond}(A) \big(1 + \varepsilon \operatorname{cond}(A) + \varepsilon^2 \operatorname{cond}(A)^2 \big) \|\hat{w}\| \\
&\le \varepsilon c(A) \|x - \tilde{x}\|,
\end{aligned}$$

mit $c(A) := \operatorname{cond}(A)(1 + \varepsilon \operatorname{cond}(A) + \varepsilon^2 \operatorname{cond}(A)^2)$. Das Ergebnis folgt mit Teilen durch $\|x\|$. □

Durch einen Nachiterationsschritt kann der Fehler um den Faktor $\varepsilon c(A)$ reduziert werden. Die Konstante $c(A)$ hängt dabei allerdings sehr ungünstig von der oft sehr großen Konditionszahl der Matrix ab. Die Nachiteration ist ein universelles Prinzip und nicht auf die LR-Zerlegung beschränkt. Dennoch definieren wir für diese:

Algorithmus 3.32 (Nachiteration)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix und $b \in \mathbb{R}^n$. Zur Lösung von $Ax = b$:*

1. *Erstelle LR-Zerlegung von A mit einfacher Genauigkeit*
$$LR = PA.$$
2. *Setze $d^{(1)} = b$ sowie $x^{(1)} = 0$ und iteriere für $i = 1, 2, \dots$:*
$$\begin{aligned}
&(i) && Ly^{(i)} = Pd^{(i)} && \textit{mit einfacher Genauigkeit} \\
&(ii) && Rw^{(i)} = y^{(i)} && \textit{mit einfacher Genauigkeit} \\
&(iii) && x^{(i+1)} = x^{(i)} + w^{(i)} && \textit{mit doppelter Genauigkeit} \\
&(iv) && d^{(i+1)} = b - Ax^{(i+1)} && \textit{mit doppelter Genauigkeit}
\end{aligned}$$

Der Vorteil der Nachiteration liegt in der mehrfachen Verwendung der erstellten LR-Zerlegung. Zur Berechnung der LR-Zerlegung sind $O(n^3)$ Operationen notwendig, während zum Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen, sowie zur Berechnung des Defektes nur $O(n^2)$ Operationen benötigt werden. D.h., selbst bei Verwenden höherer Genauigkeit ist der Aufwand in Schritt *2.(iii)* des Verfahrens klein im Vergleich zu Schritt *1.*

Die Annahme, dass zum Erstellen der LR-Zerlegung mit geringerer Genauigkeit gerechnet wird, als zur Defektberechnung ist nicht unrealistisch. Der Speichertyp `float` von einfacher Genauigkeit benötigt zur Speicherung einer Zahl nur den halben Speicher verglichen mit `double`. Gerade bei sehr großen Matrizen $n \gg 1\,000\,000$ spielt der Speicherbedarf eine wesentliche Rolle. Darüber hinaus unterscheidet moderne Hardware (z.B. GPU's) zwischen der Rechnung mit doppelter und einfacher Genauigkeit, deren Operationen oft weit schneller durchgeführt werden können.

Beispiel 3.33 (Nachiteration)**.** *Wir führen Beispiel 3.16 fort und rechnen bei einfacher Genauigkeit auf drei Stellen genau und bei doppelter Genauigkeit auf sechs Stellen genau. Zur Approximation $\tilde{x}_2$ berechnen wir den Defekt $d(\tilde{x}_2)$ mit doppelter Genauigkeit (hier sogar exakt):*

$$\tilde{x}_2 = \begin{pmatrix} 0.35 \\ -0.98 \\ 2.16 \end{pmatrix}, \quad d(\tilde{x}_2) = b - A\tilde{x}_2 = \begin{pmatrix} -0.001 \\ 0 \\ -0.002 \end{pmatrix}.$$

Mit dreistelliger (also hier einfacher) Genauigkeit lösen wir zunächst $L\tilde{y}_2 = Pd(\tilde{x}_2)$ mit $Pd(\tilde{x}_2) = (-0.001, -0.002, 0)^T$ und erhalten:

$$\tilde{y}_2 = \begin{pmatrix} -0.001 \\ -0.00165 \\ 0.000611 \end{pmatrix}.$$

Rückwärtseinsetzen $R\tilde{w}_2 = \tilde{y}_2$ mit dreistelliger Genauigkeit ergibt:

$$\tilde{w}_2 = \begin{pmatrix} -0.0000542 \\ -0.000227 \\ -0.000466 \end{pmatrix}.$$

Wir berechnen die korrigierte Lösung $\hat{x}_2 := \tilde{x}_2 + \tilde{w}_2$ mit sechsstelliger (also doppelter) Genauigkeit zu:

$$\hat{x}_2 = \begin{pmatrix} 0.349946 \\ -0.980227 \\ 2.15953 \end{pmatrix}.$$

Diese verbesserte Lösung ist mit dem relativen Fehler

$$\frac{\|\hat{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \approx 0.0000137 \cdot 10^{-5}$$

versehen. Der Fehler konnte durch einen Nachiterationsschritt um zwei Größenordnungen verbessert werden!

Mit der gestörten LR-Zerlegung $\tilde{L}\tilde{R} \approx A$ lässt sich ein Nachiterationsschritt kompakt schreiben als:

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + Cd(\tilde{x}^{(i)}), \quad C := \tilde{R}^{-1}\tilde{L}^{-1}.$$

Dabei ist die Matrix C eine Approximation zur Inversen von A. Es stellt sich die Frage, ob die Nachiteration auch dann ein konvergentes Verfahren bildet, wenn $\tilde{C}$ eine noch gröbere Approximation der Inversen $\tilde{C} \approx A^{-1}$ ist. Dabei könnte man an Approximationen denken, die auf der einen Seite weiter von A^{-1} entfernt sind, dafür aber wesentlich einfacher, z.B. in $O(n^2)$ Operationen zu erstellen sind. Dieser Ansatz ist Ausgangspunkt von allgemeinen *Defektkorrektur-Verfahren*, wie wir sie in Kapitel 8 untersuchen werden.

4. Orthogonalisierungsverfahren und die QR-Zerlegung

Die Zerlegung einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ in die beiden Dreiecksmatrizen L und R basiert auf der Elimination mit Frobeniusmatrizen, d.h. $R = FA$, mit $L := F^{-1}$. Es gilt:

$$\mathrm{cond}(R) = \mathrm{cond}(FA) \leq \mathrm{cond}(F)\,\mathrm{cond}(A) = \|F\|\,\|L\|\ \mathrm{cond}(A).$$

Bei entsprechender Pivotisierung gilt für alle Einträge der Matrizen F $|f_{ij}| \leq 1$, sowie für die Einträge von L $|l_{ij}| \leq 1$, siehe Satz 3.14. Dennoch können die Normen von L und F im Allgemeinen nicht günstiger als $\|F\|_\infty \leq n$ und $\|L\|_\infty \leq n$ abgeschätzt werden. Es gilt dann die pessimistische Abschätzung

$$\mathrm{cond}_\infty(R) \leq n^2\,\mathrm{cond}_\infty(A).$$

Die Matrix R, welche zur Rückwärtselimination gelöst werden muss, hat eine unter Umständen weit schlechtere Konditionierung als die Matrix A selbst (welche auch schon sehr schlecht konditioniert sein kann).

4.1. Die QR-Zerlegung

Wir suchen im Folgenden zu einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ einen Zerlegungsprozess $A = QR$ in eine Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$, welcher numerisch stabil ist, indem die Zerlegung nur mit Hilfe von Matrizen durchgeführt wird, welche gut konditioniert sind. Hier bieten sich orthogonale Matrizen an:

Definition 4.1 (Orthogonale Matrix). *Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt* orthogonal*, falls ihre Zeilen und Spaltenvektoren eine Orthonormalbasis des $\mathbb{R}^n$ bilden, d.h. es gilt $Q^TQ = I$.*

Orthogonale Matrizen haben die Spektralkondition $\mathrm{cond}_2(Q) = 1$, denn für alle Eigenwerte λ einer orthogonalen Matrix Q zu Eigenvektor ω gilt:

$$\|\omega\|_2^2 = (Q^TQ\omega, \omega)_2 = (Q\omega, Q\omega)_2 = (\lambda\omega, \lambda\omega)_2 = |\lambda|^2\|\omega\|_2^2 \quad \Rightarrow \quad |\lambda| = 1.$$

Gelingt es uns eine Zerlegung einer Matrix $A = QR$ mit Hilfe einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ zu erstellen, so gilt $\mathrm{cond}_2(R) \leq \mathrm{cond}_2(A)$, d.h. die Dreiecksmatrix R hat höchstens die Kondition der ursprünglichen Matrix A.

Wir fassen zunächst einige Eigenschaften orthogonaler Matrizen zusammen:

Satz 4.2 (Orthogonale Matrix)**.** *Es sei $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine orthogonale Matrix. Dann ist Q regulär und es gilt:*

$$Q^{-1} = Q^T, \quad Q^TQ = I, \quad \|Q\|_2 = 1, \quad \text{cond}_2(Q) = 1.$$

1. *Es gilt* $\det(Q) = 1$ *oder* $\det(Q) = -1$.
2. *Für zwei orthogonale Matrizen $Q_1, Q_2 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist auch das Produkt Q_1Q_2 eine orthogonale Matrix. Für eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gilt $\|QA\|_2 = \|A\|_2$.*
3. *Für beliebige Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$ gilt:*

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2, \quad (Qx, Qy)_2 = (x, y)_2.$$

Beweis: Wir beweisen hier nur die im Kontext der numerischen Stabilität wesentlich Eigenschaft, dass die Multiplikation mit orthogonalen Matrizen die Kondition einer Matrix (d.h. die 2-Norm) nicht verändert. Die weiteren Teile des Beweises belassen wir als Übung. Es gilt:

$$\|QAx\|_2^2 = (QAx, QAx)_2 = (Q^TQAx, Ax)_2 = (Ax, Ax)_2 = \|Ax\|_2^2.$$

Und es folgt

$$\|QA\|_2 = \sup_{x\neq 0} \frac{\|QAx\|_2}{\|x\|_2} = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \|A\|_2.$$

□

Wir definieren:

Definition 4.3 (QR-Zerlegung)**.** *Die Zerlegung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ in eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sowie eine rechte obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$, gemäß*

$$A = QR,$$

heißt QR-Zerlegung.

Die QR-Zerlegung hat den Vorteil, dass die Matrix $R = Q^TA$ höchstens die Konditionszahl der Matrix A selbst besitzt. Einmal erstellt, kann die QR-Zerlegung genutzt werden, um lineare Gleichungssysteme mit der Matrix A effizient zu lösen. Die Matrix Q ist zwar - im Gegensatz zur Matrix L der LR-Zerlegung - keine Dreiecksmatrix, ihre Inverse kann jedoch trivial angegeben werden:

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad Q^TAx = Q^Tb \quad \Leftrightarrow \quad Rx = Q^Tb.$$

Satz 4.4 (QR-Zerlegung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix. Dann existiert eine Zerlegung $A = QR$ in eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und eine rechte obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$.*

Beweis: Es seien $A = (a_1, \dots, a_n)$ die Spaltenvektoren der Matrix A. Da A regulär ist, sind die Vektoren a_i linear unabhängig und bilden eine Basis des $\mathbb{R}^n$. Jetzt sei $q_1, \dots, q_n \in \mathbb{R}^n$ eine Orthonormalsystem mit den Eigenschaften

$$(q_i, q_j)_2 = \delta_{ij} \quad \forall i, j, \quad (q_i, a_j)_2 = 0 \quad \forall i > j.$$

Ein solches System aus Vektoren kann mit dem Gram-Schmidt-Verfahren erzeugt werden. Wir kommen in Satz 4.6 hierauf zurück.

Die Matrix $Q = (q_1, \dots, q_n)$, bestehend aus den Spaltenvektoren q_i ist orthogonal und für die Einträge der Matrix $R = Q^T A$ gilt

$$R = (r_{ij})_{ij=1}^n, \quad r_{ij} = (q_i, a_j)_2 = 0 \quad \forall i > j. \tag{4.1}$$

Also ist R eine rechte obere Dreiecksmatrix. □

Eine QR-Zerlegung kann nicht eindeutig sein. Denn angenommen, durch

$$q_1, \dots, q_n,$$

sei das Orthonormalsystem aus Eigenvektoren gegeben, dann ist auch

$$q_1, \dots, q_{i-1}, -q_i, q_{i+1}, \dots, q_n,$$

ein Orthonormalsystem aus Eigenvektoren. Diese Wahl führt gemäß (4.1) zu $\tilde{r}_{ij} = -r_{ij}$ und eine zweite QR-Zerlegung von A ist gegeben.

Diese Überlegung führt unmittelbar zu einer einfachen Normierung der QR-Zerlegung. In jedem Schritt wird das Vorzeichen des Vektors q_i so gewählt, dass $r_{ii} = (q_i, a_i) > 0$, dass also die Matrix R nur positive Diagonalelemente besitzt. Dann gilt:

Satz 4.5 (Eindeutigkeit der QR-Zerlegung)**.** *Die QR-Zerlegung $A = QR$ einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit $r_{ii} > 0$ ist eindeutig.*

Beweis: Es seien $A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$ zwei QR-Zerlegungen zu A. Dann gilt:

$$Q := Q_2^T Q_1 = R_2 R_1^{-1}, \quad Q^T := Q_1^T Q_2 = R_1 R_2^{-1}. \tag{4.2}$$

Die Matrizen Q und Q^T sind beide rechte obere Dreiecksmatrizen, also muss Q eine Diagonalmatrix sein. Weiter gilt

$$Q^T Q = Q_1^T Q_2 Q_2^T Q_1 = R_1 R_2^{-1} R_2 R_1^{-1} = I,$$

d.h., Q ist orthogonal. Aus (4.2) folgt

$$QR_1 = R_2,$$

und für jeden Einheitsvektor e_i gilt

$$q_{ii} r_{ii}^{(1)} = e_i^T (QR_1) e_i = e_i^T (R_2) e_i = r_{ii}^{(2)} > 0. \tag{4.3}$$

Die Diagonalelemente $q_{ii} > 0$ sind positiv. Da die Diagonalelemente einer Diagonalmatrix gerade die Eigenwerte der Matrix sind folgt aus $|\lambda| = 1$ (da Q orthogonal), dass $\lambda = 1$ und somit $Q = I$.

Nun folgt $Q_1 = Q_2$ und somit ebenso $R_1 = R_2$. □

Der entscheidende Schritt zum Erstellen einer QR-Zerlegung ist die Orthogonalisierung eines Systems von n unabhängigen Vektoren $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$. Wir betrachten diese Teilaufgabe daher in separaten Abschnitten.

4.2. Das Gram-Schmidt Verfahren

Das klassische Orthogonalisierungsverfahren ist das Gram-Schmidt Verfahren:

Satz 4.6 (Gram-Schmidt Orthonormalisierungsverfahren)**.** *Es sei durch $\{a_1, \dots, a_n\}$ die Basis eines Vektorraums V gegeben, durch $(\cdot, \cdot)$ ein Skalarprodukt auf V mit induzierter Norm $\|\cdot\|$. Die Vorschrift:*

$$\begin{aligned} &(i) \quad q_1 := \frac{a_1}{\|a_1\|}, \\ &(ii) \quad i = 2, \dots, n: \quad \tilde{q}_i := a_i - \sum_{j=1}^{i-1} (a_i, q_j) q_j, \quad q_i := \frac{\tilde{q}_i}{\|\tilde{q}_i\|}, \end{aligned}$$

erzeugt eine Orthonormalbasis $\{q_1, \dots, q_n\}$ von V. Es gilt ferner:

$$(q_i, a_j) = 0 \quad \forall 1 \le j < i \le n.$$

Beweis: Wir führen den Beweis per Induktion. Für $i = 1$ ist $a_1 \neq 0$, da durch $a_1, \dots, a_n$ der ganze V aufgespannt wird. Für $i = 2$ gilt:

$$(\tilde{q}_2, q_1) = (a_2, q_1) - (a_2, q_1) \underbrace{(q_1, q_1)}_{=1} = 0.$$

Aus der linearen Unabhängigkeit von a_2 und q_1 folgt, dass $\tilde{q}_2 \neq 0$. Es sei nun also $(q_j, q_k) = \delta_{jk}$ für $k, j < i$. Dann gilt für $k < i$ beliebig

$$(\tilde{q}_i, q_k) = (a_i, q_k) - \sum_{j=1}^{i-1} (a_i, q_j) \underbrace{(q_j, q_k)}_{=\delta_{jk}} = (a_i, q_k) - (a_i, q_k) = 0.$$

Da $\operatorname{span}\{q_1, \dots, q_j\} = \operatorname{span}\{a_1, \dots, a_j\}$ folgt auch $(q_i, a_j) = 0$ für $j < i$. □

Das Gram-Schmidt Verfahren ist einfach aufgebaut und beruht jeweils auf Projektionen eines Vektors auf bereits orthogonale Anteile. Der Aufwand des Verfahrens steigt mit der Anzahl der Vektoren in der Basis. In Schritt n des Verfahrens ist die Berechnung von $n-1$ Skalarprodukten, von $n-1$ Vektoradditionen sowie eine Normberechnung notwendig. Im

Raum $V = \mathbb{R}^n$ beträgt die Anzahl der arithmetischen Operationen in Schritt n somit $O(n^2)$. Der Gesamtaufwand zur Orthogonalisierung von n Vektoren des $\mathbb{R}^n$ verhält sich wie $O(n^3)$.

Das grundlegende Problem des Gram-Schmidt Verfahrens ist seine Instabilität gegenüber Rundungsfehlern. Wir betrachten hierzu ein Beispiel.

Beispiel 4.7 (Gram-Schmidt)**.** *Im $\mathbb{R}^3$ betrachten wir die Basis*

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad a_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{5} \end{pmatrix},$$

dies sind gerade die Spaltenvektoren der Hilbert-Matrix. Wir gehen von dreistelliger Arithmetik aus

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.5 \\ 0.333 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.333 \\ 0.25 \end{pmatrix}, \quad a_3 = \begin{pmatrix} 0.333 \\ 0.25 \\ 0.2 \end{pmatrix}.$$

Schritt 1: *Hier genügt Normalisierung. Bei dreistelliger Arithmetik in allen Zwischenschritten gilt*

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|} \approx \begin{pmatrix} 0.857 \\ 0.428 \\ 0.285 \end{pmatrix}.$$

Schritt 2: *Bei Beachtung dreistelliger Arithmetik gilt*

$$\tilde{q}_2 = a_2 - (a_2, q_1)q_1 \approx a_2 - 0.642q_1 \approx \begin{pmatrix} -0.05 \\ 0.058 \\ 0.067 \end{pmatrix}.$$

Normierung ergibt

$$q_2 \approx \begin{pmatrix} -0.49 \\ 0.569 \\ 0.657 \end{pmatrix}.$$

Schritt 3: *Es gilt*

$$\tilde{q}_3 = a_3 - (a_3, q_1)q_1 - (a_3, q_2)q_2 \approx q3 - 0.449q_1 - 0.11q_2 \approx \begin{pmatrix} 0.00211 \\ -0.00476 \\ -0.000235 \end{pmatrix},$$

bzw. nach Normierung

$$q_3 = \begin{pmatrix} 0.405 \\ -0.914 \\ -0.0451 \end{pmatrix}.$$

Wir machen nun den Test und erhalten

$$(q_1, q_2, q_2)^T (q_1, q_2, q_3) \approx \begin{pmatrix} 1 & 0.01 & -0.057 \\ 0.01 & 1 & -0.75 \\ -0.057 & -0.75 & 1 \end{pmatrix} =: \tilde{I},$$

anstelle der Einheitsmatrix I. Es ergibt sich somit ein relativer Fehler von 75%.

Weiter betrachten wir nun beispielhaft die Erstellung einer QR-Zerlegung mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens:

Beispiel 4.8 (QR-Zerlegung mit Gram-Schmidt)**.** *Es sei das LGS $Ax = b$ mit*

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.01 & 0 & 0.01 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad b := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0.02 \end{pmatrix},$$

und exakter Lösung

$$x = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

gegeben. Wir bestimmen mit dem Gram-Schmidt Verfahren aus den Spaltenvektoren $A = (a_1, a_2, a_3)$ die entsprechende Orthonormalbasis. Bei dreistelliger Genauigkeit erhalten wir:

$$q_1 = \frac{q_1}{\|q_1\|} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.01 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Weiter:

$$\tilde{q}_2 = a_2 - (a_2, q_1)q_1 \approx a_2 - q_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.01 \\ 0.01 \end{pmatrix}, \quad q_2 = \frac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ -0.709 \\ 0.709 \end{pmatrix}.$$

Schließlich:

$$\tilde{q}_3 = a_3 - (a_3, q_1)q_1 - (a_3, q_2)q_2 \approx a_3 - q_1 - 0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.01 \end{pmatrix}, \quad q_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die QR-Zerlegung ergibt sich mit der "orthogonalen Matrix"

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.01 & -0.709 & 0 \\ 0 & 0.709 & 1 \end{pmatrix},$$

sowie der rechten oberen Dreiecksmatrix $\tilde{R}$ mit $\tilde{r}_{ij} = (q_i, a_j)$ für $j \geq i$:

$$\tilde{R} := \begin{pmatrix} (q_1, a_1) & (q_1, a_2) & (q_1, a_3) \\ 0 & (q_2, a_2) & (q_2, a_3) \\ 0 & 0 & (q_3, a_3) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0.00709 & 0 \\ 0 & 0 & 0.01 \end{pmatrix}.$$

Wir lösen mit Hilfe der QR-Zerlegung $\tilde{R}\tilde{x} = \tilde{Q}^T b$, also

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0.00709 & 0 \\ 0 & 0 & 0.01 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix} = \tilde{b} = \tilde{Q}^T b \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.0142 \\ 0.02 \end{pmatrix}$$

Es folgt

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} -3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

mit dem relativen Fehler von 140%

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \approx 1.41.$$

Bei der Lösung des Gleichungssystems mit dieser gestörten Matrix entsteht ein sehr großer Fehler. Dies liegt daran, dass die Matrix Q *nur eine sehr gestörte Orthogonalität aufzeigt:*

$$I \stackrel{!}{=} \tilde{Q}^T \tilde{Q} \approx \begin{pmatrix} 1 & -0.00709 & 0 \\ -0.00709 & 1.01 & 0.709 \\ 0 & 0.709 & 1 \end{pmatrix}, \quad \|\tilde{Q}^T \tilde{Q} - I\|_2 \approx 0.7.$$

Die QR-Zerlegung hat prinzipiell bessere Stabilitätseigenschaften als die LR-Zerlegung, da die Matrix R höchsten die Konditionszahl der Matrix A trägt. Diese Überlegung gilt jedoch nur dann, wenn Q und R fehlerfrei erzeugt werden können. Das einfache Gram-Schmidt-Verfahren eignet sich nicht, um die orthogonale Matrix Q zu erstellen. In den folgenden Abschnitten werden wir alternative Orthogonalisierungsverfahren vorstellen, die selbst auf der Anwendung gut konditionierter Operationen beruhen. Zunächst gehen wir noch kurz auf eine Variante des Gram-Schmidt-Verfahrens ein.

Die schlechte Stabilität des Gram-Schmidt Verfahrens kann in Analogie zum Horner-Schema der Polynomauswertung erklärt werden. Die schlechte Stabilität der Polynomauswertung in Monomdarstellung kommt von der Reihenfolge der Operationen: werden zunächst alle Monome erstellt und im Anschluss addiert, so folgen die Additionen spät im Verfahren. Das Horner-Schema wechselt stets zwischen Addition und Multiplikation. Eine entsprechende Modifikation des Gram-Schmidt Verfahrens ist ebenso möglich: der Orthogonalisierungsschritt

$$\tilde{q}_i := a_i - \sum_{j=1}^{i-1} (a_i, q_j) q_j,$$

wird durch eine iterative Vorschrift ersetzt:

$$\tilde{q}_i^0 := a_i, \quad k = 1, \dots, i-1 : \quad \tilde{q}_i^{(k)} = \tilde{q}_i^{(k-1)} - (\tilde{q}_i^{(k-1)}, q_k) q_k, \quad \tilde{q}_i := \tilde{q}_i^{(i-1)}.$$

Auf diese Weise werden neu entstehende Fehler stets bei der Projektion berücksichtigt. So ergibt sich:

Satz 4.9 (Modifiziertes Gram-Schmidt Orthonormalisierungsverfahren)**.** *Es sei durch* $\{a_1, \dots, a_n\}$ *eine Basis eines Vektorraums* V *gegeben, durch* $(\cdot, \cdot)$ *ein Skalarprodukt mit induzierter Norm* $\|\cdot\|$. *Die Vorschrift:*

$$\begin{aligned} & (i) \quad q_1 := \frac{a_1}{\|a_1\|}, \\ i = 2, \dots, n: \quad & (ii) \quad \tilde{q}_i^{(0)} := a_i \\ k = 1, \dots, i-1: \quad & \tilde{q}_i^{(k)} := \tilde{q}_i^{(k-1)} - (\tilde{q}_i^{(k-1)}, q_k) q_k \\ & q_i := \frac{\tilde{q}_i^{(i-1)}}{\|\tilde{q}_i^{(i-1)}\|}, \end{aligned}$$

erzeugt eine Orthonormalbasis $\{q_1, \dots, q_n\}$ *von* V. *Es gilt ferner:*

$$(q_i, a_j) = 0 \quad \forall 1 \le j < i \le n.$$

Der Beweis kann entsprechend zu Satz 4.6 durchgeführt werden.

Wir führen nun mit dieser Modifikation das obige Beispiel erneut durch.

Beispiel 4.10 (Modifiziertes Gram-Schmidt Verfahren)**.** Schritt 1 *liefert wie oben bei dreistelliger Arithmetik:*

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|} \approx \begin{pmatrix} 0.857 \\ 0.428 \\ 0.285 \end{pmatrix}.$$

Schritt 2 *erfolgt auch wie im Fall des üblichen Gram-Schmidt Verfahrens:*

$$\tilde{q}_2 = a_2 - (a_2, q_1) q_1 \approx a_2 - 0.642 q_1 \approx \begin{pmatrix} -0.05 \\ 0.058 \\ 0.067 \end{pmatrix}.$$

Normierung ergibt

$$q_2 \approx \begin{pmatrix} -0.49 \\ 0.569 \\ 0.657 \end{pmatrix}.$$

Schritt 3: *Zunächst ist* $\tilde{q}_3^{(0)} = a_3$. *Dann ist*

$$\tilde{q}_3^{(1)} = \tilde{q}_3^{(0)} - (\tilde{q}_3^{(0)}, q_1) q_1 \approx \tilde{q}_3^{(0)} - 0.449 q_1 \approx \begin{pmatrix} -0.0518 \\ 0.0578 \\ 0.072 \end{pmatrix},$$

und weiter

$$\tilde{q}_3^{(2)} = \tilde{q}_3^{(1)} - (\tilde{q}_3^{(1)}, q_2) q_2 \approx \tilde{q}_3^{(1)} - 0.106 q_2 \approx \begin{pmatrix} 0.00014 \\ -0.00251 \\ 0.00236 \end{pmatrix}$$

Schließlich liefert die Normierung

$$q_3 \approx \begin{pmatrix} 0.0406 \\ -0.728 \\ 0.684 \end{pmatrix}.$$

Der Test auf Orthonormalität ergibt

$$(q_1, q_2, q_3)^T (q_1, q_2, q_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0.01 & -0.08 \\ 0.01 & 1 & -0.015 \\ -0.08 & -0.015 & 1 \end{pmatrix} =: \tilde{I},$$

so dass der relative Fehler im Ergebnis auf 8% *reduziert werden kann.*

Entsprechend wiederholen wir die Zerlegung der QR-Zerlegung der Matrix A aus Beispiel 4.8, nun mit Hilfe des modifizierten Gram-Schmidt-Verfahrens:

Beispiel 4.11 (QR-Zerlegung mit modifiziertem Gram-Schmidt)**.** *Es sei wieder das LGS*

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.01 & 0 & 0.01 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad b := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0.02 \end{pmatrix},$$

mit Lösung

$$x = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

gegeben. Wir bestimmen mit dem modifizierten Gram-Schmidt Verfahren aus den Spaltenvektoren $A = (a_1, a_2, a_3)$ *die entsprechende Orthonormalbasis. Bei dreistelliger Genauigkeit erhalten wir:*

$$q_1 = \frac{q_1}{\|q_1\|} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.01 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Weiter:

$$\tilde{q}_2 = q_2 - (a_2, q_1) q_1 \approx a_2 - q_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.01 \\ 0.01 \end{pmatrix}, \quad q_2 = \frac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ -0.709 \\ 0.709 \end{pmatrix}.$$

Schließlich:

$$\tilde{q}_3^{(1)} = a_3 - (a_3, q_1) q_1 \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.01 \end{pmatrix}, \quad \tilde{q}_3^{(2)} = \tilde{q}_3^{(1)} - (\tilde{q}_3^{(1)}, q_2) q_2 \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 0.00503 \\ 0.00497 \end{pmatrix},$$

und also

$$q_3 := \frac{\tilde{q}_3^{(2)}}{\|\tilde{q}_3^{(2)}\|} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 0.709 \\ 0.701 \end{pmatrix}$$

Die QR-Zerlegung ergibt sich mit der "orthogonalen Matrix"

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.01 & -0.709 & 0.709 \\ 0 & 0.709 & 0.701 \end{pmatrix},$$

sowie der rechten oberen Dreiecksmatrix $\tilde{R}$ *mit* $\tilde{r}_{ij} = (q_i, a_j)$ *für* $j \geq i$*:*

$$\tilde{R} := \begin{pmatrix} (q_1,a_1) & (q_1,a_2) & (q_1,a_3) \\ 0 & (q_2,a_2) & (q_2,a_3) \\ 0 & 0 & (q_3,a_3) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0.00709 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0141 \end{pmatrix}.$$

Wir Lösen das System $\tilde{R} = \tilde{Q}^T b$*:*

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0.00709 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0141 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix} = \tilde{Q}^T b = \tilde{b} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.0142 \\ 0.014 \end{pmatrix}$$

mit der Lösung

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

einen relativen Fehler von 80%

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} = 0.82.$$

Für die Matrix Q *gilt hier:*

$$Q^T Q = \begin{pmatrix} 1 & -0.00709 & 0.00709 \\ -0.00709 & 1.01 & -0.006 \\ 0.00709 & -0.006 & 0.994 \end{pmatrix}, \quad \|Q^T Q - I\|_2 \approx 0.017.$$

Obwohl die Matrix Q *eine sehr gute Orthogonalitätseigenschaft hat, eignet sich die Zerlegung* $A = QR$ *nicht zum Lösen des linearen Gleichungssystems* $Ax = b$*. Dies liegt hier an dem großen Fehler in der Matrix* $\tilde{R}$*. Die Matrix* Q *hat zwar – in sich – gute Orthogonalität, nicht jedoch in Bezug auf die Spaltenvektoren von* A*.*

4.3. Householder-Transformationen

Das geometrische Prinzip hinter dem Gram-Schmidt Verfahren ist die Projektion der Vektoren a_i auf die bereits erstellte Orthogonalbasis $q_1, \dots, q_{i-1}$. Diese Projektion ist schlecht konditioniert, falls a_i fast parallel zu den q_j mit $j < i$, etwa $a_i \approx q_j$ ist. Dann droht Auslöschung. Wir können einen Schritt des Gram-Schmidt Verfahrens kompakt mit Hilfe eines Matrix-Vektor Produktes schreiben (komponentenweise nachrechnen!)

$$\tilde{q}_i = [I - G^{(i)}]a_i, \quad G^{(i)} = \sum_{l=1}^{i-1} q_l q_l^T,$$

mit dem *dyadischen Produkt* zweier Vektoren $vv^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Die Matrix $[I - G^{(i)}]$ ist eine Projektion auf $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, denn:

$$[I - G^{(i)}]^2 = I - 2\sum_{l=1}^{i-1} q_l q_l^T + \sum_{k,l=1}^{i-1} q_l \underbrace{q_l^T q_k}_{=\delta_{lk}} q_k^T = [I - G^{(i)}].$$

Weiter gilt:

$$[I - G^{(i)}]q_k = q_k - \sum_{l=1}^{i-1} q_l \underbrace{q_l^T q_k}_{=\delta_{lk}} = 0, \quad k < i.$$

Die Matrix $I - G^{(i)}$ ist also nicht regulär. Falls in Schritt i der Vektor a_i fast parallel zu den bereits orthogonalen Vektoren ist, also $\tilde{a}_i \in \delta a_i + \operatorname{span}\{q_1, \dots, q_{i-1}\}$, so gilt

$$\tilde{q}_i = [I - G^{(i)}]\tilde{a}_i = [I - G^{(i)}]\delta a_i \quad \Rightarrow \quad \frac{\|\delta q_i\|}{\|\tilde{q}_i\|} = \frac{\|\delta q_i\|}{\|[I - G^i]\delta a_i\|}.$$

Bei $\delta a_i \to 0$ ist eine beliebig große Fehlerverstärkung möglich. Man vergleiche Bemerkung 3.2 zur Konditionierung der Matrix-Vektor Multiplikation (bei regulärer Matrix).

Im Folgenden suchen wir eine Transformation von A zu einer Dreiecksmatrix R, die selbst auf orthogonalen Operationen aufbaut. Eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit $\det(Q) = 1$ stellt eine Drehung dar und bei $\det(Q) = -1$ eine Spiegelung (oder eine Drehspiegelung). Die Householder-Transformationen nutzen das Prinzip der Spiegelung, um eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ in eine rechte obere Dreiecksmatrix zu transformieren.

Definition 4.12 (Householder-Transformation)**.** *Für einen Vektor $v \in \mathbb{R}^n$ mit $\|v\|_2 = 1$ ist durch vv^T das* dyadische Produkt *definiert und die Matrix*

$$S := I - 2vv^T \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

heißt Householder-Transformation*.*

Es gilt:

Satz 4.13 (Householder-Transformation)**.** *Jede Householder-Transformation $S = I - 2vv^T$ mit $\|v\|_2 = 1$ ist symmetrisch und orthogonal. Das Produkt zweier Householder-Transformationen $S_1 S_2$ ist wieder eine orthogonale Matrix.*

Beweis: *(i)* Es gilt Symmetrie:

$$S^T = [I - 2vv^T]^T = I - 2(vv^T)^T = I - 2vv^T = S.$$

Weiter gilt:

$$S^T S = I - 4vv^T + 4v \underbrace{v^T v}_{=1} v^T = I,$$

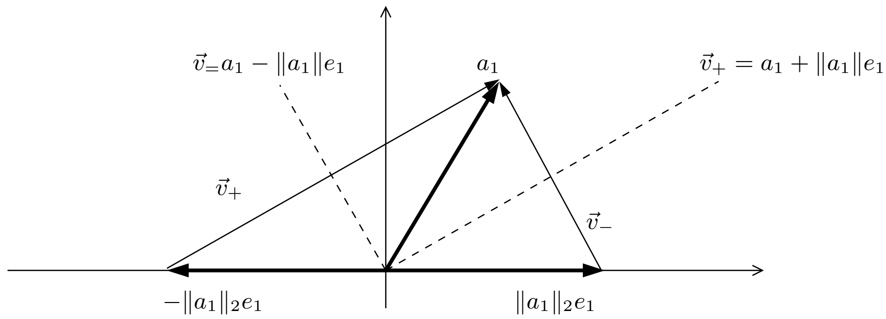


Abbildung 4.1.: Spiegelungsachsen (gestrichelt) und Normalen zur Spiegelung v_+ und v_- zur Spiegelung von a_1 auf $\operatorname{span}\{e_1\}$.

d.h. $S^{-1} = S^T$ und S ist orthogonal.

(ii) Mit zwei symmetrischen orthogonalen Matrizen S_1 sowie S_2 gilt:

$$(S_1 S_2)^T = S_2^T S_1^T = S_2^{-1} S_1^{-1} = (S_1 S_2)^{-1},$$

so dass das Produkt $S_1 S_2$ eine orthogonale Matrix ist. Wir haben hierfür nur die Orthogonalität von S_1 und S_2 genutzt. □

Wir schließen die grundlegende Untersuchung der Householder-Transformationen mit einer geometrischen Charakterisierung ab:

Bemerkung 4.14 (Householder-Transformation als Spiegelung)**.** *Es sei $v \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger normierter Vektor mit $\|v\|_2 = 1$. Weiter sei $x \in \mathbb{R}^n$ gegeben mit $x = \alpha v + w^\perp$, wobei $w^\perp \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor mit $v^T w^\perp = 0$ im orthogonalen Komplement zu v ist. Dann gilt für die Householder-Transformation $S := I - 2vv^T$:*

$$S(\alpha v + w^\perp) = [I - 2vv^T](\alpha v + w^\perp) = \alpha(v - 2v \underbrace{v^T v}_{=1}) + w^\perp - 2v \underbrace{v^T w^\perp}_{=0} = -\alpha v + w^\perp.$$

D.h., die Householder-Transformation beschreibt eine Spiegelung an der auf v senkrecht stehenden Ebene.

Mit Hilfe der Householder-Transformationen soll eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nun Schritt für Schritt in eine rechte obere Dreiecksmatrix transformiert werden:

$$A^{(0)} := A, \quad A^{(i)} = S^{(i)} A^{(i-1)}, \quad S^{(i)} = I - 2v^{(i)} (v^{(i)})^T,$$

mit $R := A^{(n-1)}$. Wir beschreiben den ersten Schritt des Verfahrens: Die reguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ soll durch Multiplikation mit einer orthogonalen Householder-Transformation so transformiert werden, dass

$$A^{(1)} := S^{(1)} A, \quad (A^{(1)})_{ij} = a_{ij}^{(1)},$$

dass $a_{i1}^{(1)} = 0$ für alle $i > 1$ gilt (d.h. für die Elemente unterhalb der ersten Diagonale).

Hierzu schreiben wir die Matrix $A = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ mit ihren Spaltenvektoren. Dann ist $A^{(1)} = (a_1^{(1)}, \dots, a_n^{(1)})$ mit $a_i^{(1)} := S^{(1)} a_i$. Wir suchen die Householder-Transformation $S^{(1)}$, so dass gilt:

$$e_1 \stackrel{!}{=} a_1^{(1)} = S^{(1)} a_1.$$

Hierzu müssen wir auf der Ebene senkrecht zu $a_1 \pm \|a_1\| e_1$ spiegeln, siehe Abbildung 4.1. Zur Bestimmung des Spiegelungs-Vektor haben wir durch die Wahl des Vorzeichens zwei Möglichkeiten. Aus Stabilitätsgrunden wählen wir

$$v^{(1)} := \frac{a_1 + \operatorname{sign}(a_{11}) \|a_1\| e_1}{\|a_1 + \operatorname{sign}(a_{11}) \|a_1\| e_1\|}, \tag{4.4}$$

um durch optimale Wahl des Vorzeichens die Gefahr von Auslöschung zu vermeiden. Mit dieser Wahl gilt:

$$a_i^{(1)} = S^{(1)} a_i = a_i - 2(v^{(1)}, a_i) v^{(1)}, \quad i = 2, \dots, n, \quad a_1^{(1)} = -\operatorname{sign}(a_{11}) \|a_1\| e_1. \tag{4.5}$$

Die resultierende Matrix $\tilde{A}^{(1)}$ ist wieder regulär und es gilt $\tilde{a}_1^{(1)} \in \operatorname{span}(e_1)$:

$$A := \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & & \vdots \\ a_{31} & a_{32} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \to \quad A^{(1)} := S^{(1)} A = \left(\begin{array}{c|cccc} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ \hline 0 & a_{22}^{(1)} & \ddots & & \vdots \\ 0 & a_{32}^{(1)} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{array}\right).$$

Wir setzen das Verfahren mit der Teilmatrix $A_{kl>1}^{(1)}$ fort. Hierzu sei der verkürzte zweite Spaltenvektor definiert als $\tilde{a}^{(1)} = (a_{22}^{(1)}, a_{32}^{(1)}, \dots, a_{n2}^{(1)})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$. Dann wählen wir:

$$\mathbb{R}^{n-1} \ni \tilde{v}^{(2)} := \frac{\tilde{a}^{(1)} + \operatorname{sign}(a_{22}^{(1)}) \|\tilde{a}^{(1)}\| e_1}{\|\tilde{a}^{(1)} + \operatorname{sign}(a_{22}^{(1)}) \|\tilde{a}^{(1)}\| e_1\|}, \quad S^{(2)} = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \quad \cdots \quad \cdots \quad 0 \\ \hline 0 & \\ 0 & I - 2\tilde{v}^{(2)} (v^{(2)})^T \\ \vdots & \\ 0 & \end{array}\right) \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Multiplikation mit $S^{(2)}$ von links, also $A^{(2)} := S^{(2)} A^{(1)}$ lässt die erste Zeile unverändert. Eliminiert wird der Block $A_{kl>1}^{(1)}$. Für die resultierende Matrix $A^{(2)}$ gilt $a_{kl}^{(2)} = 0$ für $l = 1, 2$ und $k > l$. Nach $n - 1$ Schritten gilt:

$$R := \underbrace{S^{(n-1)} S^{(n-2)} \cdots S^{(1)}}_{=:Q^T} A.$$

Alle Transformationen sind orthogonal, somit ist auch $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine orthogonale (und natürlich reguläre) Matrix (siehe Satz 4.2).

Wir fassen zusammen:

Satz 4.15 (QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix. Dann lässt sich die QR-Zerlegung von A nach Householder in*

$$\frac{2n^3}{3} + O(n^2)$$

arithmetischen Operationen numerisch stabil durchführen.

Beweis: Die Durchführbarkeit der QR-Zerlegung geht aus dem Konstruktionsprinzip hervor. Aus der Regularität der Matrizen $A^{(i)}$ folgt, dass der Teilvektor $\tilde{a}^{(i)} \in \mathbb{R}^{n-i}$ ungleich Null sein muss. Dann ist $\tilde{v}^{(i)}$ gemäß (4.4) wohl definiert. Die folgende Elimination wird mit (4.5) spaltenweise durchgeführt:

$$\tilde{a}_k^{(i+1)} = \underbrace{[I - 2\tilde{v}^{(i)}(\tilde{v}^{(i)})^T]}_{=\tilde{S}^{(i)}}\tilde{a}_k^{(i)} = \tilde{a}_k^{(i)} - 2(\tilde{v}^{(i)}, \tilde{a}_k^{(i)})\tilde{v}^{(i)}.$$

Die numerische Stabilität folgt aus $\mathrm{cond}_2(S^{(i)}) = 1$, siehe Bemerkung 3.2.

Wir kommen nun zur Abschätzung des Aufwands. Im Schritt $A^{(i)} \to A^{(i+1)}$ muss zunächst der Vektor $\tilde{v}^{(i)} \in \mathbb{R}^{n-i}$ berechnet werden. Hierzu sind $2(n-i)+2$ arithmetische Operationen notwendig. Im Anschluss erfolgt die spaltenweise Elimination. (Es wird natürlich nicht die Matrix $S^{(i)}$ aufgestellt und die Matrix-Matrix Multiplikation durchgeführt!) Für jeden der $n-i$ Spaltenvektoren ist ein Skalarprodukt $(\tilde{v}^{(i)}, \tilde{a}^{(i)})$ (das sind $n-i$ arithmetische Operationen) sowie eine Vektoraddition und die Multiplikation von $(\tilde{v}^{(i)}, \tilde{a}^{(i)})$ mit $\tilde{v}^{(i)}$ (weitere $n-i$ arithmetische Operationen) durchzuführen. Insgesamt ergibt sich so der Aufwand:

$$N_{QR} = 2\sum_{i=1}^{n-1}(n-i) + (n-i)^2 = n(n-1) + \frac{n(n-1)(2n-1)}{3} = \frac{2n^3}{3} + O(n^2).$$

$\square$

Bemerkung 4.16 (QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen)**.** *Die Householder-Matrizen* $\tilde{S}^{(i)} = I - 2\tilde{v}^{(i)}(\tilde{v}^{(i)})^T$ *werden nicht explizit aufgestellt. Auch muss das Produkt*

$$Q := (S^{(1)})^T \cdots (S^{(n-1)})^T,$$

aus Effizienzgründen nicht explizit berechnet werden. Die Matrix Q *steht nur implizit zur Verfügung durch Speichern der Vektoren* $\tilde{v}^{(i)}$*. Mit* implizit *meint man, dass etwa zur Berechnung des Produktes* $\tilde{b} := Q^T b$ *(ist notwendig zum Lösen der Gleichungssysteme) die Householder-Transformationen erneut Schritt für Schritt angewendet werden müssen:*

$$\tilde{b} = Q^T b = S^{(n-1)} \cdots S^{(1)} b.$$

Jedes Produkt wird mittels der Vorschrift (4.4) berechnet, ohne dass die Matrizen $S^{(i)}$ *explizit aufgestellt werden:*

$$b^{(0)} := 0, \quad i = 1, \dots, n-1: \; b^{(i+1)} := b^{(i)} - 2(v^{(i)}, b^{(i)})v^{(i)}, \; \tilde{b} := b^{(n)}.$$

Neben der oberen Dreiecksmatrix R *müssen die Vektoren* $\tilde{v}^{(i)} \in \mathbb{R}^{n-i}$ *gespeichert werden. Im Gegensatz zur LR-Zerlegung kann dies nicht alleine im Speicherplatz der Matrix* A *geschehen, da sowohl* R *als auch die* $\tilde{v}^{(i)}$ *die Diagonale besetzen. Bei der praktischen Realisierung muss ein weiterer Diagonalvektor angelegt werden.*

Abschließend berechnen wir die QR-Zerlegung zu Beispiel 4.8 mit Hilfe der Householder-Transformationen:

Beispiel 4.17 (QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen)**.** *Es sei wieder das LGS*

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.01 & 0 & 0.01 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad b := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0.02 \end{pmatrix},$$

mit Lösung

$$x = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

gegeben. Wir wählen mit $a_1 = (1, 0.01, 0)^T$ *und* $\|a_1\| \approx 1$ *den ersten Vektor zur Spiegelung als:*

$$v^{(1)} = \frac{a_1 + \|a_1\| e_1}{\|a_1 + \|a_1\| e_1\|} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.005 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Hiermit ergibt sich (wird eigentlich nicht benötigt!)

$$S^{(1)} = I - 2v^{(1)}(v^{(1)})^T \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.01 & 0 \\ -0.01 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

und die neuen Spaltenvektoren ergeben sich zu:

$$\begin{aligned} a_1^{(1)} &= -\|a_1\|e_1 \approx -e_1, \\ a_2^{(1)} &= a_2 - 2(v^{(1)}, a_2)v^{(1)} \approx a_2 - 2v^{(1)}, \\ a_3^{(1)} &= a_3 - 2(v^{(1)}, a_3)v^{(1)} \approx a_3 - 2v^{(1)}, \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad A^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & -0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}.$$

Wir fahren mit der Teilmatrix $A^{(1)}_{kl>1}$ *fort und wählen mit* $\tilde{a}_2^{(1)} = (-0.01, 0.01)^T$ *(man beachte das Vorzeichen* $\operatorname{sign}(a_{22}^{(1)}) =$ *"-")*

$$\tilde{v}^{(2)} = \frac{\tilde{a}_2^{(1)} - \|\tilde{a}_2^{(1)}\|\tilde{e}_2}{\|\tilde{a}_2^{(1)} - \|\tilde{a}_2^{(1)}\|\tilde{e}_2\|} \approx \begin{pmatrix} -0.924 \\ 0.383 \end{pmatrix}.$$

Damit ergibt sich als Householder-Transformation

$$I - 2\tilde{v}^{(2)}(\tilde{v}^{(2)})^T \approx \tilde{S}^{(2)} = \begin{pmatrix} -0.708 & 0.708 \\ 0.708 & 0.707 \end{pmatrix}, \quad S^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.708 & 0.708 \\ 0 & 0.708 & 0.707 \end{pmatrix}.$$

Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_2^{(2)} &= \|\tilde{a}_1^{(1)}\|\tilde{e}_2, \\ \tilde{a}_3^{(2)} &= \tilde{a}_3^{(1)} - 2(\tilde{a}_3^{(1)}, \tilde{v}^{(2)})\tilde{v}^{(2)} \approx \tilde{a}_3^{(1)} - 2 \cdot 0.00383\tilde{v}^{(2)}, \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad A^{(2)} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0.0141 & 0.00708 \\ 0 & 0 & 0.00707 \end{pmatrix}.$$

Zur Probe berechnen wir $Q^T = S^{(2)}S^{(1)}$ *(mit dreistelliger Genauigkeit):*

$$Q^T \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.01 & 0 \\ 0.00708 & -0.708 & 0.708 \\ -0.00708 & 0.708 & 0.707 \end{pmatrix}.$$

Bei dreistelliger Genauigkeit gilt für das Produkt $Q^TQ \approx I$*:*

$$Q^TQ \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -7.58 \cdot 10^{-4} \\ 0 & -7.58 \cdot 10^{-4} & 1 \end{pmatrix}.$$

Dies entspricht einem relativen Fehler $\|Q^TQ - I\|_2 \le 7.58 \cdot 10^{-4}$ *im Rahmen der Rechengenauigkeit. Wir lösen das System*

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0.0141 & 0.00708 \\ 0 & 0 & 0.00707 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix} = \tilde{Q}^T b \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.0212 \\ 0.0706 \end{pmatrix},$$

mit der Lösung

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} -0.996 \\ 0.998 \\ 0.999 \end{pmatrix},$$

und einem relativen Fehler von 0.25%, $\|\tilde{x} - x\|_2 / \|x\|_2 \approx 0.0025$.

Man vergleiche abschließend das Resultat mit dem vorherigen Ergebnissen. Das Gleichungssystem kann auf drei Stellen Genauigkeit gelöst werden! Richtig durchgeführt ist die QR-Zerlegung ein numerisch sehr stabiles Verfahren.

4.4. Givens-Rotationen

Das Gram-Schmidt Verfahren basiert auf Projektionen, die Householder-Transformationen sind Spiegelungen. Schließlich stellen wir kurz eine Methode vor, die auf Rotationen beruht. Wir definieren:

Definition 4.18 (Givens-Rotation). *Unter einer* Givens-Rotation *im* $\mathbb{R}^n$ *versteht man die Drehung um den Winkel* θ *in der durch zwei Einheitsvektoren* e_i *und* e_j *aufgespannten Ebene. Die Transformationsmatrix ist gegeben durch:*

$$G(i,j,\theta) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & & -s & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & s & & c & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c := \cos(\theta), \quad s := \sin(\theta).$$

Es gilt:

Satz 4.19 (Givens-Rotation). *Die Givens-Rotation* $G(i,j,\theta)$ *ist eine orthogonale Matrix mit* $\det(G) = 1$. *Es ist* $G(i,j,\theta)^{-1} = G(i,j,-\theta)$.

Beweis: Nachrechnen. □

Wie die Householder-Transformationen sind die Givens-Rotationen orthogonale Matrizen. Die Multiplikation von links an eine Matrix, also GA oder einen Vektor, also Gx ändert nur die i-te und j-te Zeile von A, bzw. von x:

$$G(i,j,\theta)A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i-1,1} & \cdots & a_{i-1,n} \\ ca_{i1} - sa_{j1} & \cdots & ca_{in} - sa_{jn} \\ a_{i+1,1} & \cdots & a_{i+1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{j-1,1} & \cdots & a_{j-1,n} \\ sa_{i1} + ca_{j1} & \cdots & sa_{in} + ca_{jn} \\ a_{j+1,1} & \cdots & a_{j+1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Die QR-Zerlegung auf der Basis von Givens-Rotationen transformiert die Matrix A wieder schrittweise in eine obere rechte Dreiecksmatrix R. Durch Anwenden einer Givens-Rotation kann jedoch nur ein einzelnes Unterdiagonalelement eliminiert werden und nicht eine ganze Spalte:

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \\ &\to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wir betrachten einen Schritt des Verfahrens. Dazu sei die Matrix A gegeben in der Form:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \ddots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & a_{ii} & & & \vdots \\ \vdots & & 0 & a_{i+1,i+1} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & a_{ji} & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{ni} & a_{n,i+1} & \cdots & a_{nn}. \end{pmatrix}$$

Wir suchen die Givens-Rotation $G(i,j,\theta)$ zur Elimination von a_{ji}. Für GA gilt:

$$(G(i,j,\theta)A)_{ji} = sa_{ii} + ca_{ji}, \quad c := \cos(\theta), \quad s := \sin(\theta).$$

Anstelle den Winkel θ zu finden bestimmen wir gleich die Werte c und s mit dem Ansatz

$$sa_{ii} + ca_{ji} = 0, \quad c^2 + s^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad c := \frac{a_{ii}}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}}, \quad s := -\frac{a_{ji}}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}}.$$

Anwendung von $G(i,j,\theta)$ auf A ergibt:

$$(G(i,j,\theta)A)_{ji} = \frac{-a_{ji}a_{ii} + a_{ii}a_{ji}}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}} = 0, \quad (G(i,j,\theta)A)_{ii} = \frac{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}} = \sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}.$$

Das Element a_{ji} wird eliminiert. Zur Elimination der i-ten Spalte (unterhalb der Diagonale) sind $(n-i)$ Givens-Rotationen notwendig. Hieraus lässt sich leicht abschätzen, dass der Aufwand zum Erstellen der QR-Zerlegung nach Givens großer ist als der Aufwand bei Verwenden der Householder-Transformationen. Genaue Analyse und effiziente Durchführung führt zu $\frac{4n^3}{3} + O(n^2)$ arithmetische Operationen, also dem doppelten Aufwand verglichen mit der Householder-Methode.

Die QR-Zerlegung nach Givens gewinnt aber an Bedeutung, wenn die Matrix A bereits dünn besetzt ist. Nur Unterdiagonalelemente $a_{ji} \neq 0$ müssen gezielt eliminiert werden. Bei sogenannten *Hessenberg-Matrizen* (das sind rechte obere Dreiecksmatrizen, die zusätzlich noch eine linke Nebendiagonale besitzen) kann die QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen in nur $O(n^2)$ Operationen durchgeführt werden. Die QR-Zerlegung von Hessenberg-Matrizen spielt die entscheidende Rolle bei dem wichtigsten Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten einer Matrix, siehe Abschnitt 6.

Beispiel 4.20 (QR-Zerlegung nach Givens)**.** *Wie in Beispielen 4.8 und 4.17 sei wieder die folgende Matrix gegeben:*

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.01 & 0 & 0.01 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$$

Wir führen alle Rechnungen mit dreistelliger Genauigkeit durch. Zur Elimination von $a_{21} = 0.01$ *ist:*

$$c^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{1 + 0.01^2}} \approx 1, \quad s^{(1)} = -\frac{0.01}{\sqrt{1 + 0.01^2}} \approx -0.01,$$

d.h.

$$G^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0.01 & 0 \\ -0.01 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A^{(1)} = G^{(1)}A \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$$

Im zweiten Schritt wählen wir zur Elimination von $a_{32}^{(1)} = 0.01$

$$c^{(2)} = \frac{-0.01}{\sqrt{0.01^2 + 0.01^2}} \approx -0.707, \quad s^{(2)} = -\frac{0.01}{\sqrt{0.01^2 + 0.01^2}} \approx -0.707,$$

also

$$G^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.707 & 0.707 \\ 0 & -0.707 & -0.707 \end{pmatrix}, \quad A^{(2)} = G^{(2)} A^{(1)} \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0141 & 0.00707 \\ 0 & 0 & -0.00707 \end{pmatrix} = \tilde{R}.$$

Zur Probe berechnen wir zunächst $\tilde{Q} := (G^{(1)})^T (G^{(2)})^T$*:*

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0.00707 & 0.00707 \\ 0.01 & -0.707 & -0.707 \\ 0 & 0.707 & -0.707 \end{pmatrix}.$$

Die Matrizen $\tilde{Q}$ *sowie* $\tilde{R}$ *sind nahezu identisch zu denen der Householder-Transformation in Beispiel 4.17. Daher ist auch die Genauigkeit der Approximation entsprechend gut:*

$$\tilde{Q}^T \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1.0001 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99975 & 5 \cdot 10^{-5} \\ 0 & 5 \cdot 10^{-5} & 0.99975 \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q}\tilde{R} \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.01 & 3 \cdot 10^{-5} & 0.01 \\ 0 & 0.00997 & 0.009997 \end{pmatrix},$$

mit relativen Fehlern $\|\tilde{Q}\tilde{R} - A\|_2 / \|A\|_2 \approx 0.00002$ *sowie* $\|\tilde{Q}^T\tilde{Q} - I\|_2 \approx 0.0003$.

5. Überbestimmte Gleichungssysteme und die Gauß'sche Ausgleichrechnung

In vielen Anwendungen treten lineare Gleichungssysteme auf, die eine unterschiedliche Anzahl von Gleichungen und Unbekannten besitzen:

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times m}, \quad x \in \mathbb{R}^m, \quad b \in \mathbb{R}^n, \quad n \neq m.$$

Im Fall $n > m$ sprechen wir von *überbestimmten* Gleichungssystemen, im Fall $n < m$ von *unterbestimmten* Gleichungssystemen. Die Untersuchung der eindeutigen Lösbarkeit von allgemeinen Gleichungssystemen mit rechteckiger Matrix A kann nicht mehr an deren Regularität ausgemacht werden. Stattdessen wissen wir, dass ein Gleichungssystem genau dann lösbar ist, falls der Rang der Matrix A gleich dem Rang der erweiterten Matrix $(A|b)$ ist. Gilt zusätzlich $\mathrm{rang}(A) = m$, so ist die Lösung eindeutig. Ein unterbestimmtes lineares Gleichungssystem kann daher nie eindeutig lösbar sein. Wir betrachten in diesem Abschnitt ausschließlich überbestimmte Gleichungssysteme, d.h. den Fall $n > m$. Ein solches Gleichungssystem ist im allgemeinen Fall nicht lösbar:

Beispiel 5.1 (Überbestimmtes Gleichungssystem)**.** *Wir suchen das quadratische Interpolationspolynom*

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2,$$

gegeben durch die Vorschrift:

$$p\left(-\frac{1}{4}\right) = 0, \quad p\left(\frac{1}{2}\right) = 1, \quad p(2) = 0, \quad p\left(\frac{5}{2}\right) = 1.$$

Dies ergibt die vier Gleichungen:

$$\begin{array}{ccccccc} a_0 & - & \frac{1}{4}a_1 & + & \frac{1}{16}a_2 & = 0 \\ a_0 & + & \frac{1}{2}a_1 & + & \frac{1}{4}a_2 & = 1 \\ a_0 & + & 2a_1 & + & 4a_2 & = 0 \\ a_0 & + & \frac{5}{2}a_1 & + & \frac{25}{4}a_2 & = 1 \end{array}$$

Wir versuchen, das lineare Gleichungssystem mit Gauß-Elimination zu lösen:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{16} & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 0 \\ 1 & \frac{5}{2} & \frac{25}{4} & 1 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{16} & 0 \\ 0 & 3 & \frac{3}{4} & 4 \\ 0 & 9 & \frac{63}{4} & 0 \\ 0 & 11 & \frac{99}{4} & 4 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccc|r} 1 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{16} & 0 \\ 0 & 3 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & \frac{27}{2} & -12 \\ 0 & 0 & 22 & -\frac{32}{4} \end{array}\right).$$

D.h., es müsste gelten $a_2 = -8/9 \approx -0.89$ *sowie* $a_2 = -4/11 \approx -0.36$.

In Kapitel 9 werden wir sehen, dass dieses Ergebnis zu erwarten ist, zur eindeutigen Interpolation von $n+1$ Punkten durch ein Polynom, ist dieses vom Grad n zu wählen. Bei allgemeinen überbestimmten Gleichungssystemen muss daher die Zielstellung geändert werden: gesucht wird nicht *die* Lösung des Gleichungssystems, sondern ein Vektor $x \in \mathbb{R}^m$, welcher in gewissem Sinne die beste Approximation ist. Wie gut die Approximation ist, können wir am Defekt festmachen

$$d(x) = b - Ax \in \mathbb{R}^n.$$

Eine beste Approximation $x \in \mathbb{R}^m$ ist diese, die den Defekt in einer Norm minimiert:

$$\|b - Ax\| = \min_{y \in \mathbb{R}^m} \|b - Ay\|.$$

Unterschiedliche Normen werden unterschiedliche Bestapproximationen definieren. Für den folgenden Satz ist es wesentlich, die euklidische Norm, induziert vom euklidischen Skalarprodukt, zu betrachten:

Definition 5.2 (Methode der kleinsten Fehlerquadrate, Least-Squares)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ mit $n > m$ und $b \in \mathbb{R}^n$. Die* Least-Squares Lösung *$x \in \mathbb{R}^m$ ist als die Näherung an $Ax = b$ bestimmt, deren Defekt die kleinste euklidische Norm annimmt:*

$$\|b - Ax\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^m} \|b - Ay\|_2 \tag{5.1}$$

Die Suche nach einer Least-Squares Lösung ist eng mit der *Bestapproximation von Funktionen* verwandt, also der Approximation von Messwerten mit einfachen Funktionen (dem "fitten"), eine Aufgabe, die wir in Kapitel 9 betrachten werden. Es gilt:

Satz 5.3 (Kleinste Fehlerquadrate)**.** *Angenommen für die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ mit $n > m$ gilt* $\operatorname{rang}(A) = m$*. Dann ist die Matrix $A^TA \in \mathbb{R}^{m\times m}$ positiv definit und die Least-Squares-Lösung $x \in \mathbb{R}^m$ ist eindeutig bestimmt als Lösung des* Normalgleichungssystems*:*

$$A^TAx = A^Tb.$$

Beweis: *(i)* Es gilt $\operatorname{rang}(A) = m$. D.h. $Ax = 0$ gilt nur dann, wenn $x = 0$. Hieraus folgt die positive Definitheit der Matrix A^TA:

$$(A^TAx, x)_2 = (Ax, Ax)_2 = \|Ax\|_2^2 > 0 \quad \forall x \neq 0,$$

und das Gleichungssystem $A^TAx = A^Tb$ ist für jede rechte Seite $b \in \mathbb{R}^n$ eindeutig lösbar.

(ii) Es sei $x \in \mathbb{R}^m$ die Lösung des Normalgleichungssystems. Dann gilt für beliebiges $y \in \mathbb{R}^m$:

$$\begin{aligned}\|b - A(x+y)\|_2^2 &= \|b - Ax\|_2^2 + \|Ay\|_2^2 - 2(b - Ax, Ay)_2 \\ &= \|b - Ax\|_2^2 + \|Ay\|_2^2 - 2(\underbrace{A^Tb - A^TAx}_{=0}, y)_2 \\ &\geq \|b - Ax\|_2^2.\end{aligned}$$

(iii) Nun sei x das Minimum von (5.1). D.h., es gilt für beliebigen Vektor y:

$$\|b - Ax\|_2^2 \leq \|b - A(x+y)\|_2^2 = \|b - Ax\|_2^2 + \|Ay\|_2^2 - 2(b - Ax, Ay)_2 \quad \forall y \in \mathbb{R}^m.$$

Hieraus folgt:

$$2(A^T b - A^T Ax, y)_2 \leq \|Ay\|_2^2.$$

Wir wählen y als $y = se_i$ mit dem i-ten Einheitsvektor und $s \in \mathbb{R}$. Dann folgt

$$2s(A^T b - A^T Ax)_i \leq |s|^2 \|A\|^2 \quad \Rightarrow \quad |(A^T b - A^T Ax)_i| \leq |s| \|A\|^2.$$

Für $s \to 0$ folgt $A^T Ax = A^T b$. □

Die beste Approximation eines überbestimmten Gleichungssystems kann durch Lösen des Normalgleichungssystems gefunden werden. Der naive Ansatz, die Matrix $A^T A$ zu bestimmen und dann das Normalgleichungsystem etwa mit dem Cholesky-Verfahren zu lösen ist numerisch nicht ratsam. Zunächst ist der Aufwand zur Berechnung von $A^T A$ sehr groß und die Berechnung der Matrix-Matrix Multiplikation ist schlecht konditioniert. Weiter gilt die Abschätzung:

$$\operatorname{cond}(A^T A) \approx \operatorname{cond}(A)^2.$$

Wir lösen mit dieser Methode das überbestimmte Gleichungssystem aus Beispiel 5.1:

Beispiel 5.4 (Lösen der Normalgleichung)**.** *Die exakte Lösung des Normalgleichungssystems $A^T Ax = A^T b$ ist gegeben durch:*

$$x \approx \begin{pmatrix} 0.3425 \\ 0.3840 \\ -0.1131 \end{pmatrix}, \quad p(x) = 0.3425 + 0.3740x - 0.1131x^2.$$

Es gilt:

$$\|b - Ax\|_2 \approx 0.947.$$

Wir stellen das Normalgleichungssystem mit dreistelliger Rechnung auf:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 4.75 & 10.6 \\ 4.75 & 10.6 & 23.7 \\ 10.6 & 23.7 & 55.1 \end{pmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 6.5 \end{pmatrix}.$$

Die exakte Lösung ist bestimmt durch die Polynomkoeffizienten $x = (a_0, a_1, a_2)^T$ sowie das Polynom $p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$:

Wir bestimmen die Cholesky-Zerlegung mit dem direkten Verfahren:

$$\begin{aligned} l_{11} &= \sqrt{4} = 2 \\ l_{21} &= 4.75/2 \approx 2.38 \\ l_{31} &= 10.6/2 = 5.3 \\ l_{22} &= \sqrt{10.6 - 2.38^2} \approx 2.22 \\ l_{32} &= (23.7 - 2.38 \cdot 5.3)/2.22 \approx 5 \\ l_{33} &= \sqrt{55.1 - 5.3^2 - 5^2} \approx 1.42. \end{aligned}, \quad L := \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2.38 & 2.22 & 0 \\ 5.3 & 5 & 1.42 \end{pmatrix}.$$

Wir lösen:

$$L\underbrace{L^T x}_{=y} = A^T b \quad \Rightarrow \quad y \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0.279 \\ -0.137 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \tilde{x} \approx \begin{pmatrix} 0.348 \\ 0.345 \\ -0.0972 \end{pmatrix},$$

mit dem Polynom

$$p(x) = 0.348 + 0.345x - 0.0972x^2,$$

und dem Defekt $\|b - A\tilde{x}\| \approx 0.95$ *sowie dem relativen Fehler zur exakten Lösung:*

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \approx 0.08.$$

Wir entwickeln ein alternatives Verfahren, welches das Aufstellen des Normalgleichungssystems $A^T Ax = A^T b$ umgeht und nutzen hierfür eine Erweiterung der bereits vorgestellten QR-Zerlegung auf allgemeine rechteckige Matrizen:

Satz 5.5 (QR-Zerlegung rechteckiger Matrizen)**.** *Es sei* $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *mit* $n > m$ *und* $\operatorname{rang}(A) = m$*. Dann existiert eine orthogonale Matrix* $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$*, sowie eine "rechteckige obere Dreiecksmatrix"* $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *so dass gilt* $A = Q\tilde{R}$ *mit:*

$$\tilde{R} = \left(\begin{array}{c} R \\ \hline 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \}m \\ \}n-m \end{array}, \quad R = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \ddots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times m}.$$

Beweis: Der Beweis folgt durch Anwenden von m Schritten der QR-Zerlegung (statt den $m-1$ notwendigen Schritten bei quadratischen Matrizen) mit Householder-Transformationen auf die Matrix A. Die Spaltenvektoren $A = (a_1^{(0)}, \dots, a_m^{(0)})$ sind linear unabhängig. Diese Eigenschaft bleibt durch Anwenden von orthogonalen Householder-Transformationen $S^{(1)}, \dots, S^{(m)}$ erhalten, d.h.:

$$\dim\left(\operatorname{span}\{a_1^{(1)}, \dots, a_m^{(m)}\}\right) = m, \quad a_j^{(i)} = S^{(i)} a_j^{(i-1)} \text{ für } i = 1, \dots, m.$$

Die ersten m Schritte der Householder-Transformation sind durchführbar und es gilt $\operatorname{rang}(A) = \operatorname{rang}(Q^T A)$ mit

$$Q^T = S^{(m)} \cdots S^{(1)}.$$

Die Matrix A wird dabei schrittweise auf "Dreiecksgestalt" gebracht:

$$\begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ * & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} \rightarrow \left(\begin{array}{cccc} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & 0 & * \\ \hline \vdots & & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{array}\right) =: \tilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times m}.$$

Im Gegensatz zur Householder-Transformation bei quadratischen Matrizen müssen m anstelle von $m-1$ Schritte durchgeführt werden, um den Block unterhalb der m-ten Zeile zu eliminieren.

Die resultierende Matrix $\tilde{R}$ hat Rang m und für ihre Einträge $\tilde{r}_{ij}$ mit $i > m$ gilt $\tilde{r}_{ij} = 0$. Daher ist der obere Matrixblock $R \in \mathbb{R}^{m\times m}$ mit $r_{ij} = \tilde{r}_{ij}$ für $i,j \le m$ regulär mit $\operatorname{rang}(R) = \operatorname{rang}(\tilde{R}) = m$. □

Mit dieser verallgemeinerten QR-Zerlegung gilt nun:

$$A^TAx = A^Tb \quad \Leftrightarrow \quad (Q\tilde{R})^TQ\tilde{R}x = (Q\tilde{R})^Tb \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{R}^T\tilde{R}x = \tilde{R}^TQ^Tb.$$

Da alle Einträge von $\tilde{R}$ im unteren Block Null sind gilt $\tilde{R}^T\tilde{R} = R^TR$ und weiter mit

$$\tilde{b}_i := (Q^Tb)_{i\le m},$$

ist das Normalgleichungssystem äquivalent zum einfachen Dreieckssystem

$$A^TAx = A^Tb \quad \Leftrightarrow \quad Rx = \tilde{b},$$

mit einer $m \times m$-Matrix R.

Beispiel 5.6 ("Lösen" eines überbestimmten Gleichungssystems mit erweiterter QR-Zerlegung)**.** *Für das überbestimmte lineare Gleichungssystem aus Beispiel 5.1 gilt:*

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{16} \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & \frac{5}{2} & \frac{25}{4} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wir wählen im ersten Schritt der Householder-Transformation (dreistellige Rechnung)

$$v^{(1)} = \frac{a_1 + \|a_1\|e_1}{\|\, a_1 + \|a_1\|e_1 \,\|} \approx \begin{pmatrix} 0.866 \\ 0.289 \\ 0.289 \\ 0.289 \end{pmatrix}.$$

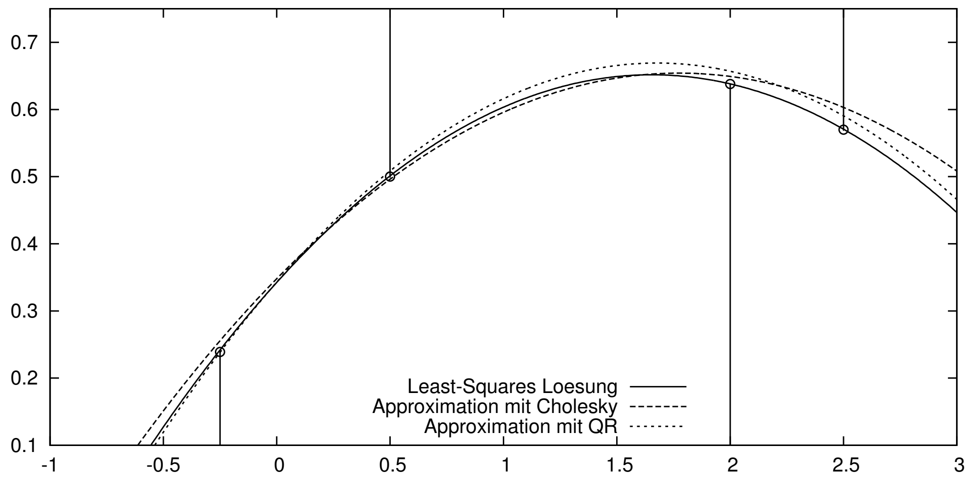


Abbildung 5.1.: Lösen eines überbestimmten Gleichungssystems zum Finden der besten Approximation an Messdaten. Siehe Beispiele 5.1, 5.4 sowie 5.6.

Dann gilt mit $a_i^{(1)} = a_i - 2(a_i, v^{(1)})v^{(1)}$*:*

$$\tilde{A}^{(1)} \approx \begin{pmatrix} -2 & -2.38 & -5.29 \\ 0 & -0.210 & -1.54 \\ 0 & 1.29 & 2.21 \\ 0 & 1.79 & 4.46 \end{pmatrix} =: (a_1^{(1)}, a_2^{(1)}, a_3^{(1)}).$$

Mit dem reduzierten Vektor $\tilde{a}_2^{(1)} = (-0.21, 1.29, 1.79)^T$ *gilt weiter*

$$\tilde{v}^{(2)} = \frac{\tilde{a}_2^{(1)} - \|\tilde{a}_2^{(1)}\|\tilde{e}_2}{\| \tilde{a}_2^{(1)} - \|\tilde{a}_2^{(1)}\|\tilde{e}_2 \|} \approx \begin{pmatrix} -0.740 \\ 0.393 \\ 0.546 \end{pmatrix}.$$

Und hiermit:

$$\tilde{A}^{(2)} \approx \begin{pmatrix} -2 & -2.38 & -5.29 \\ 0 & 2.22 & 5.04 \\ 0 & 0 & -1.28 \\ 0 & 0 & -0.392 \end{pmatrix} =: (a_1^{(2)}, a_2^{(2)}, a_3^{(2)}).$$

Wir müssen einen dritten Schritt durchführen und mit $\tilde{a}_3^{(2)} = (-1.28, -0.392)$ *ergibt sich nach gleichem Prinzip:*

$$\tilde{v}^{(3)} = \begin{pmatrix} -0.989 \\ -0.148 \end{pmatrix}.$$

Schließlich erhalten wir:

$$\tilde{R} = \tilde{A}^{(3)} \approx \begin{pmatrix} -2 & -2.38 & -5.29 \\ 0 & 2.22 & 5.04 \\ 0 & 0 & 1.34 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Zum Lösen des Ausgleichsystems:

$$A^T Ax = A^T b \quad \Leftrightarrow \quad Rx = \tilde{b},$$

bestimmen wir zunächst die rechte Seite nach der Vorschrift $b^{(i)} = b^{(i-1)} - 2(b^{(i-1)}, v^{(i)})v^{(i)}$*:*

$$\tilde{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0.28 \\ -0.155 \end{pmatrix}.$$

Abschließend lösen wir durch Rückwärtseinsetzen $Rx = \tilde{b}^{(3)}$*:*

$$\tilde{x} \approx \begin{pmatrix} 0.343 \\ 0.389 \\ -0.116 \end{pmatrix}$$

und erhalten das Interpolationspolynom:

$$p(x) = 0.343 + 0.389x - 0.116x^2,$$

mit Defekt

$$\|b - A\tilde{x}\|_2 \approx 0.948,$$

und relativem Fehler zur exakten Least-Squares-Lösung:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \approx 0.01,$$

d.h. ein Fehler von etwa einem 1% *anstelle von fast 8% beim direkten Lösen des Normalsystems. In Abbildung 5.1 zeigen wir die exakte Lösung sowie die beiden Approximierten Lösungen zu diesem Beispiel.*

In Abschnitt 9.6.1 werden wir die diskrete Gauss-Approximation als Methode zur Näherung von Funktionen an Messwerte betrachten. Diese ist eine Anwendung der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Die lineare Ausgleichsrechnung ist ein Spezialfall mit Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times 2}$.

Zum Abschluss betrachten wir noch ein weiteres Beispiel:

Beispiel 5.7 (Ausgleichrechung)**.** *Ein Himmelskörper bewegt sich auf einer Ellipsenbahn um den Ursprung*

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1.$$

Wir können die Position des Körpers zu verschiedenen Zeiten messen:

x	*0.2*	*-0.7*	*-0.3*	*1.2*	*2.0*	*-2.4*
y	*1.8*	*1.7*	*-1.8*	*-1.6*	*1.1*	*0.5*

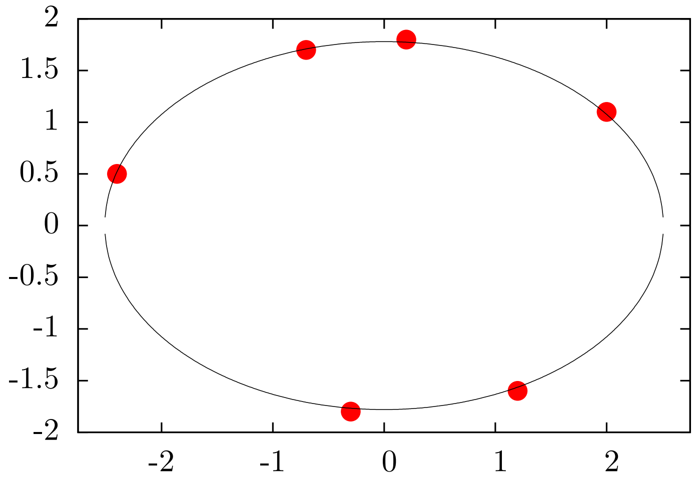


Abbildung 5.2.: Beispiel zur Ausgleichrechnung: Identifikation einer Ellipse.

Aus diesen Daten wollen wir die Längen der beiden Hauptachsen a und b bestimmen. Die unbekannten Größen a und b tauchen in einem nichtlinearen Zusammenhang auf. Daher definieren wir zunächst die beiden Hilfsgrößen

$$A = \frac{1}{a^2}, \quad B = \frac{1}{b^2}.$$

Es entsteht das überbestimmte Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 0.04 & 3.24 \\ 0.49 & 2.56 \\ 0.09 & 3.24 \\ 1.44 & 2.56 \\ 4.0 & 1.21 \\ 5.76 & 0.25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Zum Lösen dieses überbestimmten Problems könnten wir einerseits unmittelbar die Normalgleichung aufstellen und dann lösen. Es gilt:

$$A^T A \approx \begin{pmatrix} 51.50 & 11.64 \\ 11.64 & 35.63 \end{pmatrix}, \quad A^T b \approx \begin{pmatrix} 11.82 \\ 13.06. \end{pmatrix}$$

Als Lösung von $A^T A x = A^T b$ folgt

$$x = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.158 \\ 0.315. \end{pmatrix} \quad a = \frac{1}{\sqrt{A}} \approx 2.51, \quad b = \frac{1}{\sqrt{B}} \approx 1.78.$$

Ein alternativer Lösungsweg besteht im Erstellen der QR-Zerlegung von A. Für $A \in \mathbb{R}^{6\times 2}$ müssen wir zwei Schritte durchführen. Wir erhalten:

$$A = QR, \quad R \approx \begin{pmatrix} -7.18 & -1.62 \\ 0 & -5.74 \\ \hline 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und für die rechte Seite

$$\tilde{b} = Q^T b \approx \begin{pmatrix} -1.65 \\ -1.81 \end{pmatrix}$$

Die Lösung des Gleichungssystems ergibt sich wie oben zu

$$\tilde{R}x = \tilde{b} \quad \Rightarrow \quad x \approx \begin{pmatrix} 0.158 \\ 0.315 \end{pmatrix}.$$

In Abbildung 5.2 ist das Ergebnis graphisch dargestellt. Für den Defekt der Least-Squares-Lösung gilt:

$$\|b - Ax\|_2 \approx 0.13.$$

6. Berechnung von Eigenwerten

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit dem Eigenwertproblem: Zu gegebener Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sind die Eigenwerte (und gegebenenfalls Eigenvektoren) gesucht. Wir erinnern an Definition 2.10 und formulieren

Satz 6.1 (Eigenwerte)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann gilt:*

- *Die Matrix A hat genau n Eigenwerte, ihrer Vielfachheit nach gezählt.*
- *Die Eigenwerte sind Nullstellen des* charakteristischen Polynoms:
$$\det(A - \lambda I) = 0.$$
- *Reelle Matrizen können komplexe Eigenwerte haben, komplexe Eigenwerte treten stets als konjugierte Paare $\lambda, \bar{\lambda}$ auf.*
- *Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind linear unabhängig.*
- *Falls n linear unabhängige Eigenvektoren existieren, so existiert eine reguläre Matrix $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass $S^{-1}AS = D$ eine Diagonalmatrix ist. Die Spaltenvektoren von S sind die Eigenvektoren und die Diagonaleinträge von D die Eigenwerte.*
- *Symmetrische Matrizen $A = A^T$ haben nur reelle Eigenwerte. Es existiert eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren und eine Diagonalisierung $Q^T AQ = D$ mit einer orthogonalen Matrix bestehend aus den Eigenvektoren.*
- *Bei Dreiecksmatrizen stehen die Eigenwerte auf der Diagonalen.*

Zu einem Eigenwert λ sind die Eigenvektoren als Lösung des homogenen linearen Gleichungssystems bestimmt:
$$(A - \lambda I)w = 0.$$

Umgekehrt gilt:

Definition 6.2 (Rayleigh-Quotient)**.** *Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie $w \in \mathbb{R}^n$ ein Eigenvektor. Dann ist durch den* Rayleigh-Quotienten *der zugehörige Eigenwert gegeben:*
$$\lambda = \frac{(Aw, w)_2}{\|w\|_2^2}.$$

Mit Hilfe dieser Definition folgt mit Hilfe der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung eine einfache Schranke für die Eigenwerte:

$$|\lambda| \le \sup_{w\neq 0} \frac{(Aw,w)_2}{\|w\|_2^2} \le \frac{\|A\|_2\,\|w\|_2^2}{\|w\|_2^2} = \|A\|_2.$$

Wir haben in Abschnitt 2 bereits gesehen, dass diese Schranke für die Beträge der Eigenwerte in jeder Matrixnorm mit verträglicher Vektornorm gilt.

6.1. Konditionierung der Eigenwertaufgabe

Bevor wir auf konkrete Verfahren zur Eigenwertberechnung eingehen, analysieren wir die Kondition der Aufgabe, d.h. die Abhängigkeit der Eigenwerte von der Störung der Matrix. Hierfür benötigen wir zunächst einen Hilfsatz:

Hilfsatz 6.3. *Es seien $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ beliebige Matrizen. Dann gilt für jeden Eigenwert λ von A, der nicht zugleich Eigenwert von B für jede natürliche Matrizennorm die Abschätzung:*

$$\|(\lambda I - B)^{-1}(A-B)\| \ge 1.$$

Beweis: Es sei $w \neq 0$ ein Eigenvektor zu λ. Dann gilt:

$$(A-B)w = (\lambda I - B)w.$$

Wenn λ kein Eigenwert von B ist, so ist die Matrix $(\lambda I - B)$ regulär, d.h. es folgt:

$$(\lambda I - B)^{-1}(A-B)w = w.$$

Und schließlich durch Normbilden:

$$1 = \frac{\|(\lambda I - B)^{-1}(A-B)w\|}{\|w\|} \le \sup_x \frac{\|(\lambda I - B)^{-1}(A-B)x\|}{\|x\|} = \|(\lambda I - B)^{-1}(A-B)\|.$$

□

Auf dieser Basis erhalten wir ein einfaches Kriterium zur Eingrenzung der Eigenwerte einer Matrix:

Satz 6.4 (Gerschgorin-Kreise)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Alle Eigenwerte λ von A liegen in der Vereinigung der* Gerschgorin-Kreise*:*

$$K_i = \{z \in \mathbb{C} : \ |z - a_{ii}| \le \sum_{k=1,k\neq i}^{n} |a_{ik}|\}, \quad i = 1,\dots,n.$$

Angenommen zu den Indexmengen $I_m = \{i_1,\dots,i_m\}$ und $I'_m = \{1,\dots,n\} \setminus I_m$ seien die Vereinigungen $U_m = \bigcup_{i\in I_m} K_i$ und $U'_m = \bigcup_{i\in I'_m} K_i$ disjunkt. Dann liegen genau m Eigenwerte (ihrer algebraischen Vielfachheit nach gezählt) in U_m und $n-m$ Eigenwerte in U'_m.

Beweis: *(i)* Es sei $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ die Diagonalmatrix $D = \mathrm{diag}(a_{ii})$. Weiter sei λ ein Eigenwert von A mit $\lambda \neq a_{ii}$. (In diesem Fall wäre die Aussage des Satzes trivial erfüllt). Hilfsatz 6.3 besagt bei Wahl der maximalen Zeilensummennorm:

$$1 \le \|(\lambda I - D)^{-1}(A-D)\|_\infty = \max_i \left\{ \sum_{j=1, j\neq i}^n |(\lambda - a_{ii})^{-1} a_{ij}| \right\} = \max_i \left\{ |\lambda - a_{ii}|^{-1} \sum_{j=1, j\neq i}^n |a_{ij}| \right\}.$$

D.h. es existiert zu jedem λ ein Index $i \in \{1, \dots, n\}$ so dass gilt:

$$|\lambda - a_{ii}| \le \sum_{j=1, j\neq i}^n |a_{ij}|.$$

Jeder Eigenwert λ liegt also in mindestens einem der Gerschgorin-Kreise.

(ii) Es seien durch I_m und I'_m Indexmengen mit oben genannter Eigenschaft gegeben. Wir definieren die Matrix

$$A_s := D + s(A - D),$$

mit $A_0 = D$ und $A_1 = A$. Entsprechend definieren wir die Vereinigungen:

$$U_{m,s} := \bigcup_{i\in I_m} K_i(A_s), \quad U'_{m,s} := \bigcup_{i\in I'_m} K_i(A_s), \quad K_i(A_s) = \{z \in \mathbb{C},\ |z - a_{ii}| \le s \sum_{j\neq i} |a_{ij}|\}.$$

Aufgrund der stetigen Abhängigkeit der Kreisradien von s gilt $U_{m,s} \cap U'_{m,s} = \emptyset$ für $s \in [0,1]$. Im Fall $s = 0$ gilt $A_0 = D$ und jeder Eigenwert von A_0 liegt im Mittelpunkt (also $\lambda_i = a_{ii}$) des trivialen Kreises mit Radius Null. Das Ergebnis folgt nun durch die stetige Abhängigkeit der Eigenwerte von s. □

Bemerkung 6.5 (Stetige Abhängigkeit der Eigenwerte von den Matrix-Einträgen)**.** *Die Eigenwerte sind Nullstellen des charakteristischen Polynoms*

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \alpha_0 + \alpha_1\lambda + \cdots + \alpha_n\lambda^n.$$

Die Koeffizienten $\alpha_0, \dots, \alpha_n$ hängen stetig von den Einträgen a_{ij} der Matrix A ab. Schwieriger zu zeigen ist, dass die (komplexen) Nullstellen eines Polynoms auch stetig von den Koeffizienten abhängen. Wir verweisen auf die Literatur. (Z.b. Abschnitt 3.9 in [16]).

Wir betrachten hierzu ein Beispiel:

Beispiel 6.6 (Gerschgorin-Kreise)**.** *Wir betrachten die Matrix*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0.1 & -0.5 \\ 0.2 & 3 & 0.5 \\ -0.4 & 0.1 & 5 \end{pmatrix},$$

mit den Eigenwerten $\sigma spr(A) \approx \{1.91, 3.01, 5.08\}$. Eine erste Schranke liefern verschiedene mit Vektornormen verträgliche Matrixnormen von A:

$$\|A\|_\infty = 5.5, \quad \|A\|_1 = 6, \quad \|A\|_2 \approx 5.1.$$

Die Gerschgorin-Kreise von A sind:

$$K_1 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-2| \le 0.6\},\quad K_2 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-3| \le 0.7\},\quad K_3 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-5| \le 0.5\}.$$

Diese Abschätzung kann verfeinert werden, da A und A^T die gleichen Eigenwerte besitzen. Die Radien der Gerschgorin-Kreise können auch als Summe der Spaltenbeträge berechnet werden. Zusammen ergibt sich:

$$K_1 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-2| \le 0.6\},\quad K_2 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-3| \le 0.2\},\quad K_3 = \{z \in \mathbb{C},\ |z-5| \le 0.5\}.$$

Alle drei Kreise sind disjunkt, d.h. in jedem der Kreise liegt genau ein Eigenwert.

Wir können nun den allgemeinen Stabilitätssatz für das Eigenwertproblem beweisen:

Satz 6.7 (Stabilität des Eigenwertproblems)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Matrix mit n linear unabhängigen Eigenvektoren $w_1, \dots, w_n$. Durch $\tilde{A} = A + \delta A$ sei eine beliebig gestörte Matrix gegeben. Dann existiert zu jedem Eigenwert $\lambda(\tilde{A})$ von $\tilde{A} = A + \delta A$ ein Eigenwert $\lambda(A)$ von A so dass mit der Matrix $W := (w_1, \dots, w_n)$ gilt:*

$$|\lambda(A) - \lambda(\tilde{A})| \le \mathrm{cond}_2(W)\|\delta A\|.$$

Beweis: Es gilt für $i = 1, \dots, n$ die Beziehung $Aw_i = \lambda_i(A)w_i$ oder in Matrixschreibweise $AW = W\,\mathrm{diag}(\lambda_i(A))$, also

$$W^{-1}AW = \mathrm{diag}(\lambda_i(A)).$$

Da die w_i linear unabhängig sind, ist W regulär. Wir betrachten nun einen Eigenwert $\tilde{\lambda} = \lambda(\tilde{A})$. Falls $\tilde{\lambda}$ auch Eigenwert von A ist, so gilt die Behauptung. Also sei $\tilde{\lambda}$ nun kein Eigenwert von A. Dann folgt:

$$\|(\tilde{\lambda}I - A)^{-1}\|_2 = \|W^{-1}[\tilde{\lambda}I - \mathrm{diag}(\tilde{\lambda}_i(A))]^{-1}W\|_2 \le \mathrm{cond}_2(W)\|[\tilde{\lambda}I - \mathrm{diag}(\lambda_i(A))]^{-1}\|_2.$$

Für die (symmetrische) Diagonalmatrix $\tilde{\lambda}I - \mathrm{diag}(\lambda_i(A))$ gilt

$$\|[\tilde{\lambda}I - \mathrm{diag}(\lambda_i(A))]^{-1}\|_2 = \max_{i=1,\dots,n} |\tilde{\lambda} - \lambda_i(A)|^{-1}.$$

Da $\delta A = \tilde{A} - A$ und mit Hilfsatz 6.3 folgt das gewünschte Ergebnis:

$$1 \le \|[\tilde{\lambda}I - A]^{-1}\delta A\|_2 \le \|[\tilde{\lambda}I - A]^{-1}\|_2\,\|\delta A\|_2 \le \mathrm{cond}_2(W) \max_{i=1,\dots,n} |\tilde{\lambda} - \lambda_i(A)|^{-1}\,\|\delta A\|_2.$$

□

Die Konditionierung des Eigenwertproblems einer Matrix A hängt von der Konditionszahl der Matrix der Eigenvektoren w_i ab. Für symmetrische (hermitesche) Matrizen existiert eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren mit $\mathrm{cond}_2(W) = 1$. Für solche Matrizen ist das Eigenwertproblem gut konditioniert. Für allgemeine Matrizen kann das Eigenwertproblem beliebig schlecht konditioniert sein.

6.2. Direkte Methode

Die Eigenwerte einer Matrix A können prinzipiell als Nullstellen des charakteristischen Polynoms $\chi_A(z) = \det(zI - A)$ berechnet werden. Die Berechnung der Nullstellen kann zum Beispiel mit dem Newton-Verfahren geschehen, Startwerte können mit Hilfe der Gerschgorin-Kreise bestimmt werden.

In Kapitel 7 werden wir jedoch feststellen, dass die Berechnung von Nullstellen eines Polynoms ein sehr schlecht konditioniertes Problem ist. Wir betrachten hierzu ein Beispiel.

Beispiel 6.8 (Direkte Berechnung von Eigenwerten)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{5\times 5}$ eine Matrix mit den Eigenwerten $\lambda_i = i$, $i = 1, \dots, 5$. Dann gilt:*

$$\chi_A(z) = \prod_{i=1}^{5}(z - i) = z^5 - 15z^4 + 85z^3 - 225z^2 + 274z - 120.$$

Der Koeffizient -15 vor z^4 sei mit einem relativen Fehler von 0.1% gestört:

$$\tilde{\chi}_A(z) = z^5 - 0.999 \cdot 15z^4 + 85z^3 - 225z^2 + 274z - 120.$$

Dieses gestörte Polynom hat die Nullstellen (d.h. Eigenwerte):

$$\lambda_1 \approx 0.999, \quad \lambda_2 \approx 2.05, \quad \lambda_3 \approx 2.76, \quad \lambda_{4/5} \approx 4.59 \pm 0.430i.$$

Die Eigenwerte können also nur mit einem (ab λ_3) wesentlichen Fehler bestimmt werden. Es gilt etwa:

$$\frac{|4.59 + 0.43i - 5|}{5} \approx 0.1,$$

d.h. der Fehler in den Eigenwerten beträgt 10%, eine Fehlerverstärkung von 100.

Das Aufstellen des charakteristischen Polynoms erfordert eine Vielzahl schlecht konditionierter Additionen sowie Multiplikationen. Für allgemeine Matrizen verbietet sich dieses direkte Verfahren. Lediglich für spezielle Matrizen wie Tridiagonalsysteme lassen die Eigenwerte bestimmen, ohne das zunächst die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms explizit berechnet werden müssen.

6.3. Iterative Verfahren

Das vorangegangene Beispiel widerspricht scheinbar zunächst der (bei hermiteschen Matrizen) guten Konditionierung der Eigenwertsuche. Wir leiten nun stabile numerische Verfahren her, die die Eigenwerte nicht mehr direkt berechnen, sondern sie iterativ approximieren.

Zur Herleitung eines ersten einfachen Iterationsverfahren machen wir die folgende Beobachtung: Angenommen zu gegebener Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ existiere eine Basis aus Eigenvektoren $\{w_1, \dots, w_n\}$, d.h. die Matrix sei diagonalisierbar. Weiter gelte $|\lambda_n| > |\lambda_{n-1}| \geq \dots \geq |\lambda_1| > 0$. Dann sei $x \in \mathbb{R}^n$ in Basisdarstellung:

$$x = x^{(0)} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j w_j, \quad \alpha_j \in \mathbb{R} \text{ für } j = 1, \dots, n.$$

Wir nehmen an, dass $\alpha_n \neq 0$, dass also die Komponente des Vektors $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ zum Eigenvektor des betragsmäßig größten Eigenwertes nicht trivial ist. Wir definieren die Iteration

$$x^{(i+1)} = \frac{Ax^{(i)}}{\|Ax^{(i)}\|}.$$

Dann gilt

$$x^{(i+1)} = \frac{A\frac{Ax^{(i-1)}}{\|Ax^{(i-1)}\|}}{\|A\frac{Ax^{(i-1)}}{\|Ax^{(i-1)}\|}\|} = \frac{A^2x^{(i-1)}}{\|A^2x^{(i-1)}\|}\frac{\|Ax^{(i-1)}\|}{\|Ax^{(i-1)}\|} = \dots = \frac{A^{i+1}x^{(0)}}{\|A^{i+1}x^{(0)}\|}. \tag{6.1}$$

Weiter gilt mit der Basisdarstellung von $x^{(0)}$:

$$A^i x^{(0)} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \lambda_j^i w_j = \alpha_n \lambda_n^i \left(w_n + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\alpha_j}{\alpha_n} \frac{\lambda_j^i}{\lambda_n^i} w_j \right). \tag{6.2}$$

Es gilt $|\lambda_j/\lambda_n| < 1$ für $j < n$, daher folgt:

$$A^i x^{(0)} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \lambda_j^i w_j = \alpha_n \lambda_n^i \left(w_n + o(1)\right).$$

Hieraus folgt durch Normierung:

$$\frac{A^i x^{(0)}}{\|A^i x^{(0)}\|} = \left(\frac{\alpha_n \lambda_n^i}{|\alpha_n \lambda_n^i|}\right) \frac{w_n}{\|w_n\|} + o(1) \to \beta w_n \quad (i \to \infty),$$

mit einem $\beta \in \mathbb{R}$. Die Iteration läuft in den Raum, der durch w_n aufgespannt wird. Für einen Vektor w, der Vielfaches eines Eigenvektors ist $w = sw_n$ gilt:

$$Aw = sAw_n = s\lambda_n w_n = \lambda_n w.$$

Diese vektorwertige Gleichung gilt in jeder Komponente, kann daher nach dem Eigenwert aufgelöst werden:

$$\lambda_n = \frac{[Aw]_k}{w_k}.$$

Wir fassen zusammen:

Satz 6.9 (Potenzmethode nach von Mises)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Matrix mit n linear unabhängigen Eigenvektoren $\{w_1,\dots,w_n\}$. Der betragsmäßig größte Eigenwert sei separiert $|\lambda_n| > |\lambda_{n-1}| \geq \dots \geq |\lambda_1|$. Es sei $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ein Startwert mit nichttrivialer Komponente in Bezug auf w_n. Für einen beliebigen Index $k \in \{1,\dots,n\}$ konvergiert die Iteration*

$$\tilde{x}^{(i)} = Ax^{(i-1)}, \quad x^{(i)} := \frac{\tilde{x}^{(i)}}{\|\tilde{x}^{(i)}\|}, \quad \lambda^{(i)} := \frac{\tilde{x}_k^{(i)}}{x_k^{(i-1)}},$$

gegen den betragsmäßig größten Eigenwert:

$$|\lambda^{(i)} - \lambda_n| = O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^i\right), \quad i \to \infty.$$

Beweis: Wir knüpfen an der Vorbereitung des Beweises (6.1) an. Es gilt:

$$\lambda^{(i)} = \frac{\tilde{x}_k^{(i)}}{x_k^{(i-1)}} = \frac{[Ax^{(i-1)}]_k}{x_k^{(i-1)}} = \frac{[A^i x^{(0)}]_k}{[A^{i-1}x^{(0)}]_k}.$$

Weiter, mit (6.2) gilt:

$$\begin{aligned}
\lambda^{(i)} &= \frac{a_n\lambda_n^i\left([w_n]_k + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{\alpha_j}{\alpha_n}\frac{\lambda_j^i}{\lambda_n^i}[w_j]_k\right)}{a_n\lambda_n^{i-1}\left([w_n]_k + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{\alpha_j}{\alpha_n}\frac{\lambda_j^{i-1}}{\lambda_n^{i-1}}[w_j]_k\right)} = \lambda_n\frac{[w_n]_k + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{\alpha_j}{\alpha_n}\frac{\lambda_j^i}{\lambda_n^i}[w_j]_k}{[w_n]_k + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{\alpha_j}{\alpha_n}\frac{\lambda_j^{i-1}}{\lambda_n^{i-1}}[w_j]_k} \\
&= \lambda_n\frac{[w_n]_k + \left(\frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n} + o(1)\right)\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^i[w_{n-1}]_k}{[w_n]_k + \left(\frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n} + o(1)\right)\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^{i-1}[w_{n-1}]_k} = \lambda_n\left(1 + O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^{i-1}\right)\right).
\end{aligned}$$

Die letzte Abschätzung nutzt für $0 < x < 1$ den Zusammenhang:

$$\frac{1+x^{i+1}}{1+x^i} = 1 + \frac{x^{i+1}-x^i}{1+x^i} = 1 + x^i\frac{x-1}{1+x^i} = 1 + O(|x|^i).$$

□

Die Potenzmethode ist eine sehr einfache und numerisch stabile Iteration. Sie kann allerdings nur den betragsmäßig größten Eigenwert ermitteln. Der Konvergenzbeweis kann verallgemeinert werden auf Matrizen, deren größter Eigenwert mehrfach vorkommt. Konvergenz gilt jedoch nur dann, wenn aus $|\lambda_n| = |\lambda_i|$ auch $\lambda_n = \lambda_i$ folgt. Es darf also nicht zwei verschiedene Eigenwerte geben, die beide den gleichen, größten Betrag annehmen. Dies schließt zum Beispiel den Fall zweier komplex konjugierter Eigenwerten λ und $\bar{\lambda}$ als beträgsgrößte aus.

Bemerkung 6.10 (Potenzmethode bei symmetrischen Matrizen)**.** *Die Potenzmethode kann im Fall symmetrischer Matrizen durch Verwenden des Rayleigh-Quotienten verbessert werden. Die Iteration*

$$\lambda^{(i)} = \frac{(Ax^{(i-1)}, x^{(i-1)})_2}{(x^{(i-1)}, x^{(i-1)})_2} = (\tilde{x}^{(i)}, x^{(i-1)})_2,$$

liefert die Fehlerabschätzung:

$$\lambda^{(i)} = \lambda_n + O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^{2i}\right).$$

Beispiel 6.11 (Potenzmethode nach von Mises)**.** *Es sei:*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix},$$

mit den Eigenwerten:

$$\lambda_1 \approx 0.80131, \quad \lambda_2 = 2.2865, \quad \lambda_3 = 4.9122.$$

Wir starten die Potenzmethode mit $x^{(0)} = (1,1,1)^T$ und wählen zur Normierung die Maximumsnorm. Weiter wählen wir als Index $k = 1$:

$$i = 1: \ \tilde{x}^{(1)} = Ax^{(0)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 7 \end{pmatrix}, \qquad x^{(1)} = \frac{\tilde{x}^{(1)}}{\|\tilde{x}^{(1)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.714 \\ 0.286 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(1)} = \frac{\tilde{x}_1^{(1)}}{x_1^{(0)}} \approx 5,$$

$$i = 2: \ \tilde{x}^{(2)} = Ax^{(1)} = \begin{pmatrix} 3.71 \\ 0.857 \\ 5.29 \end{pmatrix}, \qquad x^{(2)} = \frac{\tilde{x}^{(2)}}{\|\tilde{x}^{(2)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.702 \\ 0.162 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(2)} = \frac{\tilde{x}_1^{(2)}}{x_1^{(1)}} \approx 5.19,$$

$$i = 3: \ \tilde{x}^{(3)} = Ax^{(2)} = \begin{pmatrix} 3.57 \\ 0.621 \\ 5.03 \end{pmatrix}, \qquad x^{(3)} = \frac{\tilde{x}^{(3)}}{\|\tilde{x}^{(3)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.710 \\ 0.124 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(3)} = \frac{\tilde{x}_1^{(3)}}{x_1^{(2)}} \approx 5.077,$$

$$i = 4: \ \tilde{x}^{(4)} = Ax^{(3)} = \begin{pmatrix} 3.54 \\ 0.538 \\ 4.96 \end{pmatrix}, \qquad x^{(4)} = \frac{\tilde{x}^{(4)}}{\|\tilde{x}^{(4)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.715 \\ 0.108 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(4)} = \frac{\tilde{x}_1^{(4)}}{x_1^{(3)}} \approx 4.999,$$

$$i = 5: \ \tilde{x}^{(5)} = Ax^{(4)} = \begin{pmatrix} 3.54 \\ 0.502 \\ 4.93 \end{pmatrix}, \qquad x^{(5)} = \frac{\tilde{x}^{(5)}}{\|\tilde{x}^{(5)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.717 \\ 0.102 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(5)} = \frac{\tilde{x}_1^{(5)}}{x_1^{(4)}} \approx 4.950,$$

$$i = 6: \ \tilde{x}^{(6)} = Ax^{(5)} = \begin{pmatrix} 3.54 \\ 0.486 \\ 4.92 \end{pmatrix}, \qquad x^{(6)} = \frac{\tilde{x}^{(6)}}{\|\tilde{x}^{(6)}\|_\infty} \approx \begin{pmatrix} 0.719 \\ 0.0988 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^{(6)} = \frac{\tilde{x}_1^{(6)}}{x_1^{(5)}} \approx 4.930.$$

Neben der Festlegung auf den betragsgrößten Eigenwert hat die Potenzmethode den Nachteil sehr langsamer Konvergenz, falls die Eigenwerte nicht hinreichend separiert sind. Eine einfache Erweiterung der Potenzmethode ist die *Inverse Iteration nach Wieland* zur Berechnung des kleinsten Eigenwerts einer Matrix. Zur Herleitung verwenden wir die Tatsache, dass zu einem Eigenwert λ einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ durch λ^{-1} ein Eigenwert der inversen Matrix $A^{-1} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gegeben ist:

$$Aw = \lambda(A)w \quad \Leftrightarrow \quad A^{-1}w = \lambda(A)^{-1}w =: \lambda(A^{-1})w.$$

Die Potenzmethode, angewendet auf die inverse Matrix liefert den betragsgrößten Eigenwert $\lambda_{\max}(A^{-1})$ von A^{-1}. Der Kehrwert dieses Eigenwertes ist der betragskleinste Eigenwert der Matrix A selbst $\lambda_{\min}(A) = (\lambda_{\max}(A^{-1}))^{-1}$. Dieses Prinzip kann weiter verallgemeinert werden. Dazu sei $\lambda(A)$ ein Eigenwert mit zugehörigem Eigenvektor $w \in \mathbb{R}^n$ von A und $\sigma \in \mathbb{C}$ eine beliebige komplexe Zahl (jedoch kein Eigenwert von A). Dann gilt:

$$(A - \sigma I)w = (\lambda(A) - \sigma)w = \lambda(A - \sigma I)w \quad \Leftrightarrow \quad [A - \sigma I]^{-1}w = \lambda([A - \sigma I]^{-1})w,$$

Die Anwendung der Potenzmethode auf die Matrix $[A - \sigma I]^{-1}$ liefert nach vorangestellter Überlegung den betragskleinsten Eigenwert der Matrix $[A - \sigma I]$, d.h. den Eigenwert von A, der σ am nächsten liegt. Liegen nun Schätzungen für die Eigenwerte der Matrix A vor, so können die genauen Werte mit der Inversen Iteration mit Shift bestimmt werden. Die Gerschgorin-Kreise liefern oft einen guten Anhaltspunkt für σ.

Satz 6.12 (Inverse Iteration mit Shift)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre Matrix. Es sei $\sigma \in \mathbb{C}$. Für die Eigenwerte λ_i von A gelte:*

$$0 < |\lambda_1 - \sigma| < |\lambda_2 - \sigma| \le \cdots \le |\lambda_n - \sigma|.$$

Es sei $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ein geeigneter normierter Startwert. Für $i = 1, 2, \dots$ konvergiert die Iteration

$$[A - \sigma I]\tilde{x}^{(i)} = x^{(i-1)}, \quad x^{(i)} := \frac{\tilde{x}^{(i)}}{\|\tilde{x}^{(i)}\|}, \quad \mu^{(i)} := \frac{\tilde{x}_k^{(i)}}{x_k^{(i-1)}}, \quad \lambda^{(i)} := \sigma + (\mu^{(i)})^{-1},$$

für jeden Index $k \in \{1, \dots, n\}$ gegen den Eigenwert λ_1 von A:

$$|\lambda_1 - \lambda^{(i)}| = O\left(\left|\frac{\lambda_1 - \sigma}{\lambda_2 - \sigma}\right|^i\right).$$

Beweis: Der Beweis ist eine einfache Folgerung aus Satz 6.9. Falls σ kein Eigenwert von A ist, so ist $B := A - \sigma I$ invertierbar. Die Matrix B^{-1} hat die Eigenwerte $\mu_1, \dots, \mu_n$, mit

$$\mu_i = (\lambda_i - \sigma)^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_i = \mu_i^{-1} + \sigma. \tag{6.3}$$

Für diese gilt nach Voraussetzung:

$$|\mu_1| > |\mu_2| \ge \cdots \ge |\mu_n| > 0.$$

Die Potenzmethode, Satz 6.9, angewandt auf die Matrix B^{-1} liefert eine Approximation für μ_1:

$$|\mu^{(i)} - \mu_1| = O\left(\left|\frac{\mu_2}{\mu_1}\right|^i\right).$$

Die gewünschte Aussage folgt mit (6.3). □

In jedem Schritt der Iteration muss ein Lineares Gleichungssystem $[A - \sigma I]\tilde{x} = x$ gelöst werden. Dies geschieht am besten mit einer Zerlegungsmethode, etwa der LR-Zerlegung der Matrix. Die Zerlegung kann einmal in $O(n^3)$ Operationen erstellt werden, anschließend sind in jedem Schritt der Iteration weitere $O(n^2)$ Operationen für das Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen notwendig. Die Konvergenzgeschwindigkeit der Inversen Iteration mit Shift kann durch eine gute Schätzung σ gesteigert werden. Eine weitere Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit kann durch ständiges Anpassen der Schätzung σ erreicht werden. Wird in jedem Schritt die beste Approximation $\lambda^{(i)} = \sigma + 1/\mu^{(i)}$ als neue Schätzung verwendet, so kann mindestens superlineare Konvergenz erreicht werden. Hierzu wählen wir: $\sigma^{(0)} = \sigma$ und iterieren

$$\sigma^{(i)} = \sigma^{(i-1)} + \frac{1}{\mu^{(i)}}.$$

Jede Modifikation des Shifts ändert jedoch das lineare Gleichungssystem und erfordert die erneute (teure) Erstellung der LR-Zerlegung.

Beispiel 6.13 (Inverse Iteration mit Shift nach Wieland)**.** *Es sei:*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -0.1 & 0.4 \\ 0.3 & -1 & 0.4 \\ 0.2 & -0.1 & 4 \end{pmatrix}$$

mit den Eigenwerten:

$$\lambda_1 = 1.954, \quad \lambda_2 \approx -0.983, \lambda_3 = 4.029.$$

Wir wollen alle Eigenwerte mit der inversen Iteration mit Shift bestimmen. Startwerte erhalten wir durch Analyse der Gerschgorin-Kreise:

$$K_1 = K_{0.5}(2), \quad K_2 = K_{0.2}(-1), \quad K_3 := K_{0.3}(4).$$

Die drei Kreise sind disjunkt und wir wählen als Shift in der Inversen Iteration $\sigma_1 = 2$, $\sigma_2 = -1$ sowie $\sigma_3 = 4$. Die Iteration wird stets mit $v = (1,1,1)^T$ und Normierung bezüglich der Maximumsnorm gestartet. Wir erhalten bei Wahl der ersten Komponente zur Berechnung der μ die Näherungen:

$$\begin{array}{rllll} \sigma_1 = 2: & \mu_1^{(1)} = -16.571, & \mu_1^{(2)} = -21.744, & \mu_1^{(3)} = -21.619, & \mu_1^{(4)} = -21.622, \\ \sigma_2 = -1: & \mu_2^{(1)} = 1.840, & \mu_2^{(2)} = 49.743, & \mu_2^{(3)} = 59.360, & \mu_2^{(4)} = 59.422, \\ \sigma_3 = 4: & \mu_3^{(1)} = 6.533, & \mu_3^{(2)} = 36.004, & \mu_3^{(3)} = 33.962, & \mu_3^{(4)} = 33.990. \end{array}$$

Diese Approximationen ergeben die folgenden Eigenwert-Näherungen:

$$\lambda_1 = \sigma_1 + 1/\mu_1^{(4)} \approx 1.954, \quad \lambda_2 = \sigma_2 + 1/\mu_2^{(4)} \approx -0.983, \quad \lambda_3 = \sigma_3 + 1/\mu_3^{(4)} \approx 4.029.$$

Alle drei Näherungen sind in den ersten wesentlichen Stellen exakt.

Das Beispiel demonstriert, dass die inverse Iteration mit Shift zu einer wesentlichen Beschleunigung der Konvergenz führt, falls gute Schätzungen der Eigenwerte vorliegen.

6.4. Das QR-Verfahren

Wir haben bereits die QR-Zerlegung einer Matrix A in eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sowie eine rechte obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ kennengelernt. Das QR-Verfahren zur Berechnung der Eigenwerte von A beruht auf der folgenden Beobachtung:

$$A = QR = QR(QQ^T) = Q(RQ)Q^T, \tag{6.4}$$

d.h., die Matrix A ist orthogonal ähnlich zur Matrix RQ, hat also die gleichen Eigenwerte wie diese. Wir definieren:

Algorithmus 6.14 (QR-Verfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Ausgehend von $A^{(1)} := A$ iteriere für $i = 1, \dots$*

1. *Erstelle die QR-Zerlegung*
$$A^{(i)} =: Q^{(i)}R^{(i)},$$
2. *Berechne*
$$A^{(i+1)} := R^{(i)}Q^{(i)}.$$

Das QR-Verfahren erzeugt eine Folge $A^{(i)}, i \geq 1$ von Matrizen, die gemäß (6.4) alle ähnlich zur Matrix A sind. Wir werden sehen, dass die Diagonaleinträge der Folgenglieder $A^{(i)}$ gegen die Eigenwerte der Matrix A laufen.

Satz 6.15 (QR-Verfahren zur Eigenwertberechnung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Matrix mit separierten Eigenwerten*
$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|.$$
Dann gilt für die Diagonalelemente $a_{ii}^{(t)}$ der durch das QR-Verfahren erzeugten Matrizen $A^{(t)}$:
$$\{\alpha_{11}^{(t)}, \dots, \alpha_{nn}^{(t)}\} \to \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} \quad (t \to \infty).$$

Beweis: Für den technisch aufwändigen Beweis verweisen wir auf [10] oder [7]. □

Im Allgemeinen konvergieren die Diagonalelemente der Folgenglieder $A^{(i)}$ mindestens linear gegen die Eigenwerte. In speziellen Fällen wird jedoch sogar kubische Konvergenz erreicht. Verglichen mit der Potenzmethode und der inversen Iteration weist das QR-Verfahren daher zum einen bessere Konvergenzeigenschaften auf, gleichzeitig werden alle Eigenwerte der Matrix A bestimmt. In jedem Schritt der Iteration muss jedoch eine QR-Zerlegung der Iterationsmatrix $A^{(i)}$ erstellt werden. Bei allgemeiner Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

sind hierzu $O(n^3)$ arithmetische Operationen notwendig. Um die Eigenwerte mit hinreichender Genauigkeit zu approximieren sind oft sehr viele, > 100 Schritte notwendig. In der praktischen Anwendung wird das QR-Verfahren daher immer in Verbindung mit einer *Reduktionsmethode* (siehe folgender Abschnitt) eingesetzt, bei der die Matrix A zunächst in eine "einfache" ähnliche Form transformiert wird.

Bemerkung 6.16 (LR-Verfahren)**.** *Wie das QR-Verfahren liefert auch das* LR-Verfahren*:*

$$A^{(i)} =: L^{(i)}R^{(i)}, \quad A^{(i+1)} := R^{(i)}L^{(i)},$$

eine Folge von Matrizen $A^{(i)}$, deren Diagonalelemente gegen die Eigenwerte der Matrix A konvergieren. Das LR-Verfahren zur Eigenwertberechnung konvergiert nur dann, wenn die LR-Zerlegung ohne Pivotisierung durchgeführt werden kann. Daher wird bei allgemeinen Matrizen üblicherweise das QR-Verfahren bevorzugt.

6.5. Reduktionsmethoden

Das Erstellen der QR-Zerlegung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit Hilfe von Householder-Matrizen bedarf $O(n^3)$ arithmetischer Operationen, siehe Satz 4.15. Da in jedem Schritt des QR-Verfahrens diese Zerlegung neu erstellt werden muss, ist dieser Aufwand zu groß. Hat die Matrix A jedoch eine spezielle Struktur, ist sie z.B. eine Bandmatrix, so kann auch die QR-Zerlegung mit weit geringerem Aufwand erstellt werden. Es gilt:

Satz 6.17 (Ähnliche Matrizen)**.** *Zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ heißen* ähnlich*, falls es eine reguläre Matrix $S \in \mathbb{C}^{n\times n}$ gibt, so dass gilt:*

$$A = S^{-1}BS.$$

Ähnliche Matrizen haben das gleiche charakteristische Polynom und die gleichen Eigenwerte. Zu einem Eigenwert λ sowie Eigenvektor w von A gilt:

$$B(Sw) = S(Aw) = \lambda Sw.$$

Ziel dieses Kapitels ist es durch Ähnlichkeitstransformationen

$$A = A^{(0)} \quad \to \quad A^{(i)} = (S^{(i)})^{-1}A^{(i)}S^{(i)},$$

die Matrix A Schritt für Schritt in eine ähnliche Matrix (also mit den gleichen Eigenwerten) zu transformieren, die eine einfache Struktur hat, so dass die Eigenwerte leichter zu bestimmen, oder sogar direkt ablesbar sind. Mögliche *Normalformen*, bei denen die Eigenwerte unmittelbar ablesbar sind, sind die *Jordan'sche Normalform*, die Diagonalisierung von A, oder die *Schur'sche Normalform*:

Definition 6.18 (Schur'sche Normalform). *Die Matrix $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ habe die Eigenwerte $\lambda_1,\dots,\lambda_n$ (ihrer Vielfachheit gezählt). Dann existiert eine unitäre Matrix $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$, so dass*

$$\bar{U}^T AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & \cdots & * \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Falls A hermitesch ist (also $\bar{A}^T = A$), so ist $\bar{U}^T AU$ auch hermitesch, also eine Diagonalmatrix.

Die Aufgabe, eine Matrix A in eine Normalform zu transformieren, ist üblicherweise nur bei Kenntnis der Eigenwerte möglich. Dieser Weg eignet sich somit nicht zur Eigenwertberechnung. Daher werden wir im Folgenden die Reduktion der Matrix A auf eine Normalform kennenlernen, bei der die Eigenwerte zwar nicht unmittelbar abgelesen werden, die QR-Zerlegung jedoch mit sehr geringem Aufwand erstellt werden kann. Diese reduzierte Normalform dient dann als Grundlage für das QR-Verfahren zur Eigenwertberechnung. Wir definieren:

Satz 6.19 (Hessenberg-Normalform). *Zu jeder Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$, so dass*

$$Q^T AQ = \begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & \cdots & * \\ * & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * & * \end{pmatrix},$$

eine Hessenberg-Matrix *ist, also eine rechte obere Dreiecksmatrix, die zusätzlich eine untere Nebendiagonale besitzt. Falls symmetrisch ist (also $A^T = A$), so ist $Q^T AQ$ eine Tridiagonalmatrix.*

Beweis: Die Konstruktion der Hessenberg-Matrix erfolgt ähnlich der QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen. Um Ähnlichkeitstransformationen sicherzustellen müssen wir die orthogonalen Householder-Matrizen $S^{(i)}$ jedoch von links und rechts an die Matrix A multiplizieren.

Wir beschreiben den ersten Schritt. Es seien $A = (a_1,\dots,a_n)$ die Spaltenvektoren von A. Wir bestimmen den Vektor $v^{(1)} = (0, v_2^{(1)},\dots,v_n^{(1)})^T$ so, dass mit $S^{(1)} = I - 2v^{(1)}(v^{(1)})^T$ gilt

$$S^{(1)} a_1 \in \operatorname{span}(e_1, e_2).$$

Hierzu wählen wir eine Householder-Transformation mit Vektor

$$v^{(1)} = \frac{\tilde{a}_1 + \|\tilde{a}_1\| e_2}{\| \tilde{a}_1 + \|\tilde{a}_1\| e_2 \|},$$

wobei $\tilde{a}_1 = (0, a_{21}, \dots, a_{n1})$ der reduzierte erste Spaltenvektor ist. Dann gilt mit $S^{(1)} = I - 2v^{(1)}(v^{(1)})^T$ mit $S^{(1)} = (S^{(1)})^T$:

$$A^{(1)} = S^{(1)} A (S^{(1)})^T = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \hline * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{array}\right) \cdot S^{(1)} =: \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11} & * & \cdots & * \\ \hline * & & & \\ \hline 0 & & \tilde{A}^{(1)} & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{array}\right), \quad \tilde{A}^{(1)} \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}.$$

Im zweiten Schritt wird das entsprechende Verfahren auf die Matrix $\tilde{A}^{(1)}$ angewendet. Nach $n-2$ Schritten erhalten wir die Matrix $A^{(n-2)}$, welche Hessenberg-Gestalt hat.

$$Q^T A Q := \underbrace{S^{(n-2)} \cdots S^{(1)}}_{=:Q^T} A \underbrace{S^{(1)} \cdots S^{(n-2)}}_{=:Q}$$

Im Falle $A = A^T$ gilt:

$$(Q^T A Q)^T = Q^T A^T Q = Q^T A Q.$$

D.h., auch $A^{(n-2)}$ ist wieder symmetrisch. Symmetrische Hessenberg-Matrizen sind Tridiagonalmatrizen. □

Bemerkung 6.20 (Hessenberg-Normalform)**.** *Die Transformation einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ in Hessenberg-Normalform erfordert bei Verwendung der Householder-Transformationen $\frac{5}{3}n^3 + O(n^2)$ arithmetische Operationen. Im Fall symmetrischer Matrizen erfordert die Transformation in eine Tridiagonalmatrix $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$ Operationen.*

Die Transformation in Hessenberg-Normalform benötigt demnach etwas mehr arithmetische Operationen als *eine* QR-Zerlegung. Im Anschluss können die QR-Zerlegungen einer Hessenberg-Matrix mit weitaus geringerem Aufwand erstellt werden. Weiter gilt, dass für die QR-Zerlegung einer Hessenberg-Matrix A gilt, dass die Matrix RQ wieder Hessenberg-Gestalt hat. Beides fasst der folgende Satz zusammen:

Satz 6.21 (QR-Zerlegung von Hessenberg-Matrizen)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Hessenberg-Matrix. Dann kann die QR-Zerlegung $A = QR$ mit Householder-Transformationen in $2n^2 + O(n)$ arithmetische Operationen durchgeführt werden. Die Matrix RQ hat wieder Hessenberg-Gestalt.*

Beweis: Es gilt $a_{ij} = 0$ für $i > j + 1$. Wir zeigen induktiv, dass diese Eigenschaft für alle Matrizen $A^{(i)}$ gilt, die im Laufe der QR-Zerlegung entstehen. Zunächst folgt im ersten Schritt für $v^{(1)} = a_1 + \|a_1\| e_1$, dass $v_k^{(1)} = 0$ für alle $k > 2$. Die neuen Spaltenvektoren berechnen sich zu:

$$a_i^{(1)} = a_i - (a_i, v^{(1)}) v^{(1)}. \tag{6.5}$$

Da $v_k^{(1)} = 0$ für $k > 2$ gilt $(a_i^{(1)})_k = 0$ für $k > i+1$, d.h. $A^{(1)}$ hat wieder Hessenberg-Normalform. Diese Eigenschaft gilt induktiv für $i = 2, \dots, n-1$.

Da der (reduzierte) Vektor $\tilde{v}^{(i)}$ in jedem Schritt nur zwei von Null verschiedene Einträge hat, kann dieser in 2 arithmetischen Operationen erstellt werden. Die Berechnung der $n-i$ neuen Spaltenvektoren gemäß (6.5) bedarf je 4 arithmetischer Operationen. Insgesamt ergibt sich ein Aufwand von

$$\sum_{i=1}^{n-1} 2 + 4(n-i) = 2n^2 + O(n).$$

Es bleibt (als Übung) die Hessenberg-Gestalt der Matrix $A' := RQ$ nachzuweisen. $\square$

In Verbindung mit der Reduktion auf Hessenberg, bzw. auf Tridiagonalgestalt ist das QR-Verfahren eines der effizientesten Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Die QR-Zerlegung kann in $O(n^2)$ Operationen durchgeführt werden, und im Laufe des QR-Verfahrens entstehen ausschließlich Hessenberg-Matrizen.

Die Konvergenz des QR-Verfahrens hängt von der Separation der Eigenwerte $|\lambda_i|/|\lambda_{i+1}|$ ab. Je weiter die Eigenwerte voneinander entfernt sind, umso besser konvergiert das Verfahren. Im allgemeinen kann lineare Konvergenz gezeigt werden. In speziellen Fällen kann jedoch sogar kubische Konvergenz der Diagonalelemente $A_{ii}^{(t)}$ gegen die Eigenwerte gezeigt werden.

Wie die Inverse Iteration kann das QR-Verfahren durch Einführen eines *Shifts* beschleunigt werden. Mit Koeffizienten μ_i wird die Iteration ersetzt durch die Vorschrift:

$$A^{(i-1)} - \mu_i I = Q^{(i)} R^{(i)}, \quad A^{(i)} := R^{(i)} Q^{(i)} + \mu_i I.$$

Abschließend betrachten wir hierzu ein Beispiel:

Beispiel 6.22 (Eigenwert-Berechnung mit Reduktion und QR-Verfahren)**.** *Wir betrachten die Matrix*

$$A = \begin{pmatrix} 338 & -20 & -90 & 32 \\ -20 & 17 & 117 & 70 \\ -90 & 117 & 324 & -252 \\ 32 & 70 & -252 & 131 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix A ist symmetrisch und hat die Eigenwerte:

$$\lambda_1 \approx 547.407, \quad \lambda_2 \approx 297.255, \quad \lambda_3 \approx -142.407, \quad \lambda_4 \approx 107.745.$$

Schritt 1: Reduktion auf Hessenberg- (Tridiagonal)-Gestalt.

Im ersten Reduktionsschritt wählen wir mit $\tilde{a}_1 = (0, -20, -90, 32)$ den Spiegelungsvektor $v^{(1)}$ als:

$$v^{(1)} = \frac{\tilde{a}_1 - \|\tilde{a}_1\| e_2}{\| \tilde{a}_1 - \|\tilde{a}_1\| e_2 \|}.$$

Wir erhalten mit $S^{(1)} := I - 2v^{(1)}(v^{(1)})^T$*:*

$$A^{(1)} = S^{(1)}AS^{(1)} = \begin{pmatrix} 338 & 97.591 & 0 & 0 \\ 97.591 & 477.579 & 27.797 & 106.980 \\ 0 & 27.797 & -82.345 & -103.494 \\ 0 & 106.980 & -103.494 & 76.765 \end{pmatrix}.$$

Mit $\tilde{a}_2^{(1)} = (0, 0, 27.797, 106.980)^T$ *und*

$$v^{(2)} = \frac{\tilde{a}_2 + \|\tilde{a}_2\|e_3}{\| \tilde{a}_2 + \|\tilde{a}_2\|e_3\|}$$

folgt mit $S^{(2)} := I - 2v^{(2)}(v^{(2)})^T$*:*

$$H := A^{(2)} = S^{(2)}A^{(1)}S^{(2)} = \begin{pmatrix} 338 & 97.591 & 0 & 0 \\ 97.591 & 477.579 & -110.532 & 0 \\ 0 & -110.532 & 16.231 & -129.131 \\ 0 & 0 & -129.131 & -21.900 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix H *hat nun Tridiagonalgestalt. Alle Transformationen waren Ähnlichkeitstransformationen. Daher haben* H *und* A *die gleichen Eigenwerte.*

Schritt 2: QR-Verfahren

Wir führen nun einige Schritte des QR-Verfahrens durch, verzichten dabei auf die Zwischenschritte zum Erstellen der QR-Zerlegung. Es sei $A^{(1)} := H$*. Dann ist:*

$$A^{(1)} = Q^{(1)}R^{(1)} \qquad A^{(2)} = R^{(1)}Q^{(1)} = \begin{pmatrix} 400.759 & 123.634 & 0 & 0 \\ 123.634 & 441.338 & 32.131 & 0 \\ 0 & 32.131 & -42.082 & -122.498 \\ 0 & 0 & -122.498 & 9.985 \end{pmatrix}$$

$$A^{(2)} = Q^{(2)}R^{(2)} \qquad A^{(3)} = R^{(2)}Q^{(2)} = \begin{pmatrix} 473.938 & 113.971 & 0 & 0 \\ 113.971 & 370.411 & -10.831 & 0 \\ 0 & -10.831 & -74.680 & -111.053 \\ 0 & 0 & -111.053 & 40.331 \end{pmatrix}$$

$$A^{(3)} = Q^{(3)}R^{(3)} \qquad A^{(4)} = R^{(3)}Q^{(3)} = \begin{pmatrix} 520.095 & 78.016 & 0 & 0 \\ 78.016 & 324.515 & 4.350 & 0 \\ 0 & 4.350 & -98.717 & -94.942 \\ 0 & 0 & -94.942 & 64.105 \end{pmatrix}$$

$$A^{(4)} = Q^{(4)}R^{(4)} \qquad A^{(5)} = R^{(4)}Q^{(4)} = \begin{pmatrix} 538.682 & 45.895 & 0 & 0 \\ 45.895 & 305.970 & -1.926 & 0 \\ 0 & -1.926 & -115.400 & -77.620 \\ 0 & 0 & -77.620 & 80.747 \end{pmatrix}$$

$$\vdots$$

$$A^{(9)} = Q^{(9)}R^{(9)} \qquad A^{(10)} = R^{(9)}Q^{(9)} = \begin{pmatrix} 547.387 & 2.245 & 0 & 0 \\ 2.245 & 297.275 & 0.0453 & 0 \\ 0 & 0.0453 & -140.561 & -21.413 \\ 0 & 0 & -21.413 & 105.898 \end{pmatrix}.$$

Für die Diagonalelemente gilt:

$$a_{11}^{(10)} \approx 547.387, \quad a_{22}^{(10)} \approx 297.275, \quad a_{33}^{(10)} \approx -140.561, \quad a_{44}^{(10)} \approx 105.898.$$

Diese Diagonalelemente stellen sehr gute Näherungen an alle *Eigenwerte der Matrix A dar:*

$$\frac{|a_{11}^{(10)} - \lambda_1|}{|\lambda_1|} \approx 3.58{\cdot}10^{-5}, \quad \frac{|a_{22}^{(10)} - \lambda_2|}{|\lambda_2|} \approx 0.00007, \quad \frac{|a_{33}^{(10)} - \lambda_3|}{|\lambda_3|} \approx 0.01, \quad \frac{|a_{44}^{(10)} - \lambda_4|}{|\lambda_4|} \approx 0.01.$$

Der Fehler für λ_3 und λ_4 ist größer, da diese Eigenwerte weniger separiert sind.

Teil II.

Numerische Methoden der Analysis

7. Nullstellenbestimmung

Die Analysis befasst sich mit Folgen und Reihen sowie mit Funktionen im Raum der reellen Zahlen $\mathbb{R}$. Dabei geht es um Begriffe wie Konvergenz, Approximation, Stetigkeit, Differenzierbarkeit und Integration. Numerische Anwendungen der Analysis werden sich im Wesentlichen mit der konkreten Berechnung und Bestimmung dieser Größen befassen. Der Zwischenwertsatz sagt etwa, dass die Funktion

$$f(x) = x(1 + \exp(x)) + 10 \sin(3 + \log(x^2 + 1)) \tag{7.1}$$

im Intervall $[-10, 10]$ mindestens eine Nullstelle hat. Denn es gilt (nachrechnen!)

$$x > 10 \;\Rightarrow\; f(x) > 0, \quad x < -10 \;\Rightarrow\; f(x) < 0.$$

Die konkrete Berechnung dieser oder möglicherweise mehrerer dieser Nullstellen hingegen kann schon bei sehr einfachen Funktionen äußerst aufwändig sein. Hier kommt die numerische Mathematik ins Spiel. Aus der Stetigkeit von f können wir folgern, dass das Integral

$$I_{ab}(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x,$$

existiert. Die konkrete Berechnung eines Integrals, etwa

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x,$$

ist jedoch schwer. Analytische Hilfsmittel schlagen oft fehl. In den Numerischen Methoden der Analysis werden wir uns mit Lösungsverfahren für diese Probleme befassen: Finden von Nullstellen, Berechnen von Integralen und Ableitungen, Approximation von Funktionen. Dabei wird die Numerik im Allgemeinen nicht in der Lage sein, exakte Lösungen anzugeben, sondern im Allgemeinen Näherungen an z.B. die Nullstelle angeben. Ein einfachstes numerisches Verfahren zur Approximation von Nullstellen beruht unmittelbar auf dem Zwischenwertsatz. Falls für eine stetige Funktion gilt $f(a) < 0$ und $f(b) > 0$, so muss es ein $z \in (a, b)$ geben mit $f(z) = 0$. Dies ist die Basis zur Intervallschachtelung. Das Intervall (a, b) wird stets halbiert und zwar so, dass die Funktion f an den Intervallenden ein unterschiedliches Vorzeichen ausweist. Angewendet auf (7.1) gilt

$a = -3$	$b = 3$	$f(a) \approx -11.45$	$f(b) \approx 54.95$	$f((a+b)/2) \approx 1.41$
$a = -3$	$b = 0$	$f(a) \approx -11.45$	$f(b) \approx 1.41$	$f((a+b)/2) \approx -10.44$
$a = -1.5$	$b = 0$	$f(a) \approx -10.44$	$f(b) \approx 1.41$	$f((a+b)/2) \approx -4.10$
$a = -0.75$	$b = 0$	$f(a) \approx -4.10$	$f(b) \approx 1.41$	$f((a+b)/2) \approx -0.53$
$a = -0.375$	$b = 0$	$f(a) \approx -0.53$	$f(b) \approx 1.41$	$f((a+b)/2) \approx 0.73$
$a = -0.375$	$b = -0.1875$	$f(a) \approx -0.53$	$f(b) \approx 0.73$	$f((a+b)/2) \approx 0.16$
$a = -0.375$	$b = -0.28125$	$\cdots$		

Eine Nullstelle muss also im (jetzt recht kleinen) Intervall $(-0.375, -0.28125)$ liegen.

7.1. Motivation

Das Lösen von nichtlinearen Gleichungen spielt eine grundlegende Rolle in der Mathematik. Oft werden solche Aufgabenstellungen als Nullstellenproblem formuliert. Die Nullstellenbestimmung von linearen und quadratischen Polynomen ist das einfachste Beispiel und bereits aus der Schule bekannt. Insbesondere kann hierfür noch eine geschlossene Formel (Auflösen nach der Variablen, p-q-Formel, quadratische Ergänzung) angegeben werden. Aber schon bei Gleichungen dritten Grades gibt es keine geschlossene Lösungsformel.

Um diese Art von Gleichungen (numerisch) zu lösen, formulieren wir die Aufgabe als Nullstellensuche (vergleiche zur p-q-Formel). Dies bedeutet, dass wir eine Nullstelle der Abbildung (Funktion)

$$f : D(f) \to \mathbb{R},$$

suchen, wobei $D(f) \subset \mathbb{R}$ den Definitionsbereich von f bezeichnet. Jede nichtlineare Gleichung

$$g(x) = y$$

kann durch die Transformation $f(x) := g(x) - y$ als eine Nullstellenaufgabe geschrieben werden:

$$f(x) = 0.$$

Das allgemeine Nullstellenproblem muss meist mit einem *Iterationsverfahren* gelöst werden. Ausgehend von einem Startwert x_0, der zufällig gewählt sein kann besser aber systematisch bestimmt werden sollte, erhalten wir mit Hilfe der Iterationsvorschrift eine Folge von Punkten $x_k, k = 1, 2, 3, \ldots$, deren Grenzwert gegen die Nullstelle $\hat{x} \in \mathbb{R}$ konvergiert:

$$f(x_0) \to f(x_1) \to f(x_2) \cdots \to f(\hat{x}) = 0.$$

In der Praxis kann der unendliche Grenzprozess nicht durchgeführt werden. Stattdessen wird die Iteration bei einem $N \in \mathbb{N}$ gestoppt und das Folgenglied x_N wird als Approximation der Nullstelle $x_N \approx \hat{x}$ betrachtet. Hieraus ergeben sich unmittelbar wichtige Fragenstellungen, die wir in diesem Kapitel untersuchen wollen und uns in den weiteren Kapiteln wieder begegnen werden. Im Einzelnen sind dies:

- Im Sinne des ersten Kapitels 1: Welche Aussagen können wir zur Stabilität und der Konditionierung der Nullstellenbestimmung machen?
- Konstruktion eines *effizienten* numerischen Verfahrens.
- Wie schnell konvergiert $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ gegen $\hat{x}$? Das bedeutet insbesondere die Quantifizierung der *Konvergenzordnung* und der *Konvergenzrate* (Maße für die Konvergenzgeschwindigkeit). In Analysis I/II haben wir bisher immer von einer Folge $x_k \to \hat{x}$ gesprochen, die gegen den Grenzwert konvergiert. Diese Aussage ist in der Praxis aber nutzlos, da wir in endlicher Rechenzeit eine Lösung erhalten möchten.
- Konvergiert das ausgewählte numerische Verfahren auf beliebig großen Intervallen und mit beliebig gewählten Startwerten x_0, oder nur dann, wenn der Startwert x_0 bereits hinreichend nahe an der gesuchten Nullstelle ist? In anderen Worten: ist das Verfahren *lokal* oder *global* konvergent?
- Abschätzung der zu erwartenden Konvergenz mittels einer aussagekräftigen Fehlerschranke für die Approximation $|x_N - \hat{x}|$. Hier werden wir zwischen der *a priori* und *a posteriori* Fehleranalyse unterscheiden. Bei der a priori Fehleranalyse wird der Fehler $|x_N - \hat{x}|$ *vor* der Rechnung abgeschätzt. Dies gibt dem Numeriker eine grobe Schranke zum Verhalten der Fehlerentwicklung, die aber nur asymptotisch richtig ist - und somit für quantitative Aussagen oft nutzlos ist. Dagegen wird bei der a posteriori Fehleranalyse der Fehler $|x_N - \hat{x}|$ während der Rechnung abgeschätzt, alle bereits berechneten Approximation $x_0, x_1, \dots, x_N$ können in die Abschätzung einfließen. A posteriori Abschätzungen lassen oft quantitative Aussagen zu, die zur Steuerung des numerischen Verfahrens genutzt werden können.

Im Rest dieses Kapitels werden wir die oben genannten Fragen anhand verschiedener Verfahren diskutieren und die Schlüsselbegriffe spezifizieren.

Generell lassen sich die Verfahren zur Nullstellensuche in ableitungsfreie Verfahren (z.B. Intervallschachtelung, Sekantenmethode, sukzessive Approximation) und ableitungsbehaftete Verfahren einteilen (Newton-artige Verfahren). Exemplarisch betrachten wir dazu die Intervallschachtelung und das klassische Newton-Verfahren. Weitere Verfahren werden am Ende des Kapitels zusammenfassend mit Hinweisen auf weiterführende Literatur erläutert.

7.2. Stabilität und Kondition

Wir werden zunächst auf die Konditionierung der Nullstellensuche und auf Stabilität von Algorithmen eingehen. Als Beispiel seien Polynome zweiten Grades gewählt. Hier liegt mit der *p*-*q*-Formel ein direktes Lösungsverfahren zur Nullstellenberechnung vor.

Wir unterscheiden vier Situationen, wie in Abbildung 7.1 skizziert:

1. Stabile Situation: die beiden Nullstellen liegen hinreichend weit auseinander.
2. Doppelte Nullstelle, d.h. $f(\hat{x}) = f'(\hat{x}) = 0$.

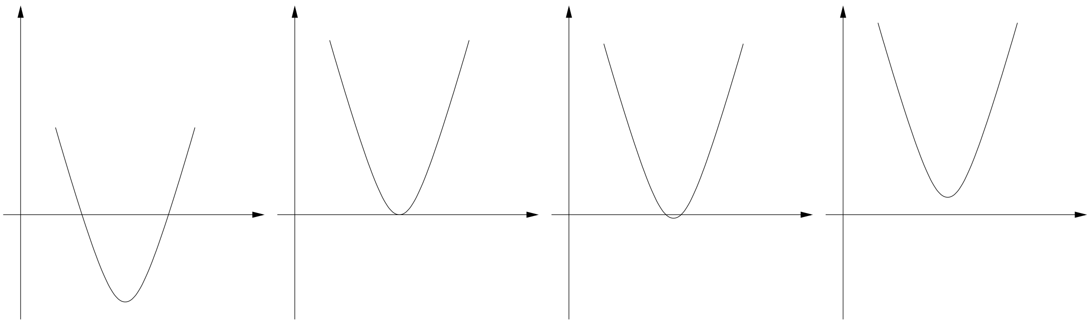


Abbildung 7.1.: Die vier möglichen Situationen bei der Nullstellensuche quadratischer Funktionen: stabile Situation, doppelte Nullstelle, zwei Nullstellen nah beieinander und keine reellen Nullstellen.

3. Zwei sehr nah beieinander liegende Nullstellen.
4. Keine reelle Nullstelle.

Beispiel 7.1 (Konditionierung der p-q-Formel)**.** *Wir berechnen die Konditionierung der Nullstellenberechnung mit der p-q-Formel in Abhängigkeit von den Koeffizienten und werden dabei die vier beschriebenen Fälle betrachten. Dazu sei*

$$f(x) = x^2 - px + q = 0, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Für die Nullstellen $x_{1,2}$ gilt

$$x_{1,2} = x_{1,2}(p,q) = \frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

und wegen $f(x) = (x - x_1)(x - x_2)$ auch $p = x_1 + x_2$ sowie $q = x_1 \cdot x_2$ (Satz von Vieta). Die Konditionszahlen werden berechnet durch:

$$\begin{aligned} k_{11} &= \frac{\partial x_1}{\partial p}\frac{p}{x_1} = \frac{1 + x_2/x_1}{1 - x_2/x_1}, \qquad & k_{21} &= -\frac{\partial x_1}{\partial p}\frac{p}{x_1} = \frac{1 + x_2/x_1}{1 - x_2/x_1}, \\ k_{12} &= \frac{\partial x_1}{\partial q}\frac{q}{x_1} = \frac{-x_2/x_1}{1 - x_2/x_1}, \qquad & k_{22} &= \frac{\partial x_1}{\partial q}\frac{q}{x_1} = \frac{1}{1 - x_2/x_1}. \end{aligned}$$

Die Berechnung der Nullstellen x_1, x_2 ist demnach schlecht konditioniert, falls $x_1/x_2 \sim 1$, d.h. wenn die Nullstellen nahe beieinander liegen. In diesem Fall können die Konditionszahlen beliebig groß werden.

Beispiel 7.2. *Das vorherige Beispiel wird mit konkreten Zahlenwerten weitergeführt. Es sei $p = 4$ und $q = 3.9999$:*

$$f(x) = x^2 - 4x + 3.9999 = 0,$$

mit den Nullstellen $x_{1,2} = 2 \pm 0.01$. Dann gilt für die Konditionzahl

$$|k_{12}| = \left| \frac{1}{1 - x_1/x_2} \right| = 99.5.$$

Das entspricht einer möglichen Fehlerverstärkung um den Faktor 100. *Bei einer Störung von p um* 1% *zu* $\tilde{p} = 4.04$ *erhalten wir die gestörten Nullstellen*

$$\tilde{x}_1 \approx 2.304, \quad \tilde{x}_2 \approx 1.736,$$

mit relativen Fehlern von etwa 15%.

Bei einer Störung von p um minus 1% *zu* $\tilde{p} = 3.96$ *erhalten wir keine reellen Nullstellen mehr - sondern die komplexen Nullstellen*

$$\tilde{x}_1 \approx 1.98 \pm 0.28196i.$$

Die Nullstellenbestimmung kann also sehr schlecht konditioniert sein, falls die beiden Nullstellen nahe beieinander liegen. Wir untersuchen nun die Stabilität des p/q Verfahrens zur Berechnung der Nullstellen im gut konditionierten Fall, d.h. im Fall von weit separierten Nullstellen. Es sei also ein Polynom

$$f(x) = x^2 - px + q,$$

mit $|q| \ll p^2/4$ gegeben. Die beiden Lösungen lauten:

$$x_{1,2} = \frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q},$$

also $x_1 \approx p$ und $x_2 \approx 0$. Aus den vorherigen Beispielen haben wir gelernt, dass die Aufgabe für $|x_1/x_2| \gg 1$ gut konditioniert ist. Wir berechnen die Nullstellen mit der p/q-Formel:

$a_1 = p^2/4$
$a_2 = a_1 - q$
$a_3 = \sqrt{a_2} \geq 0\,.$

Um Auslöschung zu vermeiden wird im Fall $p < 0$ die zweite Nullstelle mit der p/q-Formel berechnet $\tilde{x}_2 = p/2 - a_3$ berechnet, ansonsten die erste $\tilde{x}_1 = p/2 + a_3$. Die jeweils andere Nullstelle können wir entweder auch aus der p/q-Formel gewinnen, oder aber mit dem Satz von Vieta berechnen. Die Fehlerfortpflanzung für die zuerst berechnete Nullstelle lautet ($p > 0$):

$$\left|\frac{\Delta x_1}{x_1}\right| \leq \underbrace{\left|\frac{1}{1 + 2a_3/p}\right|}_{<1} \left|\frac{\Delta p}{p}\right| + \underbrace{\left|\frac{1}{1 + p/2a_3}\right|}_{<1} \left|\frac{\Delta a_3}{a_3}\right|.$$

Das Verfahren ist sehr stabil, es kann sogar mit einer Dämpfung des Fehlers gerechnet werden. Die zweite Nullstelle $\tilde{x}_1$ kann nun mit Hilfe von zwei unterschiedlichen Varianten bestimmt werden:

- Variante 1: $\tilde{x}_2 = p/2 - a_3$ von der p/q-Formel,
- Variante 2: $\tilde{x}_2 = q/\tilde{x}_1$ von Satz von Vieta.

Falls $|q| \ll p^2/4$, dann ist $a_3 \approx p/2$ (im Fall $p > 0$), und daher tritt bei Variante 1 automatisch Auslöschung auf. Die Rundungsfehler in p und a_3 übertragen sich wie folgt:

$$\left|\frac{\Delta x_2}{x_2}\right| \le \underbrace{\left|\frac{1}{1-2a_3/p}\right|}_{\gg 1} \left|\frac{\Delta p}{p}\right| + \underbrace{\left|\frac{1}{1-p/2a_3}\right|}_{\gg 1} \left|\frac{\Delta a_3}{a_3}\right|.$$

Für $|q| \ll p^2/4$ ist dieser Algorithmus sehr instabil. Variante 2 hingegen erfordert lediglich eine Division $\tilde{x}_2 = q/\tilde{x}_1$. Diese ist immer gut konditioniert (vergleiche Beispiel 1.16) und so ergibt sich durch Kombination der p/q-Formel für die eine Nullstelle und Satz von Vieta für die zweite ein stabiles Verfahren zur Lösung beider Nullstellen eines quadratischen Polynoms.

Bemerkung 7.3. *Die Quintessence dieser Betrachtungen ist, dass es zu gut konditionierten Problemen unterschiedliche Algorithmen mit unterschiedlichen Stabilitätseigenschaften geben kann.*

Beispiel 7.4. *Es sollen die Nullstellen von*

$$x^2 - 4x + 0.01 = 0$$

bestimmt werden. Vierstellige Rechnung ergibt:

$$a_1 = 4$$
$$a_2 = 3.99$$
$$a_3 = 1.998$$

und damit (wegen $p > 0$*) für die erste Nullstelle* $\tilde{x}_1 = 3.998$ *mit einem Fehler* $|\Delta x_1/x_1| \approx 0.00013$*. Die andere Nullstelle kann mit den beiden Varianten berechnet werden:*

- *Exakte Rechnung:* $x_2 \approx 0.002501564$*,*
- *Variante 1:* $\tilde{x}_2 = 0.002$*, mit einem Fehler* $|\Delta x_2/x_2| \approx 0.2$
- *Variante 2:* $\tilde{x}_2 = 0.002501$*, mit einem Fehler* $|\Delta x_2/x_2| \approx 0.00023$*.*

Die berechneten Nullstellen der beiden Varianten unterscheiden sich stark.

7.3. Intervallschachtelung

Das einfachste Verfahren zur Nullstellenbestimmung ist die Intervallschachtelung, welche auf einer Anwendung des Zwischenwertsatzes beruht.

Es sei $f \in C[a,b]$ und $x, y \in [a,b]$ mit $x < y$. Falls $f(x)$ und $f(y)$ unterschiedliche Vorzeichen haben, d.h.,

$$f(x)f(y) < 0,$$

dann besitzt die Funktion f nach dem Zwischenwertsatz mindestens eine Nullstelle in (a,b). Das folgende Verfahren ermittelt eine Approximation dieser Nullstelle.

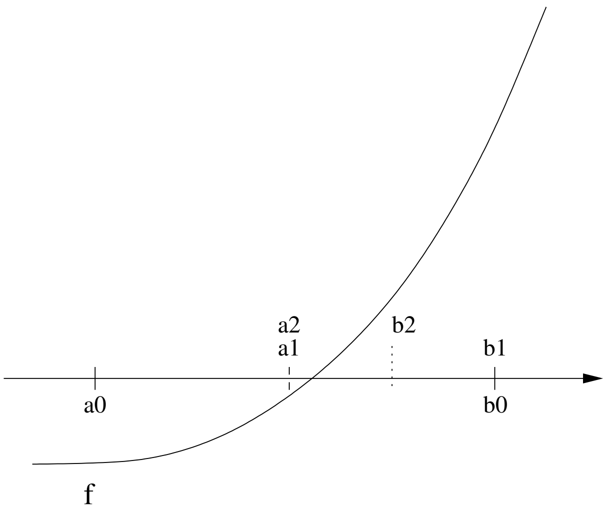


Abbildung 7.2.: Geometrische Interpretation der Intervallschachtelung.

Satz 7.5 (Intervallschachtelung)**.** *Es sei $f \in C[a,b]$ mit $f(a)f(b) < 0$. Man definiere eine Folge von Intervallen $[a_n, b_n]$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots, N$, durch*

$$[a_0, b_0] = [a, b]$$

und

$$[a_{n+1}, b_{n+1}] = \begin{cases} [a_n, x_n] & \textit{falls } f(a_n)f(x_n) < 0, \\ [x_n, b_n] & \textit{falls } f(x_n)f(b_n) < 0, \\ [x_n, x_n] & \textit{falls } f(x_n) = 0, \end{cases}$$

wobei $x_n = \frac{1}{2}(a_n + b_n)$ der Mittelpunkt des Intervalls $[a_n, b_n]$ ist. Dann gilt, dass $x_n \to \hat{x}\,(n \to \infty)$ für eine Nullstelle $\hat{x}$ von f und

$$|x_n - \hat{x}| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}.$$

Diese Fehlerschranke verhält sich wie eine geometrische Folge mit dem Quotienten $\frac{1}{2}$ (Konvergenzrate) und hat die Konvergenzordnung $p = 1$ (mehr dazu in Abschnitt 7.6).

Beweis: Falls $f(x_n) = 0$ für ein $n \in \mathbb{N}$, dann ist die Nullstelle exakt gefunden. Im Folgenden wird dieser Fall nicht mehr betrachtet. Nach Konstruktion gilt

$$a \leq a_1 \leq \ldots \leq a_n \leq a_{n+1} \leq b_{n+1} \leq b_n \leq \ldots b_1 \leq b.$$

Somit ist (a_n) eine monoton wachsende und nach oben beschränkte Folge. Damit ist diese nach dem Monotoniekriterium konvergent (Analysis I). Analog erhalten wir die Konvergenz für die Folge (b_n), die monoton fallend und nach unten beschränkt ist. Es folgt

$$|b_n - a_n| = \frac{|b_{n-1} - a_{n-1}|}{2} = \frac{|b_{n-2} - a_{b-2}|}{2^2} = \ldots = \frac{|b-a|}{2^n}, \tag{7.2}$$

und somit gilt

$$b_n = a_n + (b_n - a_n) \xrightarrow{n\to\infty} a_n,$$

und also mit $a \le a_n \le b_n \le b$

$$\hat{x} = \lim_{n\to\infty} a_n = \lim_{n\to\infty} b_n.$$

Aus der Stetigkeit von f folgt weiter

$$f(a_n)f(b_n) \le 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

und dies impliziert

$$f(\hat{x})^2 = \lim_{n\to\infty} f(a_n)f(b_n) \le 0 \quad \Rightarrow \quad f(\hat{x}) = 0.$$

Es bleibt die Konvergenzrate zu bestimmen. Es gilt $a_n \le \hat{x} \le b_n$ $(\forall n)$ und

$$|x_n - a_n| \le |b_n - a_n| = \frac{b-a}{2^{n+1}}.$$

□

Bemerkung 7.6 (A priori Fehlerabschätzung)**.** *Die in Satz 7.5 angegebene Fehlerabschätzung*

$$|x_n - \hat{x}| \le \frac{b-a}{2^{n+1}}.$$

ist eine a priori Fehlerabschätzung, da diese bereits vor der Rechnung angegeben werden kann.

Beispiel 7.7. *Wir betrachten das Intervall $I = [0, 1]$, dann liefert die a priori Abschätzung*

$$|x_9 - \hat{x}| < 10^{-3}, \quad |x_{19} - \hat{x}| < 10^{-6}, \quad |x_{29} - \hat{x}| < 10^{-9}.$$

Das heißt in der 29-ten Iteration kann eine Genauigkeit von $TOL = 10^{-9}$ erwartet werden.

Abschließend diskutieren wir noch eine a posteriori Fehlerabschätzung, die allerdings die stetige Differenzierbarkeit von f voraussetzt:

Satz 7.8 (A posteriori Fehlerabschätzung)**.** *Es sei $f \in C^1[a, b]$ mit $f(a)f(b) < 0$ und für alle $x \in [a, b]$ gilt*

$$0 < m \le f'(x) \le M.$$

Für die Nullstelle $\hat{x}$ von f und die in Satz 7.5 definierte Folge $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ gilt dann

$$\frac{|f(x_n)|}{M} \le |x_n - \hat{x}| \le \frac{|f(x_n)|}{m}.$$

Beweis: Übung (Mittelwertsatz der Differentialrechnung). □

Die a posteriori Fehlerschranke kann als Abbruchkriterium zum Beenden der Intervallschachtelung genutzt werden, allerdings nur, falls f stetig differenzierbar in $[a, b]$ ist. Darüber hinaus lassen sich heuristisch auch weitere Abbruchkriterien untersuchen:

- $f(x_n) = 0$: D.h. die Nullstelle ist exakt gefunden.
- $|f(x_n)| < TOL$: Das *Residuum* der Aufgabe ist sehr klein.
- $|b_n - a_n| < TOL$
- $n = N_0$: D.h. Angabe einer Maximalanzahl von Iterationsschritten (mit dem Nachteil, dass die Nullstelle noch nicht genügend genau approximiert worden ist.

Die Intervallschachtelung ist ein sehr stabiles Verfahren. Aus dem Konstruktionsprinzip folgt unmittelbar, dass die Nullstelle stets im Iterationsintervall eingeschlossen ist. Allerdings konvergiert das Verfahren sehr langsam gegen die gesuchte Nullstelle. Aufgrund seiner Stabilität wird das Intervallschachtelungsverfahren häufig als Startverfahren für andere Verfahren genutzt. Allerdings ist die Intervallschachtelung auf reelle Funktionen beschränkt (im Gegensatz zu den weiteren Verfahren, die wir im Anschluss kennen lernen werden) und das Auffinden doppelter Nullstellen ist nicht möglich.

7.4. Das Newton-Verfahren in 1D

Es sei $f \in C^1[a, b]$. Falls die erste Ableitung $f'(x)$ ohne große Probleme berechenbar ist, dann stellt das Newton-Verfahren eine sehr effiziente Methodik zur Berechnung einer Nullstelle dar. Das Newton-Verfahren hat viele Ableger - es gibt nicht *das eine einzige* Newton-Verfahren. Das klassische Newton-Verfahren (auch Newton-Raphson-Verfahren genannt) ist durch folgende Vorschrift definiert: Die Funktion f wird im Näherungswert x_k durch ihre Tangente linearisiert und der iterierte Wert x_{k+1} als Abzisse des Schnittpunktes der Tangente (an f) mit der x-Achse definiert, vergleiche Abbildung 7.3.

7.4.1. Das klassische Newton-Verfahren

Verfahren 7.9 (Newton-Verfahren)**.** *Es sei $f \in C^1[a, b]$ und $x_0 \in [a, b]$ ein geeigneter Startwert. Die Tangente an f ist durch*

$$t(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

gegeben. Dann ist die Nullstelle x_{k+1} der Tangente bestimmt durch

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots. \tag{7.3}$$

Die Iteration wird bei Erfüllung des Abbruchkriteriums 7.12 beendet.

Diese Iteration ist möglich, solange $f'(x_k) \neq 0$.

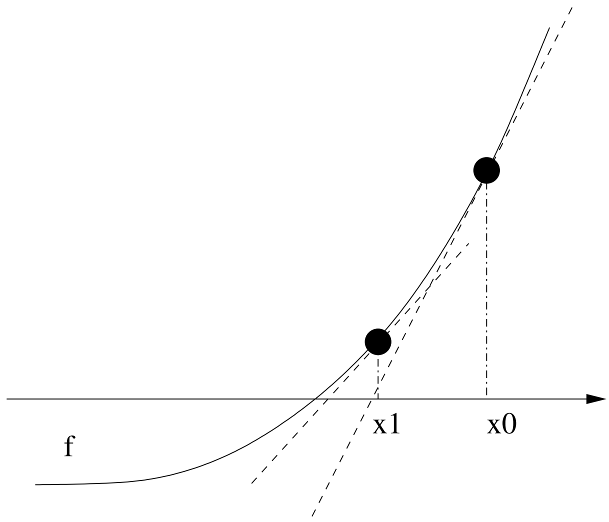


Abbildung 7.3.: Geometrische Interpretation des Newton-Verfahrens.

Die Iteration 7.3 gehört (wie in der Motivation bereits erwähnt) zur Klasse der Fixpunktiterationen mit der Iterationsfunktion

$$F(x) := x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \tag{7.4}$$

Für einen Fixpunkt $\hat{x} = F(\hat{x})$ gilt offenbar $f(\hat{x}) = 0$.

Als Hauptresultat des Abschnitts zeigen wir

Satz 7.10 (Newton-Verfahren)**.** *Die Funktion $f \in C^2[a,b]$ habe im Innern des Intervalls $[a,b]$ eine Nullstelle $\hat{x}$, und es seien*

$$m := \min_{a \le x \le b} |f'(x)| > 0, \quad M := \max_{a \le x \le b} |f''(x)|. \tag{7.5}$$

Es sei $\rho > 0$ so gewählt, dass

$$\rho_0 := \frac{M}{2m}\rho < 1, \quad K_\rho(\hat{x}) := \{x \in \mathbb{R} : |x - \hat{x}| \le \rho\} \subset [a,b]. \tag{7.6}$$

Dann sind für jeden Startpunkt $x_0 \in K_\rho(\hat{x})$ die Newton-Iterierten $x_k \in K_\rho(\hat{x})$ definiert und konvergieren gegen die Nullstelle $\hat{x}$. Desweiteren gelten die a priori Fehlerabschätzung

$$|x_k - \hat{x}| \le \frac{2m}{M}\rho_0^{2^k}, \quad k \in \mathbb{N},$$

und die a posteriori Fehlerabschätzung

$$|x_k - \hat{x}| \le \frac{1}{m}|f(x_k)| \le \frac{M}{2m}|x_k - x_{k-1}|^2, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Beweis: *(i)* Wir rekapitulieren zunächst einige Resultate aus der Analysis. Für zwei Punkte $x, y \in [a, b]$, $x \neq y$, gilt aufgrund des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung

$$\left|\frac{f(x) - f(y)}{x - y}\right| = |f'(\zeta)| \geq m,$$

mit einem $\zeta \in [x, y]$. Demnach gilt:

$$|x - y| \leq \frac{1}{m}|f(x) - f(y)|. \tag{7.7}$$

Daraus folgt, dass die Nullstelle $\hat{x}$ von f die einzige in $[a, b]$ ist.

Als zweites Hilfsmittel nutzen wir die Taylor-Formel mit Restglied zweiter Ordnung:

$$f(y) = f(x) + (y - x)f'(x) + (y - x)^2 \int_0^1 f''(x + s(y - x))(1 - s)\, ds. \tag{7.8}$$

Wir setzen

$$R(y; x) := (y - x)^2 \int_0^1 f''(x + s(y - x))(1 - s)\, ds = f(y) - f(x) - (y - x)f'(x). \tag{7.9}$$

Unter Berücksichtigung der Voraussetzung für f'' erhalten wir

$$|R(y; x)| \leq M|y - x|^2 \int_0^1 (1 - s)\, ds = \frac{M}{2}|y - x|^2. \tag{7.10}$$

(ii) Wir werden als nächstes zeigen, dass für jeden Wert $x \in K_\rho(\hat{x})$ auch $F(x) \in K_\rho(\hat{x})$ gilt, das also $F(\cdot)$ eine Selbstabbildung der Kugel $K_\rho(\hat{x})$ ist. Für $x \in K_\rho(\hat{x})$ nutzen wir die Iterationsfunktion (7.4), so dass gilt

$$F(x) - \hat{x} = x - \frac{f(x)}{f'(x)} - \hat{x} = -\frac{1}{f'(x)}\big(f(x) + (\hat{x} - x)f'(x)\big).$$

Mit (7.9) für $y = \hat{x}$ folgt:

$$-R(\hat{x}; x) = \big(f(x) + (\hat{x} - x)f'(x)\big).$$

Zusammenfassend erhalten wir mit (7.5) und (7.6)

$$|F(x) - \hat{x}| \leq \frac{|R(\hat{x}; x)|}{|f'(x)|} \leq \frac{M}{2m}|x - \hat{x}|^2 \leq \frac{M}{2m}\rho^2 < \rho. \tag{7.11}$$

Dies impliziert, dass $F(x) \in K_\rho(\hat{x})$. Die Abbildung F ist eine Selbstabbildung in $K_\rho(\hat{x})$. Insbesondere bedeutet dies wegen $x^{k+1} = F(x_k)$ für $x_0 \in K_\rho(\hat{x})$ auch alle Newton-Iterierten x_k in $K_\rho(\hat{x})$ liegen.

(iii) Wir setzen

$$\rho_k := \frac{M}{2m}|x_k - \hat{x}|,$$

so dass mit Hilfe von (7.11) folgt:

$$\rho_k = \frac{M}{2m}|x_k - \hat{x}| = \frac{M}{2m}|F(x_{k-1}) - \hat{x}| \leq \frac{M}{2m}\left(\frac{M}{2m}|x_{k-1} - \hat{x}|^2\right) = \rho_{k-1}^2.$$

Dies führt induktiv auf:

$$\rho_k \leq \rho_{k-1}^2 \leq \ldots \leq \rho_0^{2^k}, \quad |x_k - \hat{x}| \leq \frac{2m}{M}\rho_0^{2^k}.$$

Für

$$\rho_0 = \frac{M}{2m}|x_0 - \hat{x}| \leq \frac{M}{2m}\rho < 1$$

konvergieren die Iterierten $x_k \to \hat{x}$ für $k \to \infty$. Desweiteren haben wir die a priori Abschätzung gezeigt.

(iv) Es bleibt die a posteriori Fehlerabschätzung zu beweisen. Hierzu nutzen verwenden wir (7.7) (MWS). Es folgt sofort die erste Abschätzung.

$$|x_k - \hat{x}| \leq \frac{1}{m}|f(x_k) - f(\hat{x})|.$$

Wir verwenden weiter die Formel für das Restglied (7.9) und setzen die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens sein:

$$R(x_k, x_{k-1}) = f(x_k) - f(x_{k-1}) - \underbrace{(x_k - x_{k-1})f'(x_{k-1})}_{=-f(x_{k-1})} = f(x_k).$$

Also, mit der Abschätzung (7.10) und der ersten a posteriori Abschätzung gilt:

$$|x_k - \hat{x}| \leq \frac{|f(x_k)|}{m} = \frac{|R(x_k, x_{k-1})|}{m} \leq \frac{M}{2m}|x_k - x_{k-1}|^2.$$

□

Beispiel 7.11 (Newton-Verfahren und Intervallschachtelung)**.** *Wir betrachten die Funktion f aus der Einleitung:*

$$f(x) = x(1 + \exp(x)) + 10\sin(3 + \log(x^2 + 1))$$

Wir haben argumentiert, dass $f(x) < 0$ für $x < -10$ und $f(x) > 0$ für $x > 10$ gilt. Im Intervall $[-10, 10]$ liegt somit mindestens eine Nullstelle. In der Tat hat die Funktion in diesem Intervall 5 Nullstellen. Es gilt (6 Stellen Genauigkeit)

$$x_1 = -9.16359, \quad x_2 = -8.65847, \quad x_2 = -0.304487, \quad x_4 = 0.608758, \quad x_5 = 1.54776$$

Wir führen zunächst die Intervallschachtelung durch:

	a	$f(a)$	b	$f(b)$	x	$f(x)$	$b-a$
0	-10	$-$	10	$+$	0	$+$	20
1	-10	$-$	0	$+$	-5	$-$	10
2	-5	$-$	0	$+$	-2.5	$-$	5
3	-2.5	$-$	0	$+$	-1.25	$-$	2.5
4	-0.625	$-$	0	$+$	-0.3125	$-$	1.25
5	-0.3125	$-$	0	$+$	-0.15625	$+$	0.625
6	-0.3125	$-$	-0.15625	$+$	-0.234375	$+$	0.3125
			$\vdots$				
15	$\cdots$	$-$	$\cdot$	$+$	-0.30449	$\cdot$	0.000153

Nach 15 Schritten erhalten wir eine Approximation $\tilde{x} \approx -0.30449$, *welche höchstens den Fehler* $|\tilde{x} - \hat{x}| \leq 0.000153$ *besitzt. Verglichen mit der exakten Nullstelle gilt* $|\tilde{x} - x_3| \approx 0.000002$.

Wir führen nun das Newton-Verfahren aus. Hierbei gilt es einen Startwert zu wählen. Eigentlich müsste dieser Startwert im Sinne von Satz 7.10 gewählt werden. Dies ist bei der vorliegenden Funktion jedoch nur schwer möglich. Wir wählen daher zunächst $x_0 = 0$. *Es folgt:*

$$\begin{aligned}
x_0 &= 0 \\
x_1 &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \approx -0.705600 \qquad && x_1 - \hat{x} \approx -\underline{0.}40 \\
x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \approx -0.349442 \qquad && x_2 - \hat{x} \approx -\underline{0.0}45 \\
x_3 &= x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \approx -0.306245 \qquad && x_3 - \hat{x} \approx -\underline{0.00}174 \\
x_4 &= x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} \approx -0.304490 \qquad && x_4 - \hat{x} \approx -\underline{0.00000}3
\end{aligned}$$

Nach nur 4 Schritten sind die ersten 5 wesentlichen Stellen exakt bestimmt. Dieses Beispiel zeigt einerseits die Überlegenheit des Newton-Verfahrens, jedoch auch die Schwierigkeit, den Startwert richtig zu wählen. Wir betrachten z.B. als Startwert das linke Intervallende:

$$\begin{aligned}
x_0 &= -10 \\
x_1 &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \approx -9.46454 \qquad && x_1 - \hat{x} \approx \underline{0.}3 \\
x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \approx -9.24183 \qquad && x_2 - \hat{x} \approx \underline{0.0}8 \\
x_3 &= x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \approx -9.17249 \qquad && x_3 - \hat{x} \approx \underline{0.00}8 \\
x_4 &= x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} \approx -9.16373 \qquad && x_4 - \hat{x} \approx \underline{0.0000}9
\end{aligned}$$

und konvergieren gegen x_1. Wenn alle 5 Nullstellen gefunden werden sollen, so müssen jeweils gute Startwerte vorliegen. Diese könnten z.B. mit einer Rasterung des Intervals, also z.B. durch Berechnen aller $f(x_i)$ für $x_i = ih$, z.b. mit $h = 1$ und $i = -10, -9, \dots, 10$ erfolgen.

Im Beweis zum Newton-Verfahren haben wir die Beziehung

$$|x_k - \hat{x}| \leq \frac{M}{2m}|x_k - x_{k-1}|^2$$

hergeleitet. Dies legt das folgende Abbruchkriterium für das Newton-Verfahren nahe:

Bemerkung 7.12 (Abbruchkriterium des Newton-Verfahrens)**.** *Die Iteration wird beendet (d.h. wir haben eine akzeptable Lösung $x_{akzeptabel}$ gefunden), falls*

$$\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_k|} < TOL, \tag{7.12}$$

wobei die Toleranz TOL beispielsweise durch $TOL = 10^{-12}$ gegeben ist. Das Abbruchkriterium (7.12) misst den relativen Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterierten x_{k+1} und x_k; in anderen Worten, falls zwei Iterierte nah genug beieinander liegen, dann ist die Nullstelle näherungsweise bestimmt.

Bemerkung 7.13 (Alternatives Abbruchkriterium des Newton-Verfahrens)**.** *Aufgrund der Konstruktion des Newton-Verfahrens gilt:*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

so dass mit Hilfe der Voraussetzung aus Satz 7.10

$$m := \min_{a \leq x \leq b} |f'(x)| > 0,$$

gilt

$$|x_{k+1} - x_k| = \left|\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\right| \leq \left|\frac{f(x_k)}{m}\right|.$$

Das heißt, ein kleines Residuum $f(x_k)$ kann ebenfalls (bei festem m) als (absolutes) Abbruchkriterium genutzt werden:

$$|f(x_k)| < TOL. \tag{7.13}$$

Bemerkung 7.14. *Für eine zweimal stetig differenzierbare Funktion f existiert zu jeder einfachen Nullstelle $\hat{x}$ stets eine (evtl. sehr kleine) Umgebung $K_\rho(\hat{x})$, für die die Voraussetzungen von Satz 7.10 erfüllt sind. Das Problem beim Newton-Verfahren ist also die Bestimmung eines im Einzugsbereich der Nullstelle $\hat{x}$ gelegenen Startpunktes x_0 (lokale Konvergenz). Dieser Startwert kann z.B. mit Hilfe der Intervallschachtelung (siehe entsprechende Bemerkung oben) berechnet werden. Dann konvergiert das Newton-Verfahren sehr schnell (quadratische Konvergenz) gegen die Nullstelle $\hat{x}$.*

Bemerkung 7.15. *Das Newton-Verfahren kann auch zur Bestimmung von doppelten Nullstellen genutzt werden, allerdings konvergiert das Verfahren dann nur noch linear, d.h. $p = 1$, was in Beispiel 7.23 explizit gezeigt wird.*

Beispiel 7.16. *Falls der Startpunkt x_0 im Einzugsbereich des quadratischen Konvergenz liegt, dann konvergiert das Newton-Verfahren sehr schnell gegen die gesuchte Nullstelle. Es sei z.B. $q \leq \frac{1}{2}$, dann gilt nach nur 10 Iterationsschritten*

$$|x_{10} - \hat{x}| \leq \frac{2m}{M} q^{2^{10}} \sim \frac{2m}{M} 10^{-300}.$$

Beispiel 7.17 (Wurzelberechnung)**.** *Die n-te Wurzel einer Zahl $a > 0$ ist die Nullstelle der Funktion $f(x) = x^n - a$. Das Newton-Verfahren zur Berechnung von $\hat{x} = \sqrt[n]{a} > 0$ lautet (mit $f'(x) = nx^{n-1}$):*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^n - a}{n x_k^{n-1}} = \frac{1}{n} \left\{ (n-1)x_k + \frac{a}{x_k^{n-1}} \right\}.$$

Folgende Spezialfälle leiten sich daraus ab:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \frac{1}{2} \left\{ x_k + \frac{a}{x_k} \right\}, \quad \textit{(Quadratwurzel)}, \\ x_{k+1} &= \frac{1}{3} \left\{ 2x_k + \frac{a}{x_k^2} \right\}, \quad \textit{(Kubikwurzel)}, \\ x_{k+1} &= (2 - a x_k) x_k, \quad \textit{(Kehrwert)}. \end{aligned}$$

Aufgrund von Satz 7.10 konvergiert $x_k \to \hat{x}$ für $k \to \infty$, falls x_0 nahe genug bei $\hat{x}$ gewählt wird. Bei diesem Beispiel ist die Konvergenz allerdings für alle $x_0 > 0$ gesichert, da die Folge $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ monoton fällt und notwendig gegen $\hat{x} = \sqrt[n]{a}$ konvergiert. Quadratische Konvergenz liegt im Allgemeinen erst nach einigen Iterationsschritten vor.

Bemerkung 7.18. *Wie in dem vorangegangen Beispiel wird auf vielen Rechnern die Wurzel $\sqrt[n]{a}$ berechnet. Desweiteren ermöglicht die Darstellung zur Berechnung des Kehrwertes die Berechnung ohne Ausnutzung der Division sondern lediglich unter Zuhilfenahme von Multiplikationen und Subtraktionen.*

7.4.2. Das Newton-Verfahren als Defekt-Korrektur

In der Praxis wird das Newton-Verfahren oft als Defektkorrektur-Iteration ausgeführt. Wir definieren:

Definition 7.19 (Defekt)**.** *Es sei $\tilde{x} \in \mathbb{R}$ eine Approximation der Lösung von $f(x) = y$. Mit*

$$d(\tilde{x}) = y - f(\tilde{x})$$

wird der Defekt *bezeichnet. Der Defekt wird auch als das* Residuum *bezeichnet.*

Es sei im Folgenden $y = 0$ (falls nicht transformieren wir die Gleichung entsprechend um), so dass wir wie üblich ein Nullstellenproblem lösen. Für die Approximation x_k ist durch $d_k := 0 - f(x_k)$ der Defekt der k-ten Iterierten gegeben und wir schreiben das Newton-Verfahren in der Form:

Definition 7.20 (Newton-Verfahren als Defektkorrektur)**.**

$$\begin{aligned} \textit{Löse} \qquad & f'(x_k)\delta x = d_k, \quad d_k := -f(x_k), \\ \textit{Berechne} \qquad & x_{k+1} = x_k + \delta x, \quad k = 0, 1, 2, \ldots . \end{aligned}$$

Die Iteration wird bei Erfüllung des Abbruchkriteriums 7.12 beendet.

Diese Art der Berechnung kann bei vielen Fixpunktiterationsverfahren angewendet werden (nicht bei allen!) und wird uns wieder bei der iterativen Lösung von linearen Gleichungssystemen begegnen. Insbesondere hat das Defektkorrektur-Verfahren den Vorteil, dass die Ableitung nicht mehr im Nenner steht - oder anders gesprochen, wir müssen nicht mehr die Inverse der ersten Ableitung explizit angegeben. Für 1D Funktionen ist die explizite Angabe kein Problem. Wie verhält es sich aber bei höherdimensionalen Funktionen? Der Defekt $d(\tilde{x}) = y - f(\tilde{x})$ einer Gleichung ist eng mit dem Fehler $\tilde{x} - \hat{x}$ verbunden. Es gilt der folgende allgemeine Satz:

Satz 7.21 (Defekt-Fehler Abschätzung)**.** *Es sei $f \in C^1[a, b]$ eine differenzierbare Funktion und $\hat{x} \in (a, b)$ die Lösung von $f(x) = y$. Für die Approximation $\tilde{x} \in (a, b)$ gilt die Fehlerabschätzung*

$$|\tilde{x} - \hat{x}| \leq \frac{1}{m}|d(\tilde{x})|,$$

mit $m = \min_{x \in [a,b]} |f'(x)|$.

Beweis: Es gilt mit einem $\xi \in [a, b]$:

$$d(\tilde{x}) = y - f(\tilde{x}) = \frac{f(\hat{x}) - f(\tilde{x})}{\hat{x} - \tilde{x}}(\hat{x} - \tilde{x}) = f'(\xi)(\hat{x} - \tilde{x}).$$

Hieraus folgt sofort die Behauptung. □

7.4.3. Das gedämpfte Newton-Verfahren

Das Hauptproblem bei der Durchführung des Newton-Verfahrens ist die Bestimmung eines geeigneten Startwertes x_0 (siehe obige Bemerkungen), so dass quadratische Konvergenz erwartet werden kann. Deshalb wird in der Praxis häufig mit einer Variante gearbeitet, dem sogenannten *gedämpften* Newton-Verfahren:

Definition 7.22 (Gedämpftes Newton-Verfahren)**.** *Es sei x_0 ein geeigneter Startwert. Die Defektkorrektur-Iteration des gedämpften Newton-Verfahrens lautet:*

$$\begin{aligned} \textit{Löse} \quad & f'(x_k)\delta x = -f(x_k), \\ \textit{Berechne} \quad & x_{k+1} = x_k + \lambda_k \delta x, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \end{aligned}$$

wobei $\lambda_k \in (0,1]$ den sog. Dämpfungsparameter bezeichnet.

Je kleiner λ_k gewählt wird, desto geringer ist der *Abstand* zwischen x_{k+1} und x_k. Ein kleines λ kann helfen, um Konvergenz zu sichern, obwohl der Einzugbereich der quadratischen Konvergenz noch nicht erreicht ist. So wird vermieden, dass die Iteration weit aus dem Einzugsbereich herausspringen kann. Eine optimale Wahl von λ_k kann abh. von der Problemstellung sehr kompliziert werden.

7.4.4. Mehrfache Nullstellen

Das Newton-Verfahren kann auch zur Suche von doppelten Nullstellen verwendet werden, allerdings konvergiert es nur noch höchstens superlinear bei mehrfachen Nullstellen.

Es sei $\hat{x}$ eine zweifache Nullstelle der Funktion f, d.h. $f(\hat{x}) = f'(\hat{x}) = 0$ und $f''(\hat{x}) \neq 0$. Dann gilt mit Zwischenwerten $\zeta_k, \eta_k \in [x_k, \hat{x}]$:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{f(x_k) - f(\hat{x})}{f'(x_k) - f'(\hat{x})} \frac{x_k - \hat{x}}{x_k - \hat{x}} = x_k - \frac{f'(\zeta_k)}{f''(\eta_k)}.$$

Beispiel 7.23 (Konvergenzordnung Newton für doppelte Nullstellen)**.** *Für das Newton-Verfahren zur Bestimmung einer einfachen Nullstelle der Funktion f lautet die Iterationsfunktion $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$. Mit Hilfe des Satzes 7.28 gilt*

$$g'(\hat{x}) = 1 - \frac{f'(\hat{x})^2 - f(\hat{x})f''(\hat{x})}{f'(\hat{x})^2} = 0.$$

Sei nun ebenfalls $f'(\hat{x}) = 0$ (doppelte Nullstelle). Hier können wir nun die Regel von L'Hopital verwenden

$$\lim_{x\to\hat{x}} g'(x) = f''(\hat{x}) \lim_{x\to\hat{x}} \frac{f(x)}{f'(x)^2} = f''(\hat{x}) \lim_{x\to\hat{x}} \frac{f'(x)}{2f'(x)f''(x)} = f''(\hat{x}) \frac{1}{2f''(\hat{x})} = \frac{1}{2}.$$

Damit ist das Newton-Verfahren nach Satz 7.28 zur Bestimmung doppelter Nullstellen nur linear konvergent.

Im Fall von mehrfachen Nullstellen lässt sich die quadratische Konvergenzordnung des Newton-Verfahrens durch einen Trick erreichen. Wir machen zur Iteration den Ansatz:

$$x_{k+1} = x_k - \omega \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

mit einem *Relaxationsparameter* ω, ähnlich dem gedämpften Newton-Verfahren. Angenommen, es liegt eine p-fache Nullstelle vor $f(\hat{x}) = f'(\hat{x}) = \ldots = f^{(p-1)}(\hat{x}) = 0$ und $f^{(p)}(\hat{x}) \neq 0$, so wählen wir $\omega = p$. Da $\omega > 1$ sprechen wir von *Überrelaxation*. Das so gewonnene Verfahren konvergiert wieder quadratisch. Der Beweis findet sich in der Literatur, etwa [10], S. 168. Der praktische Nutzen dieser Modifikation ist beschränkt, da man bei der Suche nach einer Nullstelle üblicherweise nicht deren Vielfachheit kennt.

7.4.5. Das vereinfachte Newton-Verfahren

Häufig ändert sich im Verlauf der Newton-Iteration die Ableitung $f'(x)$ nicht mehr gravierend. In diesem Fall eignet sich das vereinfachte Newton-Verfahren. Die Idee ist recht einfach: Berechne die Ableitung $f'(x)$ nur wenige Male (im Idealfall nur für x_0) und belasse diese für alle weiteren Schritte bei diesem Wert:

Definition 7.24 (Vereinfachtes Newton-Verfahren)**.** *Zu einem Startwert $x_0 \in \mathbb{R}$ werden Approximationen durch die folgende Vorschrift gebildet:*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(c)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Hierbei ist c ein fest gewählter Punkt, etwa $c = x_0$.

Das vereinfachte Newton-Verfahren konvergiert nur noch linear. Die Konvergenz kann jedoch, falls $f'(c)$ eine gute Approximation für $f'(x_k)$ ist, sehr gut sein. Das vereinfachte Newton-Verfahren spielt dann seine Vorteile aus, falls die erste Ableitung aufwendig zu berechnen ist was bei den hier betrachteten Beispielen nicht der Fall ist, aber bei der Nullstellensuche im $\mathbb{R}^n$ (siehe Kapitel 8) oder bei Problemen mit Differentialgleichungen vorkommen kann.

Dieses Verfahren kann in der theoretischen Analyse als ein Spezialfall der allgemeinen Fixpunktiteration aufgefasst werden. Wir verweisen hierzu auf Kapitel 8 und [10], S. 162.

7.5. Weitere Verfahren zur Nullstellensuche

Das Newtonverfahren ist eines der wichtigsten numerischen Verfahren zur Nullstellenbestimmung. Es ist nicht nur auf den Fall $\mathbb{R}^d$ mit $d > 1$ erweiterbar, sondern wird auch zur Lösung von Differentialgleichungen häufig genutzt, wobei die Differentialgleichungsaufgabe wiederum in Form eines Nullstellenproblems formuliert wird (siehe weiterführende Literatur [12, 11, 13] und enthaltene Literaturverweise).

Im diesem Abschnitt fassen wir kurz weitere Verfahren zur Nullstellensuche zusammen. Zum tieferen Verständnis sei auf die jeweils angegebene Literatur verwiesen.

Sekantenverfahren

Das Sekantenverfahren gehört zur Klasse der Interpolationsmethoden und hat eine direkte Verbindung zu dem bereits kennengelernten Newtonverfahren. Geometrisch betrachtet wird bei dem Newton-Verfahren eine Tangente an die Funktion gelegt, während bei dem Sekantenverfahren eine Sekante als Approximation zur Ableitung $f'(x)$ genutzt wird. Hierdurch wird die explizite Berechnung von $f'(x)$ vermieden. Dies macht Sinn, falls $f'(x)$ schwierig/aufwendig zu berechnen ist.

Konkret wird bei dem Sekantenverfahren die Ableitung $f'(x)$ durch einen *Differenzenquotienten* ersetzt, etwa durch

$$f'(x_k) \sim \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}.$$

Die Iterationsvorschrift erfordert zwei Startwerte x_0 und x_1, so dass

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k).$$

Eine wichtige Beobachtung ist, dass die Sekantenmethode unter Umständen zur Auslöschung im Nenner neigt (zur Auslöschung siehe Kapitel 1). Analog zum Newton-Verfahren kann eine Analyse mit entsprechender Fehlerabschätzung durchgeführt werden. Hierzu verweisen wir auf [10], Satz 5.3 auf S. 167. Das Sekanten-Verfahren ist eine Kuriosität, da keine ganzzahlige Konvergenzordnung vorliegt. Stattdessen gilt asymptotisch:

$$|x_k - \hat{x}| \le C q^{\gamma_k^k}, \quad \gamma_k \to \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \approx 1.6818,$$

also eine Ordnung von etwa 1.6. Die Konstante q hängt wie beim Newton-Verfahren vom Einzugsbereich ab.

In Kombination mit der bereits diskutierten Intervallschachtelung in Abschnitt 7.3 erhalten wir ein stabilisiertes Verfahren:

Definition 7.25 (Regula falsi)**.** *Es sei f eine stetige Funktion auf $[a_0, b_0] := [a, b]$ mit $f(a)f(b) < 0$. Für den Startwert $x_0 \in [a_0, b_0]$ erfolgt die Iteration*

$$x_{n+1} := a_n - \frac{f(a_n)(b_n - a_n)}{f(b_n) - f(a_n)}$$

Dann ist das nächste Intervall gegeben durch

$$[a_{n+1}, b_{n+1}] = \begin{cases} [a_n, x_n] & \text{falls } f(a_n)f(x_n) < 0, \\ [x_n, b_n] & \text{falls } f(x_n)f(b_n) < 0, \\ [x_n, x_n] & \text{falls } f(x_n) = 0, \end{cases}$$

In Worten bedeutet dies, dass das Verfahren approximierende Geraden (Sekanten) bildet, aber analog zur Intervallschachtelung die Nullstelle durch kleiner werdende Intervalle einschließt.

Sukzessive Approximation

Die sukzessive Approximation basiert auf dem Banachschen Fixpunktsatz. Das Verfahren eignet sich insbesondere zur Nullstellenbestimmung höherdimensionaler Funktionen. Daher verweisen wir auf Kapitel 8 für eine ausführliche Diskussion.

7.6. Konvergenzbegriffe

In diesem Abschnitt wird die Konvergenz iterativer Verfahren anhand der bereits diskutierten Beispiele in einen allgemeinen Rahmen gefasst. Die theoretischen Resultate werden allgemein für Fixpunktpunktverfahren hergeleitet, so dass das Newton-Verfahren als ein Spezialfall aufgefasst werden kann. Die Aussagen dieses Abschnitts sind auf andere iterative Verfahren, die wir später kennenlernen werden ebenfalls anwendbar, z.B. auf die iterative Lösung von Gleichungssystemen.

Definition 7.26 (Konvergenzordnung)**.** *Wir nennen ein Iterationsverfahren zur Berechnung einer Nullstelle $\hat{x}$ von Konvergenz mit der Ordnung p mit $p \geq 1$, wenn gilt*

$$|x_k - \hat{x}| \leq c|x_{k-1} - \hat{x}|^p,$$

mit einer festen Konstanten $c > 0$. Im Fall $p = 1$, d.h. linearer Konvergenz heißt die beste Konstante $c \in (0,1)$ die lineare Konvergenzrate. Gilt bei linearer Konvergenzrate zusätzlich $c_k \to 0$ für $k \to \infty$, d.h.

$$|x_k - \hat{x}| \leq c_k\,|x_{k-1} - \hat{x}|,$$

so sprechen wir von superlinearer Konvergenz.

Die folgenden Überlegungen sind durch die bereits bekannten Abschätzungen motiviert. Für die Intervallschachtelung gilt:

$$|x_n - \hat{x}| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}},$$

mit der Konvergenzrate $\frac{1}{2}$ und der Konvergenzordnung $p = 1$ (lineare Konvergenz).

Das Newtonverfahren besitzt (lokal) in der Umgebung einer Nullstelle das Konvergenzverhalten

$$|x_k - \hat{x}| \leq c\,|x_{k-1} - \hat{x}|^2.$$

Wir sprechen von einem *quadratisch* konvergenten Verfahren oder auch von einem Verfahren *2-ter Ordnung.*

Grundsätzlich gilt (zumindest asymptotisch), dass superlinear konvergente Folgen schneller als (schlicht) lineare Folgen konvergieren. Außerdem konvergieren Verfahren mit Ordnung $p+1$ schneller als Verfahren mit der Ordnung p. Außerdem gilt, je kleiner die Konvergenzrate c ist, desto schneller ist die Konvergenz. Allerdings hat die Konvergenzordnung wesentlich größeren Einfluss auf die Konvergenzgeschwindigkeit, als die Konvergenzrate.

Im Folgenden betrachten wir Fixpunktprobleme der Form

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots .$$

Bei Fixpunktiterationen mit stetig differenzierbarer Abbildung $g(\cdot)$ gilt mit dem Mittelwertsatz der Analysis:

$$\left| \frac{x_{k+1} - \hat{x}}{x_k - \hat{x}} \right| = \left| \frac{g(x_k) - g(\hat{x})}{x_k - \hat{x}} \right| \to |g'(\hat{x})| \text{ für } k \to \infty. \tag{7.14}$$

Hieraus folgern wir, dass die lineare Konvergenzrate asymptotisch für $k \to \infty$ gerade gleich $|g'(\hat{x})|$ ist. Dementsprechend liegt im Falle $g'(\hat{x}) = 0$ (mindestens) superlineare Konvergenz vor.

Aus (7.14) können wir folgende Definition ableiten:

Definition 7.27. *Ein Fixpunkt $\hat{x}$ einer stetig differenzierbaren Abbildung $g(\cdot)$ heißt anziehend, falls $|g'(\hat{x})| < 1$ ist. Im Fall $|g'(\hat{x})| > 1$, wird ein Fixpunkt abstoßend genannt.*

Der folgende Satz liefert ein einfaches Kriterium zur Bestimmung der Konvergenzordnung einer differenzierbaren Fixpunktiteration. Er kann auch zur Konstruktion von Verfahren mit hoher Ordnung genutzt werden:

Satz 7.28 (Iterative Verfahren mit Ordnung $p \geq 2$)**.** *Die Funktion $g(\cdot)$ sei in einer Umgebung des Fixpunktes $\hat{x}$ p-mal stetig differenzierbar. Die Fixpunktiteration $x_{k+1} = g(x_k)$ hat genau dann die Ordnung p, wenn*

$$g'(\hat{x}) = \ldots = g^{(p-1)}(\hat{x}) = 0 \quad \textit{und } g^{(p)} \neq 0.$$

Beweis:

- Teil 1 (Rückrichtung)
  Es seien $g'(\hat{x}) = \ldots = g^{(p-1)}(\hat{x}) = 0$. Mit Hilfe der Taylorformal gilt:

  $$x_{k+1} - \hat{x} = g(x_k) - g(\hat{x}) = \sum_{j=1}^{p-1} \frac{(x_k - \hat{x})^j}{j!} g^{(j)}(\hat{x}) + \frac{(x_k - \hat{x})^p}{p!} g^{(p)}(\xi_k), \quad \xi_k \in (x_{k+1}, \hat{x}).$$

  Damit erhalten wir die Abschätzung:

  $$|x_{k+1} - \hat{x}| \leq \frac{1}{p!} \max |g^{(p)}| \, |x_k - \hat{x}|^p.$$

- Teil 2 (Hinrichtung)
  Es sei nun umgekehrt die Iteration von p-ter Ordnung, sprich

  $$|x_{k+1} - \hat{x}| \leq c|x_k - \hat{x}|^p.$$

Falls es ein minimales $m \le p-1$ mit $g^{(m)}(\hat{x}) \neq 0$ gäbe, aber $g^{(j)}(\hat{x}) = 0,\ j = 1,\dots,m-1$, so würde jede Iterationsfolge $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ mit hinreichend kleinem $|x_0-\hat{x}| \neq 0$) notwendig gegen $\hat{x}$ konvergieren wie

$$|x_k - \hat{x}| \le \left|\frac{1}{m!} g^{(m)}(\xi_k)\right| \, |x_{k-1} - \hat{x}|^m,$$

also mit der Ordnung m. Hier finden wir aber einen Widerspruch zu der Annahme, dass die Iteration von der Ordnung p ist:

$$|g^{(m)}(\hat{x})| = \lim_{k\to\infty} |g^{(m)}(\xi_k)| \le c\, m! \lim_{k\to\infty} |x_k - \hat{x}|^{p-m} = 0.$$

Hieraus folgt, dass für $g'(\hat{x}) = \ldots = g^{(p-1)}(\hat{x}) = 0$, aber $g^{(p)}(\hat{x}) \neq 0$, dass die Iteration nicht von höherer Ordnung als p sein kann.

□

Beispiel 7.29 (Darstellung des Newton-Verfahrens als Fixpunktverfahren)**.** *Die allgemeine Fixpunktiteration lautet*

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0,1,2,\ldots. \tag{7.15}$$

Das bereits diskutierte Newton-Verfahren lässt sich in dieser Notation wie folgt herleiten. Es sei wie üblich f die Funktion des Nullstellenproblems und h eine hinreichend glatte Funktion, die in einer Umgebung der Nullstelle $\hat{x}$ nicht verschwindet. Es sei

$$g(x) := x + h(x)f(x), \tag{7.16}$$

mit der Fixpunkt-Eigenschaft $g(\hat{x}) = \hat{x}$ die zu (7.15) *zugehörige Iterationsfunktion. Wir wollen $h(x)$ so bestimmen, dass wir eine Fixpunktiteration der Ordnung 2 erhalten. Anwendung der Produktregel und Satz 7.28 ergeben in $\hat{x}$:*

$$g'(\hat{x}) := 1 + h'(\hat{x}) \underbrace{f(\hat{x})}_{=0} + h(\hat{x})f'(\hat{x}) \stackrel{!}{=} 0.$$

Hieraus folgt die Bedingung an $h(x)$ in $\hat{x}$:

$$h(\hat{x}) = -\frac{1}{f'(\hat{x})}.$$

Wir wählen $h(x)$ nun für alle x gemäß diese Vorschrift, so dass

$$h(x) := -\frac{1}{f'(x)}.$$

Einsetzen in (7.16) *liefert die Iterationsfunktion*

$$g(x) := x - \frac{f(x)}{f'(x)},$$

und der Iterationsvorschrift

$$x_{k+1} := g(x_k) = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0,1,2,\ldots.$$

Beispiel 7.30 (Konvergenzordnung Newton für einfache Nullstellen). *Im umgekehrten Fall zu Beispiel 7.29 sei das Newton-Verfahren nun als bekannt vorausgesetzt. Mit Hilfe des Satzes 7.28 kann explizit die Konvergenzordnung des Newton-Verfahrens ermittelt werden:*

$$g'(\hat{x}) = 1 - \frac{f'(\hat{x})^2 - f(\hat{x})f''(\hat{x})}{f'(\hat{x})^2} = 0,$$

und im Allgemeinen $g''(\hat{x}) \neq 0$. Damit ist das Newton-Verfahren (wie bereits vorher diskutiert) quadratisch konvergent.

7.7. Nullstellensuche im $\mathbb{R}^n$

In diesem Kapitel betrachten wir Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ und suchen Nullstellen $z \in \mathbb{R}^n$, also Punkte mit

$$f(z) = 0.$$

Im Fall $n > 1$ handelt es sich hierbei um nichtlineare Gleichungssysteme. Lineare Gleichungssysteme lassen sich als Spezialfall dieser Aufgabe schreiben. Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und einen Vektor $b \in \mathbb{R}^n$ lässt sich die Lösung des LGS $Ax = b$ als Nullstellensuche mit der Funktion

$$f(x) = b - Ax,$$

schreiben.

Wir betrachten im Folgenden Iterationen der Art

$$x^0 \in \mathbb{R}^n, \quad x^{k+1} = g(x^k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \tag{7.17}$$

mit einer Abbildung $g(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.

Definition 7.31 (Fixpunkt). *Es sei $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Ein Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ heißt Fixpunkt von g, falls $g(x) = x$.*

Für das weitere Vorgehen sei $\|\cdot\|$ eine beliebige Norm auf $\mathbb{R}^n$ und $\|\cdot\|$ die entsprechende natürliche Matrizennorm, siehe Definition 2.14.

Zunächst rekapitulieren wir die bereits aus der Analysis bekannte Lipschitz-Stetigkeit einer Funktion:

Definition 7.32 (Lipschitz-Stetigkeit, Kontraktion). *Es sei $G \subset \mathbb{R}^n$ eine nichtleere Menge. Eine Abbildung $g : G \to \mathbb{R}^n$ wird Lipschitz-stetig genannt, falls*

$$\|g(x) - g(y)\| \leq q\|x - y\|, \quad x, y \in G,$$

mit $q > 0$. Falls $0 < q < 1$, so nennt man g eine Kontraktion auf G.

Zur Rekapitulation:

Bemerkung 7.33. *Auf einer beschränkten Menge gilt: Differenzierbarkeit $\Rightarrow$ absolute Stetigkeit $\Rightarrow$ Lipschitz-Stetigkeit $\Rightarrow$ gleichmäßige Stetigkeit $\Rightarrow$ Stetigkeit.*

Zum Beispiel ist die Wurzelfunktion $f(x) = \sqrt{x}$ auf $[0,1]$ zwar gleichmäßig stetig aber nicht Lipschitz-stetig.

Der Banachsche Fixpunktsatz besagt nun, dass jede Selbstabbildung $g : G \to G$, welche eine Kontraktion ist, einen Fixpunkt besitzt:

Satz 7.34 (Banach'scher Fixpunktsatz)**.** *Es sei $G \subset \mathbb{R}^n$ eine nichtleere und abgeschlossene Punktmenge und $g : G \to G$ eine Lipschitz-stetige Selbstabbildung, mit Lipschitz-Konstante $q < 1$ (also eine Kontraktion).*

- *Dann existiert genau ein Fixpunkt $z \in G$ von g und die Iterationsfolge $(x^k)_k$ (7.17) konvergiert für jeden Startpunkt $x^0 \in G$, so dass $x^k \to z$ für $k \to \infty$.*
- *Es gilt die a priori Abschätzung:*

$$\|x^k - z\| \leq \frac{q^k}{1-q}\|x^1 - x^0\|.$$

- *Es gilt die a posteriori Abschätzung:*

$$\|x^k - z\| \leq \frac{q}{1-q}\|x^k - x^{k-1}\|.$$

Beweis:

(i) Existenz eines Grenzwertes. Da g eine Selbstabbildung in G ist, sind alle Iterierten $x^k = g(x^{k-1}) = \ldots = g^k(x^0)$ bei Wahl eines beliebigen Startpunkts $x^0 \in G$ definiert. Aufgrund der Kontraktionseigenschaft gilt:

$$\|x^{k+1} - x^k\| = \|g(x^k) - g(x^{k-1})\| \leq q\|x^k - x^{k-1}\| \leq \ldots \leq q^k\|x^1 - x^0\|.$$

Wir zeigen, dass $(x^k)_k$ eine Cauchy-Folge ist. Für jedes $l \geq m$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\|x^l - x^m\| &\leq \|x^l - x^{l-1}\| + \ldots + \|x^{m+1} - x^m\| \\
&\leq (q^{l-1} + q^{l-2} + \ldots + q^m)\|x^1 - x^0\| \\
&= q^m \frac{1 - q^{l-m}}{1-q}\|x^1 - x^0\| \\
&\leq q^m \frac{1}{1-q}\|x^1 - x^0\| \to 0 \quad (l \geq m \to 0).
\end{aligned} \tag{7.18}$$

D.h., $(x^l)_{l\in\mathbb{N}}$ ist eine Cauchy-Folge. Da alle Folgenglieder in G liegen und G als abgeschlossene Teilmenge des $\mathbb{R}^n$ vollständig ist, existiert der Grenzwert $x^l \to z \in G$.

(ii) Fixpunkteigenschaft. Als zweites weisen wir nach, dass z tatsächlich ein Fixpunkt von g ist. Aus der Stetigkeit von g folgt mit $x^k \to z$ auch $g(x^k) \to g(z)$. Dann gilt für die Iteration $x^{k+1} := g(x^k)$ bei Grenzübergang

$$z \leftarrow x^{k+1} = g(x^k) \to g(z) \quad (k \to \infty).$$

(iii) Eindeutigkeit. Die Eindeutigkeit folgt aus der Kontraktionseigenschaft. Es seien z und $\hat{z}$ zwei Fixpunkte von g. Dann ist

$$\|z - \hat{z}\| = \|g(z) - g(\hat{z})\| \leq q\|z - \hat{z}\|.$$

Dies kann wegen $q < 1$ nur dann gültig sein, wenn $\|z - \hat{z}\| = 0$, d.h. $z = \hat{z}$ ist. Damit ist der Fixpunkt eindeutig.

(iv) A priori Fehlerabschätzung. Es gilt mit (7.18)

$$\|z - x^m\| \xleftarrow[l\to\infty]{} \|x^l - x^m\| \leq q^m \frac{1}{1-q} \|x^1 - x^0\|.$$

(v) A posteriori Fehlerabschätzung. Es gilt wieder mit (7.18):

$$\|x^m - z\| \leq q \frac{1}{1-q} \|x^m - x^{m-1}\|.$$

□

Zur Anwendung des Banachschen Fixpunktsatzes auf eine Abbildung $g : G \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ müssen die beiden Voraussetzungen Selbstabbildung sowie Kontraktionseigenschaft nachgewiesen werden. Angenommen, g sei eine Kontraktion. Dann müssen wir die Existenz einer abgeschlossenen und nichtleeren Teilmenge von G nachweisen, welche von der Abbildung g auf sich selbst abgebildet wird. Angenommen, auf der Kugel

$$K_\rho(c) := \{x \in \mathbb{R}^n | \, \|x - c\| \leq \rho\}, \quad \rho > 0, c \in \mathbb{R}^n,$$

sei g eine Kontraktion mit Lipschitz-Konstante $q < 1$. Dann gilt für $x \in K_\rho(c)$:

$$\|g(x) - c\| \leq \|g(x) - g(c)\| + \|g(c) - c\|,$$

wobei $\|g(x) - g(c)\| \leq q\rho$. Falls zusätzlich gilt:

$$\|g(c) - c\| \leq (1 - q)\rho,$$

dann ist

$$\|g(x) - c\| \leq q\rho + (1 - q)\rho = \rho$$

und g bildet in sich selbst ab.

Als nächstes rekapitulieren wir den Schrankensatz, der die erste Ableitung (partielle Ableitung) mit der Lipschitz-Stetigkeit verknüpft:

Satz 7.35 (Schrankensatz)**.** *Die Abbildung $g : G \to \mathbb{R}^n$ sei stetig differenzierbar auf der konvexen und offenen Menge G. Es sei*

$$L := \sup_{\xi \in G} |Dg(\xi)| < \infty.$$

Dann gilt

$$\|g(x) - g(y)\| \leq L\,\|x - y\|, \quad x, y \in G,$$

mit der partiellen Ableitung (Jacobi-Matrix, weiter unten ausführlicher)

$$Dg(x) = \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_j}\right)_{i,j=1,\ldots,n} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Falls $\sup_{\xi \in G} \|Dg(\xi)\| < 1$, dann ist g eine Kontraktion auf G. Insbesondere gilt in 1D auf dem Intervall $G := [a, b]$:

$$q := \max_{\xi \in [a,b]} |Dg(\xi)|.$$

Beweis: Der 1D-Fall ist ein Spezialfall des höher-dimensionalen Falles. Aufgrund seiner Einfachheit beweisen wir ihn separat.

(i) Der eindimensionale Fall. Es seien $x, y \in [a, b]$. Nach dem reellen Mittelwertsatz gibt es ein $\xi \in [a, b]$, so dass

$$|g(x) - g(y)| = |Dg(\xi)(x - y)| = |Dg(\xi)|\;|x - y| \leq q|x - y|.$$

(ii) Der n-dimensionale Fall. Es seien $x, y \in G$. Wir setzen aus Normierungsgründen für $i = 1, \ldots, n$:

$$\phi_i(s) := g_i(x + s(y - x)), \quad 0 \leq s \leq 1.$$

Dann gilt

$$g_i(x) - g_i(y) = \phi_i(1) - \phi_i(0) = \int_0^1 \phi'(s)\,ds.$$

Für die Ableitung gilt

$$\phi_i'(s) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x + s(y - x))(y - x)_j.$$

Hiermit und den Stetigkeitseigenschaften der Vektornorm (eine Norm ist immer eine stetige Abbildung!) folgt

$$\begin{aligned}
\|g(y) - g(x)\| &= \left\| \int_0^1 Dg(x + s(y - x)) \cdot (y - x)\,ds \right\| \\
&\leq \int_0^1 \|Dg(x + s(y - x))\|\,ds\;\|y - x\| \\
&\leq \sup_{\xi \in G} \|Dg(\xi)\|\;\|y - x\|.
\end{aligned}$$

□

Zusammenfassen der Ergebnisse liefert das wichtige:

Korollar 7.36. *Zu jedem Fixpunkt $z \in G$ der Abbildung g mit $\|Dg(z)\| < 1$ gibt es eine Umgebung*

$$K_\rho = \{x \in \mathbb{R}^n | \, \|x - z\| \le \rho\} \subset G,$$

so das g eine Kontraktion von $K_\rho(z)$ in sich selbst ist.

Beispiel 7.37 (Konvergenz zur Lösung nicht-linearer Gleichungen)**.** *Zu $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ suchen wir eine Nullstelle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $f(x) = 0$. Mit einer Matrix $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ definieren wir die Iteration:*

$$x^0 \in \mathbb{R}^n, \quad x^{k+1} = x^k + C^{-1}f(x^k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Dieses Verfahren konvergiert, falls f auf einer Kugel $K_\rho(c) \subset \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar ist und

$$\sup_{\zeta\in K_\rho(c)} \|I + C^{-1}Df(\zeta)\| =: q < 1, \quad \|C^{-1}f(c)\| \le (1 - q)\rho.$$

Beispiel 7.38 (Lösung linearer Gleichungssysteme)**.** *Es seien $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$ gegeben. Das lineare Gleichungssystem ist äquivalent zur Nullstellenaufgabe*

$$f(x) := b - Ax = 0.$$

Die iterative Lösung (im Gegensatz zur direkten Lösung) kann mit einer regulären Matrix $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ als Fixpunktaufgabe hergeleitet werden:

$$x = g(x) := x + C^{-1}f(x) = x + C^{-1}(b - Ax) = (I - C^{-1}A)x + C^{-1}b.$$

Die Matrix $B := I - C^{-1}A$ nennen wir die Iterationsmatrix der zugehörigen Fixpunktiteration (auch sukzessive Approximation genannt):

$$x^{k+1} = Bx^k + C^{-1}b, \quad k = 1, 2, \dots.$$

Die Abbildung g ist wegen

$$\|g(x) - g(y)\| = \|B(x - y)\| \le \|B\|\|x - y\|$$

für $\|B\| < 1$ mit $B := I - C^{-1}A$ eine Kontraktion auf ganz $\mathbb{R}^n$. Dann konvergiert die Iterationsfolge gegen einen Fixpunkt von g und somit zur Lösung von $Ax = b$.

Bemerkung 7.39. *Später werden wir mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes verschiedene Verfahren zur iterativen Lösung von linearen Gleichungssystemen herleiten.*

Bemerkung 7.40. *Die Konvergenzanalyse der Fixpunktverfahren kann mit Hilfe der bereits diskutieren Techniken in Kapitel 7.6 durchgeführt werden.*

7.7.1. Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$

Aufgrund seiner herausragenden Bedeutung widmen wir dem Newton-Verfahren für höhere Dimensionen einen eigenen Abschnitt. Die prinzipiellen Aussagen (Existenz, quadratische Konvergenz, gedämpftes Newton-Verfahren, vereinfachtes Newton-Verfahren) sind mit dem 1D-Fall vergleichbar.

Es sei $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Wir suchen eine Lösung vom Nullstellenproblem $f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x)) = 0$. Wir beginnen mit einem Startwert $x^0 \in D$ und iterieren $x^k \to x^{k+1}$. Die Newton-Iteration wird entsprechend dem eindimensionalen Fall hergeleitet. Um die Iteration x^k herum linearisieren wir die Funktion $f(\cdot)$ durch Taylor-Entwicklung bis zur ersten Stufe. Es gilt in beliebiger Richtung $w^k \in \mathbb{R}^n$

$$f(x^k + w^k) = f(x^k) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j}(x^k) w_j^k + O(|w^k|^2).$$

Die neue Iteration $x^{k+1} = x^k + w^k$ ist als Nullstelle der Linearisierung definiert. D.h., wir suchen die Lösung $w^k \in \mathbb{R}^n$ des linearen Gleichungssystems

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^k) w_j^k = -f_i(x^k), \quad i = 1, \dots, n.$$

Mit der Jacobimatrix $Df : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n \times n}$

$$Df = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix},$$

schreibt sich das zu lösende lineare Gleichungssystem kurz als

$$Df(x^k) w^k = -f(x^k).$$

Hiermit lautet die Newton-Iteration mit Startwert $x^0 \in D$ für $k = 0, 1, 2, \dots$

$$x^0 \in D, \quad Df(x^k) w^k = -f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k + w^k. \tag{7.19}$$

Die Tatsache, dass die Ableitung von $f(x)$ im mehrdimensionalen Fall eine Matrix ist, stellt den wesentlichen Unterschied zum eindimensionalen Newton-Verfahren dar. Anstelle einer Ableitung sind nun n^2 Ableitungen zu berechnen. Und anstelle einer Division durch $Df(x_k)$ ist in jedem Schritt der Newton-Iteration ein lineares Gleichungssystem mit Koeffizientenmatrix $Df(x_k) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zu lösen.

Die zentrale Konvergenzaussage des Newton-Verfahrens wird im Satz von Newton-Kantorovich zusammengefasst. Hierzu sei $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ eine differenzierbare Abbildung. Mit $\| \cdot \|$ bezeichnen wir stets die euklidische Vektornorm und die von ihr induzierte Matrixnorm, also die Spektralnorm. Wir suchen eine Nullstelle $z \in D$ so dass $f(z) = 0$.

Satz 7.41 (Newton-Kantorovich)**.** *Es sei $D \subset \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge. Weiterhin sei $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ stetig-differenzierbar.*
(1) *Die Jacobi-Matrix Df sei gleichmäßig Lipschitz-stetig für alle $x, y \in D$:*

$$\|Df(x) - Df(y)\| \le L\|x - y\|, \quad x, y \in D, \tag{7.20}$$

mit einem $L < \infty$.
(2) *Die Jacobi-Matrix habe auf D eine gleichmäßig beschränkte Inverse*

$$\|Df(x)^{-1}\| \le \beta, \quad x \in D, \tag{7.21}$$

mit einem $\beta < \infty$.
(3) *Es gelte für den Startpunkt $x^0 \in D$:*

$$q := \alpha\beta L < \frac{1}{2}, \quad \alpha := \|Df(x^0)^{-1} f(x^0)\|. \tag{7.22}$$

(4) *Für $r := 2\alpha$ sei die abgeschlossene Kugel*

$$B_r(x_0) := \{x \in \mathbb{R}^n : \ \|x - x_0\| \le r\}$$

in der Menge D enthalten.
Dann besitzt die Funktion f genau eine Nullstelle $z \in B_r(x_0)$ und die Newton-Iteration

$$Df(x^k)\delta x = -f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k + \delta x, \quad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

konvergiert quadratisch gegen diese Nullstelle z. Es gilt die a priori Fehlerabschätzung

$$\|x^k - z\| \le 2\alpha q^{2^k - 1}, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

Beweis: Der Beweis zum Satz ist weitaus aufwändiger als im eindimensionalen Fall, daher geben wir zunächst eine Skizze an:

(i) Herleitung einiger Hilfsabschätzungen.

(ii) Wir zeigen: alle Iterierten x^k liegen in der Kugel $B_r(x_0)$. Weiter gilt die a priori Fehlerabschätzung.

(iii) Wir zeigen, dass die Iterierten $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge sind und somit einen Grenzwert z haben.

(iv) Wir zeigen, dass dieser Grenzwert eine Nullstelle von f sein muss.

(v) Wir zeigen, dass es nur eine Nullstelle in $B_r(x_0)$ geben kann.

Nun zum ausführlichen Beweis:

(i) Es seien $x, y, z \in D$. Da D konvex ist, gilt für alle $x, y \in D$ für $j = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} f_j(x) - f_j(y) &= \int_0^1 \frac{d}{ds} f_j(y + s(x-y))\,\mathrm{d}s \\ &= \int_0^1 \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_k}(y + s(x-y))(x_k - y_k)\,\mathrm{d}s. \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Jacobimatrix Df gilt kurz:

$$f(x) - f(y) = \int_0^1 Df(y + s(x-y))(x-y)\,\mathrm{d}s.$$

Wir ziehen auf beiden Seiten $Df(z)(x-y)$ ab:

$$f(x) - f(y) - Df(z)(x-y) = \int_0^1 \left((Df(y + s(x-y)) - Df(z)\right)(x-y)\,\mathrm{d}s.$$

Mit Hilfe der Lipschitz-Stetigkeit der Jacobimatrix Df folgern wir hieraus

$$\begin{aligned} \|f(y) - f(x) - Df(z)(y-x)\| &\le L\|y-x\| \int_0^1 \|s(x-z) + (1-s)(y-z)\|\,ds \\ &\le \frac{L}{2}\|y-x\|\big(\|x-z\| + \|y-z\|\big). \end{aligned}$$

Für die Wahl $z = x$ schließen wir damit auf

$$\|f(y) - f(x) - Df(x)(y-x)\| \le \frac{L}{2}\|y-x\|^2, \quad \forall x, y \in D. \tag{7.23}$$

Und für die die Wahl $z = x_0$ erhalten wir:

$$\|f(y) - f(x) - D(x_0)(y-x)\| \le rL\|y-x\|, \quad \forall x, y \in B_r(x_0). \tag{7.24}$$

(ii) Wir zeigen nun, dass alle Iterierten im Kreis $B_r(x^0)$ liegen. Dabei können wir gleich eine Vorbereitung für die a priori Fehlerabschätzung beweisen. Wir führen den Beweis über vollständige Induktion, und werden zeigen, dass gilt:

$$\|x^{k+1} - x^0\| \le r, \quad \|x^{k+1} - x^k\| \le \alpha q^{2^k - 1}, \quad k = 1, 2, \dots. \tag{7.25}$$

Wir starten mit $k = 0$. Es gilt für die Newton-Iteration $x^1 - x^0 = -Df(x^0)^{-1} f(x^0)$ mit Bedingung (7.22):

$$\|x^1 - x^0\| = \|Df(x^0)^{-1} f(x^0)\| = \alpha = \frac{r}{2} < r,$$

d.h. $x^1 \in B_r(x^0)$ und es gilt auch die Abschätzung

$$\|x^1 - x^0\| \le \alpha = \alpha q^{2^0 - 1}.$$

Induktionsschritt $k \to k+1$. Nach Induktionsvoraussetzung seien die beiden Gleichungen (7.25) wahr für $k \geq 0$. Also gilt $x^k \in B_r(x^0)$, so dass die Newton-Iterierte x^{k+1} wohl definiert ist. Dann gilt unter Ausnutzung von Bedingung (7.21), der Abschätzung (7.23), der Induktionsvoraussetzung (7.25) mit der Definition von q die folgende Abschätzungskette:

$$
\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x^k\| &= \|Df(x^k)^{-1} f(x^k)\| \\
&\leq \beta \, \|f(x^k)\| = \beta \| f(x^k) \underbrace{- f(x^{k-1}) - Df(x^{k-1})(x^k - x^{k-1})}_{=0} \| \\
&\leq \frac{\beta L}{2} \underbrace{\|x^k - x^{k-1}\|^2}_{\text{Induktion}} \leq \frac{\beta L}{2} \left(\alpha q^{2^{k-1}-1}\right)^2 \\
&= \frac{\alpha}{2} q^{2^k - 1} < \alpha q^{2^k-1}.
\end{aligned}
$$

Hiermit erhalten wir

$$
\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x^0\| &\leq \|x^{k+1} - x^k\| + \ldots + \|x^1 - x^0\| \\
&\leq \alpha(1 + q + q^3 + q^7 + \ldots + q^{2^k-1}) \\
&\leq \frac{\alpha}{1-q} \leq 2\alpha = r,
\end{aligned}
$$

d.h. es gilt $x^{k+1} \in B_r(x^0)$. Damit ist der Induktionsschritt von $k \to k+1$ gezeigt, d.h., die beiden Ungleichungen (7.25) sind gültig für $k+1$.

(iii) Nun zeigen wir, dass die $x^k \in B_r(x^0)$ eine Cauchy-Folge bilden. Es sei $m > 0$. Da $q < \frac{1}{2}$, gilt

$$
\begin{aligned}
\|x^k - x^{k+m}\| &\leq \|x^k - x^{k+1}\| + \ldots + \|x^{k+m-1} - x^{k+m}\| \\
&\leq \alpha(q^{2^k-1} + q^{2^{k+1}-1} + \ldots + q^{2^{m+k-1}-1}) \\
&= \alpha q^{2^k-1}(1 + q^{2^k} + \ldots + (q^{2^k})^{2^{m-1}-1}) \\
&\leq 2\alpha q^{2^k-1}
\end{aligned}
\tag{7.26}
$$

Damit ist gezeigt, dass $(x^k) \subset D$ eine Cauchy-Folge ist, da $q < \frac{1}{2}$. Im Banachraum $\mathbb{R}^n$ existiert der Limes

$$
z = \lim_{k\to\infty} x^k \in \mathbb{R}^n.
$$

Im Grenzübergang $k \to \infty$ erhalten wir dann mit (7.25):

$$
\|z - x^0\| \leq r,
$$

so dass $z \in B_r(x_0)$. Im Grenzübergang $m \to \infty$ in (7.26), verifizieren wir die Fehlerabschätzung des Satzes:

$$
\|x^k - z\| \leq 2\alpha q^{2^k-1}, \quad k = 0, 1, \ldots .
$$

(iv) Es bleibt zu zeigen, dass $z \in B_r(x^0)$ eine Nullstelle von f ist. Die Newton-Iterationsvorschrift sowie Bedingung (7.20) liefern

$$\begin{aligned}\|f(x^k)\| &= \|Df(x^k)(x^k - x^{k-1})\| \\ &\le \|Df(x^k) - Df(x^0) + Df(x^0)\| \, \|x^{k+1} - x^k\| \\ &\le \Big(L\|x^k - x^0\| + \|Df(x^0)\|\Big) \|x^{k+1} - x^k\| \to 0 \quad (k \to \infty).\end{aligned}$$

Daher gilt

$$f(x^k) \to 0, \quad k \to \infty.$$

Die Stetigkeit von f impliziert dann $f(z) = 0$.

(v) Schließlich ist zu beweisen, dass die gefundene Nullstelle $z \in B_r(x_0)$ die einzige sein kann. Die Eindeutigkeit wird mit Hilfe der Kontraktionseigenschaft und der Formulierung der Newton-Iteration als Fixpunktiteration gezeigt. Jede Nullstelle von $f(\cdot)$ ist Fixpunkt der vereinfachten Newton-Iteration:

$$g(x) := x - Df(x^0)^{-1} f(x).$$

Die Fixpunktfunktion $g(\cdot)$ ist Lipschitzstetig. Mit (7.24) gilt:

$$\begin{aligned}g(x) - g(y) &= x - y - Df(x^0)^{-1} f(x) + Df(x^0)^{-1} f(y) \\ &= Df(x^0)^{-1}(f(y) - f(x) - Df(x^0)(y - x)) \\ &\le \underbrace{\|Df(x^0)^{-1}\|}_{\le \beta} rL\|y - x\| \le \beta Lr\|y - x\|.\end{aligned}$$

Mit $r = 2\alpha$ folgt $\beta Lr \le 2\alpha\beta L \le 2q < 1$. D.h. g ist eine Kontraktion. Der Banach'sche Fixpunktsatz sagt, dass es nur einen Fixpunkt, also eine Nullstelle gibt. □

Bemerkung 7.42. *Der Satz von Newton-Kantorovich unterscheidet sich in einigen Punkten vom einfachen Satz 7.10 über das eindimensionale Newton-Verfahren. Der wesentliche Unterschied ist die Existenz der Nullstelle, welche beim Newton-Kantorovich folgt, bei Satz 7.10 gefordert werden muss. Darüber hinaus ist die erforderliche Regularität von f beim Newton-Kantorovich geringer. Statt zweimal stetiger Differenzierbarkeit müssen die ersten Ableitungen nur Lipschitzstetig sein. Der Satz von Newton-Kantorovich gilt natürlich auch im eindimensionalen Fall für Funktionen $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.*

Daher nun eine der Hauptanwendungen des vorherigen Satzes 7.41: das folgende lokale Konvergenzresultat:

Korollar 7.43. *Es sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ zweimal stetig-differenzierbar. Wir nehmen an, dass $z \in D$ eine Nullstelle mit regulärer Jacobi-Matrix $Df(z)$ ist. Dann ist das Newton-Verfahren lokal konvergent, d.h. es existiert eine Umgebung B um z, so dass das Newton-Verfahren für alle Startwerte $x^0 \in B$ konvergiert.*

Beweis: Den Beweis stellen wir als Übungsaufgabe. □

Korollar 7.44. *Korollar 7.43 stellt den Zusammenhang zu dem ein-dimensionalen Fall aus Satz 7.10 her: Dazu sei $z \in G$ eine Nullstelle von f und $\|\cdot\|_\infty$ die Maximumsnorm. Damit können die Konstanten*

$$m = \frac{1}{\beta}, \quad M = L$$

bestimmt werden. Dann gilt zusätzlich zur a priori Fehlerabschätzung, die a posteriori Schranke:

$$\|x^k - z\|_\infty \le \frac{1}{m}\|f(x^k)\|_\infty \le \frac{M}{2m}\|x^k - x^{k-1}\|_\infty^2, \quad k = 1, 2, \dots .$$

Beispiel 7.45 (Newton im $\mathbb{R}^n$)**.** *Wir suchen die Nullstelle der Funktion*

$$f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 - x^2 - y^2 \\ (x - 2y)/(1/2 + y) \end{pmatrix},$$

mit der Jacobi-Matrix

$$Df(x) = \begin{pmatrix} -2x & -2y \\ \frac{2}{1+2y} & -\frac{4+4x}{(1+2y)^2} \end{pmatrix}.$$

Die Nullstellen von f sind gegeben durch:

$$x \approx \pm(0.894427, 0.447214).$$

Wir starten die Iteration mit $x^0 = (1,1)^T$ und erhalten die Iterierten:

$$x^1 \approx \begin{pmatrix} 1.14286 \\ 0.357143 \end{pmatrix}, \quad x^2 \approx \begin{pmatrix} 0.92659 \\ 0.442063 \end{pmatrix}, \quad x^3 \approx \begin{pmatrix} 0.894935 \\ 0.447349 \end{pmatrix}, \quad x^4 \approx \begin{pmatrix} 0.894427 \\ 0.447214 \end{pmatrix}.$$

Nach nur vier Iterationen sind die ersten sechs Stellen exakt.

7.7.2. Praktische Aspekte des Newton-Verfahrens

Jeder Schritt des Newton-Verfahrens besteht aus den folgenden Bestandteilen:

1. Berechnung der Jacobi-Matrix
2. Lösen des linearen Gleichungssystems
3. Update und Kontrolle der Konvergenz

Im eindimensionalen Fall haben wir die Berechnung der Ableitung stets als eine einfache Aufgabe angesehen. Im $\mathbb{R}^n$ müssen jedoch n^2 Ableitungen

$$(Df)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \quad i, j = 1, \dots, n$$

berechnet werden. Der Aufwand hierzu kann wesentlich sein. In Schritt 2 muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Dies kann z.B. mit einer Zerlegungsmethode in $O(n^3)$ Operationen geschehen. Das anschließende Lösen mit Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen benötigt weitere $O(n^2)$ Operationen.

Wir haben beim eindimensionalen Newton-Verfahren bereits das vereinfachte Newton-Verfahren kennengelernt. Wird die Ableitung $f'(x^k)$ nicht zur stets aktuellen Näherung x^k bestimmt, sondern zu einem festen Wert $f'(c)$, so liegt immer noch Konvergenz vor (wenn auch nur noch lineare Konvergenz). Beim mehrdimensionalen Newton-Verfahren kann diese Vereinfachung ihre Stärke ganz ausspielen:

Algorithmus 7.46 (Vereinfachtes Newton-Verfahren)**.** *Gegeben sei ein Startwert* $x^0 \in \mathbb{R}^n$ *sowie* $c \in \mathbb{R}^n$.

1. *Berechne die Jacobimatrix* $Df(c)$
2. *Erstelle die LR-Zerlegung* $Df(c) = L(c)R(c)$
3. *Iteriere für* $k = 1, 2, \dots$
   a) *Löse* $L(c)R(c)w^{(k)} = -f(x^{k-1})$
   b) *Berechne* $x^{(k)} = x^{(k-1)} + w^{(k)}$.

Die beiden teuren Schritte des Newton-Verfahrens werden jeweils nur einmal durchgeführt. Die eigentliche Iteration kann mit Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen effizient durchgeführt werden. Dieses Verfahren kann verfeinert werden, in dem die Linearisierungsstelle $c \in \mathbb{R}^n$ nicht statisch gewählt wird, sondern regelmäßig aktualisiert wird. Eine Aktualisierung kann entweder nach einer festen Anzahl von Schritten $c = x^{(3)}$, $c = x^{(6)}$, usw. oder immer dann durchgeführt werden, wenn das Verfahren schlecht konvergiert. Zur Kontrolle der Konvergenz eignet sich z.B. das Residuum zweier aufeinander folgender Iterationen

$$\rho_k = \frac{|f(x^{(k)})|}{|f(x^{(k-1)})|}.$$

Falls $\rho_k > \rho_0$, falls also die Konvergenz schlecht ist, so wird mit $c = x^{(k)}$ ein Update der Jacobimatrix durchgeführt.

Eine zweite Herausforderung bei der praktischen Durchführung des Newton-Verfahrens ist die Wahl eines guten Startwerts. Eine Globalisierung, also eine Vergrößerung des Konvergenzbereiches kann durch Dämpfung erreicht werden. Hierzu wird Schritt *3.b)* in Algorithmus 7.46 durch die Vorschrift

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \omega_k w^{(k)}$$

ersetzt, mit einem Dämpfungsparameter $\omega_k \in (0, 1]$.

Die Vergrößerung des Konvergenzbereiches (Globalisierung) kann mit Hilfe eines Dämpfungsparameters erreicht werden. Hierzu wird die Newton-Iteration abgewandelt:

$$x^{k+1} = x^k - \omega_k Df(x^k)^{-1} f(x^k).$$

Satz 7.47 (Gedämpftes Newton-Verfahren)**.** *Unter den Voraussetzungen von Satz 7.41 erzeugt die gedämpfte Newton-Iteration mit*

$$\omega_k := \min\{1, \frac{1}{\alpha_k \beta L}\}, \quad \alpha_k := \|Df(x^k)^{-1} f(x^k)\|$$

eine Folge $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$, für die nach k_* Schritten

$$q_* := \alpha_{k_*} \beta L < \frac{1}{2}$$

erfüllt ist. Ab dann konvergiert x^k quadratisch und es gilt die a priori Fehlerabschätzung

$$\|x^k - z\| \leq \frac{\alpha}{1 - q_*} q_*^{2^k - 1}, \quad k \geq k_*.$$

Beweis: In [10]. $\square$

In der praktischen Anwendung wird der Dämpfungsparameter oft über die sogenannte *Line-Search*-Strategie bestimmt:

Algorithmus 7.48 (Newton-Verfahren mit Line-Search)**.** *Gegeben sei ein Startwert $x^0 \in \mathbb{R}^n$ sowie $\sigma \in (0,1)$. Iteriere für $k = 0, 1, \dots$*

(i) Löse $Df(x^k) w^k = -f(x^k)$

(ii) Starte mit $\omega_0 = 1$ und iteriere für $l = 0, 1, \dots$

$$x^{k+1} = x^k + \omega_l w^k, \quad \omega_{l+1} = \sigma \omega_l,$$

solange bis $|f(x^{k+1})| < |f(x^k)|$.

Der Line-Search Algorithmus versucht zunächst ohne Dämpfung zu iterieren. Besitzt die neue Approximation allerdings ein größeres Residuum $|f(x^{k+1})| > |f(x^k)|$, so wird der Dämpfungsparameter schrittweise reduziert. Auf diese Weise wird monotone Konvergenz im Residuum erzwungen.

8. Numerische Iterationsverfahren für lineare Gleichungssysteme

In diesem Kapitel untersuchen wir numerische Iterationsverfahren zur Approximation der Lösung von linearen Gleichungssystemen. Im vorangegangenen Abschnitt haben wir bereits gesehen, dass wir jedes lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und Vektoren $x, b \in \mathbb{R}^n$ per

$$f(x) = b - Ax,$$

in ein Nullstellen-Problem umwandeln können. In diesem Kapitel werden wir Analog zum Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$ Fixpunktiterationen $x^{k+1} = g(x^k)$ untersuchen. Das zentrale Hilfsmittel ist der Banachsche Fixpunktsatz.

Die in Kapitel 3 kennengelernten Zerlegungsverfahren (also LR, Cholesky sowie QR-Zerlegung) haben alle eine kubische Laufzeit $O(n^3)$. Gerade bei sehr großen Problemen wächst der Aufwand so schnell an, dass die Lösung in sinnvoller Zeit nicht zu erreichen ist, siehe Tabelle 3.1. Neben der Laufzeit spielt auch der Speicheraufwand eine Rolle. Zur Speicherung einer voll besetzten Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit $n = 1\,000\,000$ sind bei doppelter Genauigkeit etwa 7 Terabyte Speicher notwendig. Dies ist nur auf größten Parallelrechnern möglich. Direkte Zerlegungsroutinen wie die LR-Zerlegung sind jedoch denkbar schlecht zur Parallelisierung geeignet. Die linearen Gleichungssysteme die aus den meisten Anwendungen resultieren (etwa bei der Diskretisierung von Differentialgleichungen) sind sehr dünn besetzt, d.h., in jeder Zeile stehen nur einige wenige Einträge. Eine dünn besetzte Matrix mit $n = 1\,000\,000$ aber nur 100 Einträgen pro Zeile benötigt zur Speicherung nur etwa 750 MB und passt in jeden Laptop. In Abschnitt 3.5 haben wir Sortierverfahren kennengelernt, um dieses dünne Besetzungsmuster auch für eine LR-Zerlegung nutzbar zu machen. Im Allgemeinen können die Matrizen L und R aber voll besetzt sein und somit den zur Verfügung stehenden Speicher wieder bei weitem übersteigen.

Ein weiterer Nachteil der Zerlegungsverfahren sind numerische Stabilitätsprobleme. Durch Rundungsfehler beim Zerlegungsprozess gilt für die LR-Zerlegung üblicherweise nur $A \neq \tilde{L}\tilde{R}$. D.h., obwohl die LR-Zerlegung eine direkte Methode darstellt, kann das Gleichungssystem nicht exakt gelöst werden. Mit der Nachiteration haben wir in Abschnitt 3.6 eine Methode kennengelernt, um diesen Fehlereinfluss durch sukzessive Iteration zu verringern. Mit der gestörten LR-Zerlegung $A \approx \tilde{L}\tilde{R}$ haben wir die Iteration

$$x^{k+1} = x^k + \tilde{R}^{-1}\tilde{L}^{-1}(b - Ax^k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

definiert. Obwohl $\tilde{L}$ und $\tilde{R}$ nicht exakt sind, konvergiert diese Iteration (falls das Residuum $d^k := b - Ax^k$ exakt berechnet werden kann), siehe Satz 3.31.

In diesem Abschnitt werden wir auf der Basis der Nachiteration eine eigene Verfahrensklasse zur iterativen Lösung großer Gleichungssysteme entwickeln. Dazu sei $C \approx A^{-1}$ eine Approximation an die Inverse (etwa $C := \tilde{R}^{-1}\tilde{L}^{-1}$). Dann definieren wir:

Definition 8.1 (Fixpunktverfahren zum Lösen linearer Gleichungssysteme)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sowie $b \in \mathbb{R}^n$ und $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Für einen beliebigen Startwert $x^0 \in \mathbb{R}^n$ iteriere für $k = 1, 2, \dots$*

$$x^k = x^{k-1} + C(b - Ax^{k-1}). \tag{8.1}$$

Alternativ führen wir die Bezeichnungen $B := I - CA$ und $c := Cb$ ein. Dann gilt:

$$x^k = Bx^{k-1} + c.$$

Aufgrund der Konstruktion kann man sich leicht klarmachen, dass durch die Vorschrift $g(x) = Bx + c = x + C(b - Ax)$ wirklich eine Fixpunktiteration mit der Lösung von $Ax = b$ als Fixpunkt gegeben ist. Die Konvergenz von allgemeinen (auch linearen) Fixpunktiterationen kann leicht mit dem Banachschen Fixpunktsatz untersucht werden. Hierzu ist die Kontraktionseigenschaft nachzuweisen:

$$\|g(x) - g(y)\| \leq \|B\|\,\|x - y\|.$$

Es ergibt sich jedoch das Dilemma, das je nach verwendeter Matrixnorm $\|\cdot\|$ unterschiedliche Konvergenzresultate vorhergesagt werden. Für eine Matrix $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ kann etwa $\|B\|_2 < 1$ aber $\|B\|_\infty > 1$ gelten. Um uns in der Analyse von konkreten Matrixnormen zu befreien beweisen wir zunächst einen Hilfsatz:

Hilfsatz 8.2 (Matrixnorm und Spektralradius)**.** *Zu jeder beliebigen Matrix $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und zu jedem $\epsilon > 0$ existiert eine natürliche Matrixnorm $\|\cdot\|_\epsilon$, so dass gilt:*

$$\operatorname{spr}(B) \leq \|B\|_\epsilon \leq \operatorname{spr}(B) + \epsilon.$$

Beweis: Für den allgemeinen Fall verweisen wir auf [10]. Hier machen wir uns nur klar, dass die Aussage für symmetrische Matrizen gilt. Denn in diesem Fall, siehe Satz 2.15 gilt sogar $\operatorname{spr}(B) = \|B\|_2$. □Im nun Folgenden werden wir daher stets mit dem Spektralradius als Norm operieren. Mit diesem Hilfsatz zeigen wir das fundamentale Resultat über allgemeine lineare Fixpunktiterationen:

Satz 8.3 (Fixpunktverfahren zum Lösen linearer Gleichungssysteme)**.** *Die Iteration (8.1) konvergiert für jeden Startwert $x^0 \in \mathbb{R}^n$ genau dann gegen die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$ falls $\rho := \operatorname{spr}(B) < 1$. Dann gilt das asymptotische Konvergenzverhalten*

$$\lim_{k\to\infty} \left(\frac{\|x^k - x\|}{\|x^0 - x\|} \right)^{1/k} = \operatorname{spr}(B).$$

BEWEIS: Nach einigen Vorbereitungen zeigen wir in Schritt *(i)*, dass aus $\mathrm{spr}(B) < 1$ die Konvergenz $x^k \to x$ folgt. In Schritt *(ii)* zeigen wir die Rückrichtung und schließlich in Schritt *(iii)* die Konvergenzaussage.

(0) Zunächst weisen wir nach, dass die Iteration überhaupt eine Fixpunktiteration ist. Für die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$ gilt:

$$Bx + c = (I - CA)x + Cb = x - C\underbrace{(Ax - b)}_{=0} = x.$$

Wir definieren den Fehler $e^k := x^k - x$ und erhalten bei Ausnutzen der Fixpunkteigenschaft $x = Bx + c$ die Iterationsvorschrift:

$$e^k = x^k - x = Bx^{k-1} + c - (Bx + c) = Be^{k-1}.$$

Entsprechend gilt:

$$e^k = B^k e^0 = B^k(x^0 - x). \tag{8.2}$$

(i) Hilfsatz 8.2 besagt, dass zu jedem $\epsilon > 0$ eine natürlichen Matrixnorm $\|\cdot\|_\epsilon$ existiert mit

$$\mathrm{spr}(B) \le \|B\|_\epsilon \le \mathrm{spr}(B) + \epsilon.$$

Es sei nach Voraussetzung $spr(B) < 1$, dann existiert ein $\epsilon > 0$ mit

$$\|B\|_\epsilon \le \mathrm{spr}(B) + \epsilon < 1,$$

und aus (8.2) erhalten wir sofort bei $k \to \infty$ in der entsprechenden induzierten Vektornorm $\|\cdot\|_\epsilon$:

$$\|e^k\|_\epsilon = \|B^k e^0\|_\epsilon \le \|B^k\|_\epsilon \|e^0\|_\epsilon \le \|B\|_\epsilon^k \|e^0\|_\epsilon \to 0 \quad (k \to \infty).$$

Da im $\mathbb{R}^n$ alle Normen äquivalent sind, konvergiert also $x^k \to x$ für $k \to \infty$.

(ii) Die Iteration sei konvergent $x^k \to x$. Es sei $w \in \mathbb{R}^n$ ein Eigenvektor zum betragsmäßig größten Eigenwert $\lambda_{\max}$ von $B = I - CA$. Dann gilt für $x^0 = x + w$, also $w = x^0 - x = -e^0$ mit (8.2):

$$\lambda_{\max}^k w = B^k w = -B^k e^0 = -e^k.$$

Da die Iteration nach Voraussetzung konvergent ist (für jeden Startwert) folgt

$$-e^k = \lambda_{\max}^k w \to 0 \quad (k \to \infty),$$

also notwendigerweise

$$\mathrm{spr}(B) = |\lambda_{\max}| < 1.$$

(iii) Fehlerabschätzung: Aufgrund der Äquivalenz aller Normen existieren Konstanten m, M mit $m \le M$ so dass:

$$m\|x\| \le \|x\|_\epsilon \le M\|x\|, \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Damit gilt

$$\|e^k\| \leq \frac{1}{m}\|e^k\|_\epsilon = \frac{1}{m}\|B^k e^0\|_\epsilon \leq \frac{1}{m}\|B\|_\epsilon^k \|e^0\|_\epsilon \leq \frac{M}{m}(\operatorname{spr}(B)+\epsilon)^k \|e^0\|.$$

Wegen

$$\left(\frac{M}{m}\right)^{1/k} \quad \to 1, \quad (k \to \infty)$$

folgt damit

$$\lim_{k\to\infty}\left(\frac{\|e^k\|}{\|e^0\|}\right)^{1/k} \leq \operatorname{spr}(B) + \epsilon.$$

Da $\epsilon > 0$ beliebig klein gewählt wird, folgt hiermit die Behauptung. □

8.1. Konstruktion von Fixpunktverfahren

Satz 8.3 legt das theoretische Fundament für allgemeine Fixpunkt-Iterationen. Für den Spektralradius $\rho := \operatorname{spr}(B) = \operatorname{spr}(I - CA)$ muss gelten $\rho < 1$. Ziel dieses Abschnittes ist die Konstruktion von Iterationsmatrizen C, welche

- möglichst Nahe an der Inversen $C \approx A^{-1}$ liegen, damit $\operatorname{spr}(I - CA) \ll 1$,
- eine möglichst einfache Berechnung der Iteration $x^k = Bx^{k-1} + c$ ermöglichen.

Die erste Forderung ist einleuchtend und $C = A^{-1}$ stellt in diesem Sinne die optimale Matrix dar. Die zweite Bedingung beschreibt den Aufwand zum Durchführen der Fixpunktiteration. Wählen wir etwa $C = \tilde{R}^{-1}\tilde{L}^{-1}$ so bedeutet jeder Schritt ein Vorwärts- und ein Rückwärtseinsetzen, d.h. einen Aufwand der Größenordnung $O(n^2)$. Hinzu kommen die $O(n^3)$ Operationen zum einmaligen Erstellen der Zerlegung. Die Wahl $C = I$ erlaubt eine sehr effiziente Iteration mit $O(n)$ Operationen in jedem Schritt und Bedarf keines zusätzlichen Aufwands zum Erstellen der Iterationsmatrix C. Die Einheitsmatrix I ist jedoch im Allgemeinen eine sehr schlechte Approximation von A^{-1}. Beide Forderungen sind Maximalforderungen und scheinen sich zu widersprechen. Die Wahl von $C = I$ führt auf die *Richardson-Iteration*:

Definition 8.4 (Richardson-Iteration)**.** *Zur Lösung von $Ax = b$ sei $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Startwert. Iteriere für $k = 1, 2, \dots$:*

$$x^k = x^{k-1} + \omega(b - Ax^{k-1}),$$

mit einem Relaxationsparameter $\omega > 0$.

Zur Konstruktion weiterer einfacher iterativer Verfahren spalten wir die Matrix A additiv auf zu $A = L + D + R$, mit

$$A = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & & \dots & 0 \\ a_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \dots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}}_{=:L} + \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & & \dots & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & \dots & & a_{nn} \end{pmatrix}}_{=:D} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & \dots & & 0 \end{pmatrix}}_{=:R}.$$

Diese additive Zerlegung ist nicht mit der multiplikativen LR-Zerlegung zu verwechseln. Ist die Matrix A bekannt, so kann die additive Zerlegung in L, D, R ohne weitere Berechnungen angegeben werden.

Wir definieren die zwei wichtigsten Iterationsverfahren:

Definition 8.5 (Jacobi-Verfahren). *Zur Lösung von $Ax = b$ mit $A = L + D + R$ sei $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Startwert. Iteriere für $k = 1, 2, \dots$:*

$$x^k = x^{k-1} + D^{-1}(b - Ax^{k-1}),$$

bzw. mit der Jacobi-Iterationsmatrix $J := -D^{-1}(L + R)$

$$x^k = Jx^{k-1} + D^{-1}b.$$

Definition 8.6 (Gauß-Seidel-Verfahren). *Zur Lösung von $Ax = b$ mit $A = L + D + R$ sei $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Startwert. Iteriere für $k = 1, 2, \dots$:*

$$x^k = x^{k-1} + (D + L)^{-1}(b - Ax^{k-1}),$$

bzw. mit der Gauß-Seidel-Iterationsmatrix $H := -(D + L)^{-1}R$

$$x^k = Hx^{k-1} + (D + L)^{-1}b.$$

Diese beiden Fixpunktverfahren sind einfach, aber dennoch sehr gebräuchlich. Es gilt:

Satz 8.7 (Durchführung des Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahrens). *Ein Schritt des Jacobi- bzw. Gauß-Seidel-Verfahrens ist jeweils in $n^2 + O(n)$ Operationen durchführbar. Für jeden Schritt des Jacobi-Verfahren gilt die Index-Schreibweise*

$$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{k-1}\right), \quad i = 1, \dots, n,$$

für das Gauß-Seidel-Verfahren gilt die Vorschrift:

$$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij}x_j^k - \sum_{j>i} a_{ij}x_j^{k-1}\right), \quad i = 1, \dots, n.$$

Beweis: Übung. □

Jeder Schritt dieser Verfahren benötigt mit $O(n^2)$ größenordnungsmäßig genauso viele Operationen wie die Nachiteration mit der LR-Zerlegung. Bei Jacobi- und Gauß-Seidel sind jedoch weit schlechtere Konvergenzraten zu erwarten (wenn die Verfahren überhaupt konvergieren, dieser Nachweis steht hier noch aus!). Der Vorteil der einfachen Iterationsverfahren zeigt sich erst bei dünn besetzten Matrizen. Hat eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nur $O(n)$ Einträge, so benötigt jeder Iterationsschritt nur $O(n)$ Operationen. Für eine dünn besetzte Matrix kann die LR-Zerlegung $A = LR$ aus voll besetzten Matrizen L und R bestehen. Dann benötigt das Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen weiterhin $O(n^2)$ arithmetische Operationen.

8.2. Konvergenzkriterium für Jacobi- und Gauß-Seidel-Iteration

Zur Untersuchung der Konvergenz muss gemäß Satz 8.3 der Spektralradius der Iterationsmatrizen $J = -D^{-1}(L+R)$ sowie $H := -(D+L)^{-1}R$ untersucht werden. Im Einzelfall ist diese Untersuchung nicht ohne weiteres möglich und einer Matrix A kann der entsprechende Spektralradius nur schwer angesehen werden. Daher leiten wir in diesem Abschnitt einfach überprüfbare Kriterien her, um eine Aussage über die Konvergenz der beiden Verfahren treffen zu können. Zunächst gilt:

Satz 8.8 (Starkes Zeilensummenkriterium)**.** *Falls die Zeilensummen der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ der* strikten Diagonaldominanz *genügen*

$$\sum_{k=1,k\neq j}^{n} |a_{jk}| < |a_{jj}|, \quad j = 1,\dots,n,$$

so gilt $spr(J) < 1$ bzw. $spr(H) < 1$. Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren konvergieren.

Beweis: Wir beweisen den Satz für beide Verfahren gleichzeitig. Es sei λ_J ein Eigenwert von J und λ_H ein Eigenwert von H. Mit v_J und v_H bezeichnen wir zugehörige normierte Eigenvektoren $\|v_J\|_\infty = \|v_H\|_\infty = 1$. Dann gilt:

$$\lambda_J v_J = J v_J = -D^{-1}(L+R)v_J,$$

und für das Gauß-Seidel-Verfahren

$$\lambda_H v_H = H v_H = -(D+L)^{-1} R v_H \quad \Leftrightarrow \quad \lambda v_H = -D^{-1}(\lambda_H L + R)v_H.$$

Für das Jacobi-Verfahren folgt

$$|\lambda_J| \le \|D^{-1}(L+R)\|_\infty \|v_J\|_\infty = \|D^{-1}(L+R)\|_\infty \le \max_{j=1,\dots,n} \left\{ \frac{1}{|a_{jj}|} \sum_{k=1,k\neq j}^{n} |a_{jk}| \right\} < 1,$$

d.h. alle Eigenwerte sind betragsmäßig kleiner 1 und das Jacobi-Verfahren konvergiert. Für das Gauß-Seidel-Verfahren gilt

$$\begin{aligned}|\lambda_H| &\le \|D^{-1}(\lambda_H L + R)\|_\infty \|v_H\|_\infty = \|D^{-1}(\lambda_H L + R)\|_\infty \\ &\le \max_{j=1,\dots,n} \left\{ \frac{1}{|a_{jj}|} \left(\sum_{k<j} |\lambda_H||a_{jk}| + \sum_{k>j} |a_{jk}| \right) \right\}. \end{aligned} \tag{8.3}$$

Wir zeigen $|\lambda_H| < 1$ über ein Widerspruchsargument. Angenommen also, $|\lambda_H| \ge 1$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}\max_{j=1,\dots,n} \left\{ \frac{1}{|a_{jj}|} \left(\sum_{k<j} |\lambda_H||a_{jk}| + \sum_{k>j} |a_{jk}| \right) \right\} &= |\lambda_H| \max_{j=1,\dots,n} \left\{ \frac{1}{|a_{jj}|} \left(\sum_{k<j} |a_{jk}| + \frac{1}{|\lambda_H|} \sum_{k>j} |a_{jk}| \right) \right\} \\ &\le |\lambda_H| \max_{j=1,\dots,n} \left\{ \frac{1}{|a_{jj}|} \left(\sum_{k<j} |a_{jk}| + \sum_{k>j} |a_{jk}| \right) \right\} = |\lambda_H| \underbrace{\|D^{-1}(L+R)\|_\infty}_{<1}.\end{aligned}$$

Jetzt führt (8.3) und die strikte Diagonaldominanz zum Widerspruch:

$$|\lambda_H| \le |\lambda_H| \|D^{-1}(L+R)\|_\infty < |\lambda_H|.$$

Es gilt notwendigerweise $|\lambda_H| < 1$. □

Dieses Kriterium ist einfach zu überprüfen und erlaubt sofort eine Einschätzung, ob Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren bei einer gegebenen Matrix konvergieren. Es zeigt sich jedoch, dass die strikte Diagonaldominanz eine zu starke Forderung darstellt: die schon bekannte Modellmatrix der Form

$$A = \begin{pmatrix} B & -I & & \\ -I & B & -I & \\ & -I & B & -I \\ & & -I & B \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & \\ & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix},$$

ist nur diagonaldominant (siehe Definition 3.17), jedoch nicht strikt Diagonaldominant. Es zeigt sich aber, dass sowohl Jacobi- als auch Gauß-Seidel-Verfahren dennoch konvergieren. Zur Abschwächung der Voraussetzungen definieren wir wiefolgt:

Definition 8.9 (Irreduzibel). *Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt irreduzibel, wenn es keine Permutationsmatrix P gibt, so dass die Matrix A durch Spalten- und Zeilen in eine Block-Dreiecksmatrix zerfällt:*

$$PAP^T = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} \end{pmatrix}$$

mit den Matrizen $\tilde{A}_{11} \in \mathbb{R}^{p\times p}$, $\tilde{A}_{22} \in \mathbb{R}^{q\times q}$, $\tilde{A}_{21} \in \mathbb{R}^{q\times p}$, mit $p, q > 0, p + q = n$.

Ob eine gegebene Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ irreduzibel ist lässt sich nicht unmittelbar bestimmen. Oft hilft das folgende äquivalente Kriterium, welches einfacher zu überprüfen ist:

Satz 8.10 (Irreduzibel). *Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist genau dann irreduzibel, falls der zugehörige* gerichtete Graph

$$\mathcal{G}(A) = \{\textit{Knoten: } \{1,2,\dots,n\}, \textit{Kanten: } \{(i,j),\ a_{ij} \neq 0\}\}$$

zusammenhängend ist. Das heißt: zu zwei beliebigen Knoten *i und j existiert ein Pfad $(i,i_1) = (i_0,i_1),(i_1,i_2),\dots,(i_{m-1},i_m) = (i_{m-1},j)$ mit Kante $(i_{k-1},i_k) \in \mathcal{G}(A)$.*

Für den Beweis verweisen wir auf [10]. Nach dieser alternativen Charakterisierung bedeutet die Irreduzibilität, dass zu je zwei Indizes i,j ein Pfad $i = i_0 \mapsto i_1 \mapsto \dots \mapsto i_m = j$ besteht, so dass $a_{i_{k-1},i_k} \neq 0$ ist. Anschaulich entspricht dies einem abwechselnden Springen in Zeilen und Spalten der Matrix A, wobei nur Einträge ungleich Null getroffen werden dürfen.

Nun gilt:

Satz 8.11 (Schwaches Zeilensummenkriterium). *Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sei irreduzibel und es gelte das* schwache Zeilensummenkriterium*, d.h., die Matrix A sei diagonaldominant:*

$$\sum_{k=1,k\neq j}^{n} |a_{jk}| \leq |a_{jj}|, \quad j = 1,\dots,n,$$

und in mindestens einer Zeile $r \in \{1,\dots,n\}$ gelte starke Diagonaldominanz:

$$\sum_{k=1,k\neq r}^{n} |a_{rk}| < |a_{rr}|.$$

Dann ist A regulär und es gilt $spr(J) < 1$ bzw. $spr(H) < 1$. D.h., Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren konvergieren.

Beweis: *(i)* Durchführbarkeit der Verfahren: Aufgrund der Irreduzibilität von A gilt notwendig

$$\sum_{k=1}^{n} |a_{jk}| > 0, \quad j = 1,\dots,n.$$

Wegen der vorausgesetzten Diagonaldominanz folgt dann hieraus $a_{jj} \neq 0$ für $j = 1,2,\dots,n$.

(ii) Zeige $spr(J) \leq 1$ und $spr(H) \leq 1$: Diese Aussage erhalten wir entsprechend zum Vorgehen im Beweis zu Satz 8.8. Es bleibt zu zeigen, dass kein Eigenwert den Betrag Eins hat.

(iii) Nachweis, dass $|\lambda| < 1$: Angenommen, es gebe einen Eigenwert $\lambda \in \sigma(J)$ mit $|\lambda| = 1$. Es sei $v \in \mathbb{C}^n$ der zugehörige normierte Eigenvektor mit $\|v\|_\infty = 1$. Insbesondere gelte $|v_s| = \|v\|_\infty = 1$ für ein $s \in \{1,\dots,n\}$. Dann erhalten wir aufgrund der Struktur der

Iterationsmatrix (hier nun explizit für Jacobi)

$$J = -D^{-1}(L+R) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-a_{12}}{a_{11}} & \frac{-a_{13}}{a_{11}} & \dots & \frac{-a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{-a_{21}}{a_{22}} & 0 & \frac{-a_{23}}{a_{22}} & \dots & \frac{-a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \frac{-a_{n1}}{a_{nn}} & \dots & \dots & & 0 \end{pmatrix}$$

die folgende Abschätzung:

$$|v_i| = \underbrace{|\lambda|}_{=1} |v_i| = |(Av)_i| \le \sum_{k\ne i} \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} |v_k| \le \sum_{k\ne i} \frac{|a_{ik}|}{|a_{ii}|} \le 1, \quad i = 1,2,\dots,n, \tag{8.4}$$

wobei wir die Struktur von J in der ersten Ungleichung, $|v_i| \le \|v\|_\infty = 1$ in der zweiten und die schwache Diagonaldominanz in der letzten Abschätzung verwendet haben.

Aufgrund der Irreduzibilität gibt es zu je zwei Indizes s, r stets eine Kette von Indizes $i_1 \mapsto i_2 \mapsto \dots \mapsto i_m$ mit $i_m \in \{1,\dots,n\}$, so dass

$$a_{s,i_1} \ne 0, a_{i_1,i_2} \ne 0, \dots, a_{i_m,r} \ne 0.$$

Durch mehrfache Anwendung von (8.4) folgt der Widerspruch (nämlich, dass $|\lambda| = 1$):

$$\begin{aligned} |v_r| = |\lambda v_r| &\le \frac{1}{|a_{rr}|} \sum_{k\ne r} |a_{rk}|\, \|v\|_\infty < \|v\|_\infty \quad \text{(strikte DD in einer Zeile)}, \\ |v_{i_m}| = |\lambda v_{i_m}| &\le \frac{1}{|a_{i_m,i_m}|} \left[\sum_{k\ne i_m, r} |a_{i_m,k}|\, \|v\|_\infty + |a_{i_m,r}|\, |v_r| \right] < \|v\|_\infty, \\ &\vdots \\ |v_{i_1}| = |\lambda v_{i_1}| &\le \frac{1}{|a_{i_1,i_1}|} \left[\sum_{k\ne i_1, i_1} |a_{i_1,k}|\, \|v\|_\infty + |a_{i_1,i_2}|\, |v_{i_2}| \right] < \|v\|_\infty, \\ \|v\|_\infty = |\lambda v_s| &\le \frac{1}{|a_{ss}|} \left[\sum_{k\ne s, i_1} |a_{s,k}|\, \|v\|_\infty + |a_{s,i_1}|\, |v_{i_1}| \right] < \|v\|_\infty. \end{aligned}$$

Daher muss $spr(J) < 1$.

Mit analoger Schlussfolgerung wird $spr(H) < 1$ bewiesen. Hierzu nutzt man ebenfalls die spezielle Struktur der Iterationsmatrix H sowie die umgekehrte Dreiecksungleichung ($|a-b| \ge ||a| - |b||$), um (8.4) zu erhalten. Die restliche Argumentation erfolgt dann auf analogem Wege. $\square$

Mit diesem Satz kann die Konvergenz von Jacobi- sowie Gauß-Seidel-Verfahren für die Modellmatrizen nachgewiesen werden. Denn diese ist strikt diagonaldominant.

Beispiel 8.12 (Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren bei der Modellmatrix)**.** *Wir betrachten das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit der Modellmatrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \tag{8.5}$$

sowie der rechten Seite $b \in \mathbb{R}^n$ mit $b = (1, \dots, 1)^T$. Zu i, j mit $i < j$ gilt

$$a_{i,i} \neq 0 \to a_{i,i+1} \neq 0 \to a_{i+1,i+2} \neq 0 \to a_{i+2,i+3} \neq 0 \to \cdots \to a_{j-1,j} \neq 0.$$

Die Matrix ist also irreduzibel, weiter diagonaldominant und in erster und letzter Zeile auch stark diagonaldominant. Jacobi und Gauß-Seidel-Verfahren konvergieren. Experimentell bestimmen wir für die Problemgröße $n = 10 \cdot 2^k$ für $k = 2, 3, \dots$ die Anzahl der notwendigen Iterationsschritte, sowie die Rechenzeit (Core i7-Prozessor '2011) zur Approximation des Gleichungssystems mit einer Fehlertoleranz $\|x^k - x\| < 10^{-4}$:

Matrixgröße	*Jacobi*		*Gauß-Seidel*	
	Schritte	*Zeit (sec)*	*Schritte*	*Zeit (sec)*
80	*9 453*	0.02	*4 727*	0.01
160	*37 232*	0.13	*18 617*	0.06
320	*147 775*	0.92	*73 888*	0.43
640	*588 794*	7.35	*294 398*	3.55
1 280	*2 149 551*	58	*1 074 776*	29
2 560	*8 590 461*	466	*4 295 231*	233

Es zeigt sich, dass für das Gauß-Seidel-Verfahren stets halb so viele Iterationsschritte notwendig sind, wie für das Jacobi-Verfahren. Weiter steigt die Anzahl der notwendigen Iterationsschritte mit der Matrixgröße n. Bei doppelter Matrixgröße steigt die Anzahl der Iterationen etwa um den Faktor 4. Der Zeitaufwand steigt noch stärker mit einem Faktor von etwa 8, da jeder einzelne Schritt einen größeren Aufwand bedeutet. Diesen Zusammenhang zwischen Matrixeigenschaft und Konvergenzgeschwindigkeit werden wir später genauer untersuchen.

Wir merken hier noch an, dass Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren effizient unter Ausnutzung der dünnen Besetzungsstruktur programmiert wurden. Dennoch steigt der zeitliche Aufwand zur Approximation mit vorgegebener Genauigkeit mit dritter Ordnung in der Problemgröße n.

8.3. Relaxationsverfahren: das SOR-Verfahren

Das vorangehende Beispiel zeigt, dass Jacobi- sowie Gauß-Seidel-Verfahren sehr langsam konvergieren. Für die Modellmatrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ steigt die Anzahl der notwendigen Iterationsschritte (zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit) quadratisch $O(n^2)$. Obwohl jeder einzelne Schritt sehr einfach ist und äußerst effizient in $O(n)$ Operationen durchgeführt werden kann, sind diese Verfahren den direkten nicht überlegen. Oft, etwa bei Tridiagonalsystemen sind direkte Löser mit einem Aufwand von $O(n)$ sogar unschlagbar schnell.

Das SOR-Verfahren ist eine Weiterentwicklung der Gauß-Seidel-Iteration durch die Einführung eines *Relaxationsparameters* $\omega > 0$. Das i-te Element berechnet sich laut Satz 8.7 als:

$$x_i^{k,\mathrm{GS}} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k,\mathrm{GS}} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{k-1} \right), \quad i = 1, \dots, n.$$

Zur Bestimmung der SOR-Lösung verwenden wir nicht unmittelbar diese Approximation $x_i^{k,\mathrm{GS}}$, sondern führen einen Relaxationsparameter $\omega > 0$ ein und definieren

$$x_i^{k,\mathrm{SOR}} = \omega x_i^{k,GS} + (1-\omega) x_i^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n$$

als einen gewichteten Mittelwert zwischen Gauß-Seidel Iteration und alter Approximation. Dieser Relaxationsparameter ω kann nun verwendet werden, um die Konvergenzeigenschaften der Iteration wesentlich zu beeinflussen. Im Fall $\omega = 1$ ergibt sich gerade das Gauß-Seidel-Verfahren. Im Fall $\omega < 1$ spricht man von *Unterrelaxation*, im Fall $\omega > 1$ von *Überrelaxation*. "SOR" steht für *Successive Over Relaxation*, verwendet also Relaxationsparameter $\omega > 1$. Successive (also schrittweise) bedeutet, dass die Relaxation für jeden einzelnen Index angewendet wird. Die Vorstellung zunächst die komplette Gauß-Seidel Approximation $x^{k,\mathrm{GS}}$ zu berechnen und $x^{k,\mathrm{SOR}} = \omega x^{k,\mathrm{GS}} + (1-\omega)x^{k-1}$ zu bestimmen ist falsch. Stattdessen definieren wir in Indexschreibweise:

$$x_i^{k,\mathrm{SOR}} = \omega \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k,\mathrm{SOR}} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{k-1} \right) + (1-\omega) x_i^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n.$$

In Vektorschreibweise gilt:

$$x^{k,\mathrm{SOR}} = \omega D^{-1}(b - Lx^{k,\mathrm{SOR}} - Rx^{k-1}) + (1-\omega)x^{k-1}.$$

Trennen der Terme nach $x^{k,\mathrm{SOR}}$ sowie x^{k-1} ergibt

$$(D + \omega L)x^{k,\mathrm{SOR}} = \omega b + [(1-\omega)D - \omega R]x^{k-1},$$

also die Iteration

$$x^{k,\mathrm{SOR}} = H_\omega x^{k-1} + \omega[D + \omega L]^{-1} b, \quad H_\omega := [D + \omega L]^{-1}[(1-\omega)D - \omega R].$$

Dieses Verfahren, mit der Iterationsmatrix H_ω, passt wieder in das Schema der allgemeinen Fixpunktiterationen und gemäß Satz 8.3 hängt die Konvergenz des Verfahrens von der Bedingung $\rho_\omega := \mathrm{spr}(H_\omega) < 1$ ab.

Die Schwierigkeit bei der Realisierung des SOR-Verfahrens ist die Bestimmung von guten Relaxationsparametern, so dass die Matrix H_ω einen möglichst kleinen Spektralradius besitzt. Eine erste Abschätzung liefert:

Satz 8.13 (Relaxationsparameter des SOR-Verfahrens)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit regulärem Diagonalteil $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ Dann gilt:*

$$\operatorname{spr}(H_\omega) \geq |\omega - 1|, \quad \omega \in \mathbb{R}.$$

Für $\operatorname{spr}(H_\omega) < 1$ *muss deshalb gelten* $\omega \in (0,2)$.

Beweis: Wir nutzen die Matrix-Darstellung der Iteration:

$$H_\omega = [D + \omega L]^{-1}[(1-\omega)D - \omega R] = (I + w\underbrace{D^{-1}L}_{=:\tilde{L}})^{-1}\underbrace{D^{-1}D}_{=I}[(1-\omega)I - \omega\underbrace{D^{-1}R}_{=:\tilde{R}}].$$

Die Matrizen $\tilde{L}$ sowie $\tilde{R}$ sind echte Dreiecksmatrizen mit Nullen auf der Diagonale. D.h., es gilt $\det(I+\omega\tilde{L}) = 1$ sowie $\det((1-\omega)I - \omega\tilde{R}) = (1-\omega)^n$. Nun gilt für die Determinante von H_ω

$$\det(H_\omega) = 1 \cdot (1-\omega)^n.$$

Für die Eigenwerte λ_i von H_ω gilt folglich

$$\prod_{i=1}^n \lambda_i = \det(H_\omega) = (1-\omega)^n \quad \Rightarrow \quad \operatorname{spr}(H_\omega) = \max_{1\leq i\leq n} |\lambda_i| \geq \left(\prod_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^{\frac{1}{n}} = |1-\omega|.$$

Die letzte Abschätzung nutzt, dass das geometrische Mittel von n Zahlen kleiner ist, als das Maximum. □

Dieser Satz liefert eine erste Abschätzung für die Wahl des Relaxationsparameters, hilft jedoch noch nicht beim Bestimmen eines optimalen Wertes. Für die wichtige Klasse von positiv definiten Matrizen erhalten wir das folgende Konvergenzresultat:

Satz 8.14 (SOR-Verfahren für positiv definite Matrizen)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrisch positiv definite Matrix. Dann gilt:*

$$\operatorname{spr}(H_\omega) < 1 \quad \textit{für } 0 < \omega < 2.$$

SOR-Verfahren und auch Gauß-Seidel-Verfahren sind konvergent.

Beweis: Siehe [10]. □

Für die oben angegebene Modellmatrix ist die Konvergenz von Jacobi- sowie Gauß-Seidel-Iteration auch theoretisch abgesichert.

Für symmetrisch positiv definite Matrizen kann für die Matrix des Jacobi J und Gauß-Seidel-Verfahrens H_1 der folgende Zusammenhang gezeigt werden:

$$\operatorname{spr}(J)^2 = \operatorname{spr}(H_1). \tag{8.6}$$

Ein Schritt der Gauß-Seidel-Iteration führt zu der gleichen Fehlerreduktion wie zwei Schritte der Jacobi-Iteration. Dieses Resultat findet sich in Beispiel 8.12 exakt wieder. Weiter

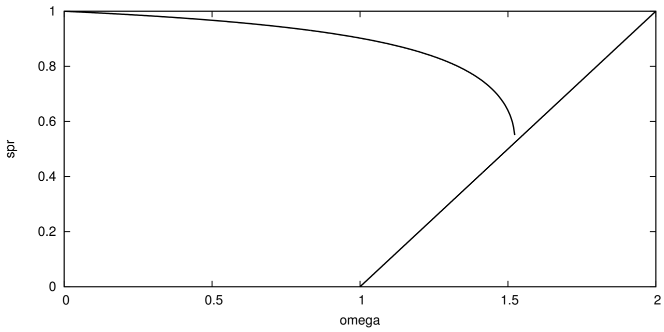


Abbildung 8.1.: Optimaler Relaxationsparameter ω_{opt} in Abhängigkeit des Spektralradius.

kann für diese Matrizen ein Zusammenhang zwischen Eigenwerten der Matrix H_ω sowie den Eigenwerten der Matrix J hergeleitet werden. Angenommen, es gilt $\rho_J := \text{spr}(J) < 1$. Dann gilt für den Spektralradius der SOR-Matrix:

$$\text{spr}(H_\omega) = \begin{cases} \omega - 1 & \omega \geq \omega_{\text{opt}}, \\ \frac{1}{4}(\rho_J \omega + \sqrt{\rho_J^2 \omega^2 - 4(\omega - 1)})^2 & \omega \leq \omega_{\text{opt}} \end{cases}$$

Ist der Spektralradius der Matrix J bekannt, so kann der optimale Parameter ω_{opt} als Schnittpunkt dieser beiden Funktionen gefunden werden, siehe Abbildung 8.1. Es gilt:

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2(1 - \sqrt{1 - \rho_J^2})}{\rho_J^2}. \tag{8.7}$$

Beispiel 8.15 (Modellmatrix mit SOR-Verfahren)**.** *Wir betrachten wieder die vereinfachte Modellmatrix aus Beispiel 8.12. Für die Matrix $J = -D^{-1}(L + R)$ gilt:*

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ & & & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Zunächst bestimmen wir die Eigenwerte λ_i und Eigenvektoren w^i für $i = 1, \dots, n$ dieser Matrix. Hierzu machen machen wir den Ansatz:

$$w^i = (w_k^i)_{k=1,\dots,n}, \quad w_k^i = \sin\left(\frac{\pi i k}{n+1}\right).$$

Dann gilt mit dem Additionstheoremen $\sin(x \pm y) = \sin(x)\cos(y) \pm \cos(x)\sin(y)$:

$$\begin{aligned}(Jw^i)_k &= \frac{1}{2} w_{k-1}^i + \frac{1}{2} w_{k+1}^i = \frac{1}{2}\left(\sin\left(\frac{\pi i(k-1)}{n+1}\right) + \sin\left(\frac{\pi i(k+1)}{n+1}\right)\right) \\ &= \frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi i k}{n+1}\right)\left(\cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right) + \cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right)\right) = w_k^i \cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right).\end{aligned}$$

Man beachte, dass diese Gleichung wegen $w_0^i = w_{n+1}^i = 0$ *auch für die erste und letzte Zeile, d.h. für* $i = 1$ *sowie* $i = n$ *gültig ist. Es gilt* $\lambda_i = \cos(\pi i/(n+1))$ *und der betragsmäßig größte Eigenwert von* J *wird für* $i = 1$ *sowie* $i = n$ *angenommen. Hier gilt mit der Reihenentwicklung des Kosinus:*

$$\lambda_{max} = \lambda_1 = \cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right) = 1 - \frac{\pi^2}{2(n+1)^2} + O\left(\frac{1}{(n+1)^4}\right).$$

Der größte Eigenwert geht mit $n \to \infty$ *quadratisch gegen 1. Hieraus bestimmen wir mit (8.7) für einige Schrittweiten aus Beispiel 8.12 die optimalen Relaxationsparameter:*

n	$\lambda_{max}(J)$	ω_{opt}
320	*0.9999521084*	*1.980616162*
640	*0.9999879897*	*1.990245664*
1280	*0.9999969927*	*1.995107064*

Schließlich führen wir für diese Parameter das SOR-Verfahren mit optimalem Relaxationsparameter durch und fassen die Ergebnisse in folgender Tabelle zusammen:

Matrixgröße	*Jacobi*		*Gauß-Seidel*		*SOR*	
	Schritte	*Zeit (sec)*	*Schritte*	*Zeit (sec)*	*Schritte*	*Zeit (sec)*
320	*147 775*	0.92	*73 888*	0.43	*486*	$\ll 1$
640	*588 794*	7.35	*294 398*	3.55	*1 034*	0.02
1 280	*2 149 551*	58	*1 074 776*	29	*1937*	0.05
2 560					*4 127*	0.22
5 120			*zu aufwendig*		*8 251*	0.90
10 240					*16 500*	3.56

Die Anzahl der notwendigen Schritte steigt beim SOR-Verfahren nur linear in der Problemgröße. Dies ist im Gegensatz zum quadratischen Anstieg beim Jacobi- sowie beim Gauß-Seidel-Verfahren ein wesentlicher Fortschritt. Da der Aufwand eines Schrittes des SOR-Verfahrens mit dem von Jacobi- und Gauß-Seidel vergleichbar ist für das SOR-Verfahren zu einem Gesamtaufwand von nur $O(n^2)$ *Operationen. Dieses positive Resultat gilt jedoch nur dann, wenn der optimale SOR-Parameter bekannt ist.*

8.4. Praktische Aspekte

Wir fassen zunächst die bisher vorgestellten Verfahren zusammen:

Beispiel 8.16 (Einfache Iterationsverfahren). *Es gilt in allgemeiner Darstellung*

$$x^{k+1} = x^k + C^{-1}(b - Ax^k) = \underbrace{(I - C^{-1}A)}_{=B} x^k + C^{-1}b.$$

Ausgehend von der natürlichen Aufspaltung $A = L + D + R$ sowie mit einem Relaxationsparameter ω sind Richardson-, Jacobi-, Gauß-Seidel- sowie SOR-Verfahren gegeben als als:

- *Gedämpftes Richardson Verfahren:*

  $$C^{-1} = \omega I, \quad B = I - \omega A,$$

  mit der Index-Schreibweise:

  $$x_i^k = \omega b_i + x_i^{k-1} - \omega \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- *Jacobi-Verfahren:*

  $$C^{-1} = D^{-1}, \quad B = -D^{-1}(L + R),$$

  mit der Index-Schreibweise:

  $$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij} x_j^{k-1} \right), \quad i = 1, \dots, n.$$

- *Gauß-Seidel-Verfahren*

  $$C^{-1} = [D + L]^{-1}, \quad B = -(D + L)^{-1} R$$

  mit der Index-Schreibweise:

  $$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^k - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{k-1} \right), \quad i = 1, \dots, n.$$

- *SOR-Verfahren (englisch. Successive Over-Relaxation):*

  $$C = [D + \omega L]^{-1}, \quad B = [D + \omega L]^{-1}[(1 - \omega)D - \omega R], \quad \omega = \omega_{opt} \in (0, 2),$$

  mit der Index-Schreibweise:

  $$x_i^k = \omega \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^k - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{k-1} \right) + (1 - \omega) x_i^{k-1}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Zur einfachen Durchführung der Verfahren eignet sich stets die Index-Schreibweise. Die Matrix-Form dient insbesondere der einfachen Charakterisierung sowie zum Herleiten von Konvergenzaussagen.

Als iterative Verfahren werden die Gleichungssysteme nur im (praktisch irrelevanten) Fall $n \to \infty$) wirklich gelöst. Üblicherweise muss die Iteration nach einer bestimmten Anzahl von Schritten abgebrochen werden. Als Abbruchskriterium kann zunächst die asymptotische Konvergenzaussage aus Satz 8.3 herangezogen werden. Mit $\rho := \operatorname{spr}(B)$ gilt im Grenzfall:

$$\|x^k - x\| \approx \rho^k \|x^0 - x\|.$$

Und bei vorgegebener Toleranz TOL kann die notwendige Zahl an Iterationsschritten abgeschätzt werden:

$$\|x^k - x\| < TOL \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\log\left(\frac{TOL}{\|x^0 - x\|}\right)}{\log(\rho)}.$$

Die Toleranz TOL gibt hier an, um welchen Faktor der Anfängliche Fehler $\|x^0 - x\|$ reduziert wird. Dieses Vorgehen ist in der praktischen Anwendung wenig hilfreich, da der Spektralradius ρ der Iterationsmatrix B im Allgemeinen nicht bekannt ist.

Ein alternatives Kriterium liefert die Abschätzung aus Satz 3.30 für den Defekt $d^k := b - Ax^k$:

$$\frac{\|x^k - x\|}{\|x\|} \le \operatorname{cond}(A) \frac{\|b - Ax^k\|}{\|b\|}.$$

Hier entsteht jedoch ein ähnliches Problem: Die Konditionszahl der Matrix A ist im Allgemeinen nicht bekannt. Damit kann ebenfalls keine quantitativ korrekte Abschätzung hergeleitet werden. Dieser einfache Zusammenhang zwischen Defekt und Fehler kann jedoch genutzt werden um eine *relative Toleranz* zu erreichen:

Bemerkung 8.17 (Relative Toleranz)**.** *Bei der Durchführung von iterativen Lösungsverfahren werden als Abbruchskriterium oft* relative Toleranzen *eingesetzt. Die Iteration wird gestoppt, falls gilt:*

$$\|x^k - x\| \le TOL\,\|x^0 - x\|.$$

Als praktisch durchführbares Kriterium werden die unbekannten Fehler durch die Defekte ersetzt:

$$\|b - Ax^k\| \le TOL\,\|b - Ax^0\|.$$

8.5. Abstiegs & Gradientenverfahren

In diesem abschließenden Abschnitt werden wir zur Vorbereitung von leistungsfähigen Verfahren einige Grundlagen entwickeln.

Alle bisherigen Fixpunktiterationen lassen sich allgemeiner in folgender Form schreiben

$$x^{k+1} = x^k + d^k, \quad k = 1, 2, \ldots,$$

wobei d^k in jedem Schritt die Richtung angibt, in der die Lösung verbessert wird. Beim Jacobi-Verfahren bestimmt sich diese Richtung z.B. als $d^k = D^{-1}(b - Ax^k)$, beim Gauß-Seidel Verfahren als $d^k = (D+L)^{-1}(b - Ax^k)$. Um diese allgemeine Iteration zu verbessern setzen wir an zwei Punkten an: zunächst fügen wir in jedem Schritt der Iteration einen Relaxationsparameter ω^k ein

$$x^{k+1} = x^k + \omega^k d^k, \quad k = 1, 2, \dots,$$

welchen wir Schritt für Schritt optimal bestimmen werden. Anschließen versuchen wir neue Suchrichtungen d^k auf eine systematische Art und Weise zu entwickeln. D.h., wir suchen eine Richtung d^k, in der die größte Fehlerreduktion zu erwarten ist. In diesem Abschnitt beschränken wir uns auf symmetrisch positiv definite Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Zentral für das gesamte Kapitel ist die folgende Charakterisierung zur Lösung eines linearen Gleichungssystems mit symmetrisch, positiv definiter Matrix:

Satz 8.18 (Lineares Gleichungssystem und Minimierung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische positiv definite Matrix, $x, b \in \mathbb{R}^n$. Die folgenden Bedingungen sind äquivalent:*

$$(i) \qquad Ax = b,$$

$$(ii) \qquad Q(x) \le Q(y) \quad \forall y \in \mathbb{R}^n, \quad Q(y) = \frac{1}{2}(Ay, y)_2 - (b, y)_2.$$

Beweis: $(i) \Rightarrow (ii)$ x sei Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$. Dann gilt mit beliebigem $y \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} 2Q(y) - 2Q(x) &= (Ay, y)_2 - 2(b, y)_2 - (Ax, x)_2 + 2(b, x) \\ &= (Ay, y)_2 - 2(Ax, y)_2 + (Ax, x)_2 \\ &= (A(y - x), y - x)_2 \ge 0, \end{aligned}$$

d.h. $Q(y) \ge Q(x)$.

$(ii) \Rightarrow (i)$ Umgekehrt sei $Q(x)$ nun Minimum. D.h. $x \in \mathbb{R}^n$ ist stationärer Punkt der quadratischen Form $Q(x)$, also:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial x_i} Q(x) = \frac{\partial}{\partial x_i}\Big\{\frac{1}{2}(Ax, x)_2 - (b, x)_2\Big\} = (Ax)_i - b_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

D.h., x ist Lösung des linearen Gleichungssystems. □

Anstelle ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$ zu lösen suchen wir das Minimum des sogenannten “Energiefunktionals” $Q(x) \to \min$. Dieser Zugang ist Grundlage der im Folgenden diskutieren Verfahren und auch Basis der allgemeinen Klasse von Krylow-Raum-Verfahren.

Wir betrachten zunächst nur symmetrisch positiv definite Matrizen, daher ist durch $\|x\|_A := \sqrt{(Ax, x)_2}$ eine Norm, die sogenannte *Energienorm*, gegeben. Die Minimierung des Energiefunktionals $Q(\cdot)$ ist auch äquivalent zur Minimierung des Fehlers $x^k - x$ in der zugehörigen Energienorm. Denn, angenommen $x \in \mathbb{R}^n$ sei die Lösung des Gleichungssystems und $y \in \mathbb{R}^n$ eine beliebige Approximation an diese Lösung. Dann gilt:

$$\|y - x\|_A^2 = (A(y - x), y - x)_2 = (Ay, y) - \underbrace{2(Ay, x)}_{=2(b,y)} + (Ax, x) = 2Q(y) + (Ax, x).$$

Minimierung von $Q(y)$ minimiert auch den Fehler in der Energienorm.

Abstiegsverfahren

Die Idee des Abstiegsverfahrens ist die sukzessive Reduktion des Energiefunktionals $Q(\cdot)$ für eine Folge von Approximationen x^k. Dabei wird in jedem Schritt des Verfahrens zunächst eine sogenannte Abstiegsrichtung d^k gewählt, im Anschluss wird die Approximation in dieser Richtung verbessert $x^{k+1} = x^k + \omega^k d^k$. Die Schrittweite $\omega^k \in \mathbb{R}$ wird dabei so gewählt, dass der resultierende Wert des Energiefunktionals minimal wird. Wir fassen zusammen:

Algorithmus 8.19 (Abstiegsverfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit, $x^0, b \in \mathbb{R}^n$. Iteriere für $k = 0, 1, 2, \dots$*

1. *Wähle Abstiegsrichtung $d^k \in \mathbb{R}^n$*
2. *Bestimme ω^k als Minimum von*

$$\omega^k = \arg\min_{\omega^k\in\mathbb{R}} Q(x^k + \omega^k d^k)$$

3. *Update*

$$x^{k+1} = x^k + \omega^k d^k.$$

Wir gehen davon aus dass die Suchrichtungen gegeben seien. Es bleibt, die optimale Schrittweite zu berechnen. Hier handelt es sich um ein einfaches skalares Minimierungsproblem. Wir bestimmen

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial\omega^k} Q(x^k + \omega^k d^k) = \omega^k (Ad^k, d^k) + (Ax^k, d^k) - (b, d^k),$$

also

$$\omega^k = \frac{(b - Ax^k, d^k)}{(Ad^k, d^k)}.$$

Eine Möglichkeit zur Bestimmung der Abstiegsrichtung ist eine Kombination mit Jacobi- oder Gauß-Seidel-Verfahren. Die Richtungen werden werden über diese Verfahren bestimmt, die Schrittweite wird optimal berechnet. Wir betrachten hierzu ein Beispiel:

Beispiel 8.20 (Abstiegsverfahren, Jacobi & Gauß-Seidel)**.** *Es sei $Ax = b$ mit*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Mit dem Startvektor $x^0 = 0$ führen wir jeweils 10 Schritte mit Jacobi-, Gauß-Seidel-Verfahren sowie jeweils mit den entsprechenden Kombinationen unter Verwendung des optimalen Abstiegs-Schritts ω^k. In Abbildung 8.2 links fassen wir für alle Verfahren die Fehler zusammen. Auf der rechten Seite der Abbildung stellen wir den Approximationsverlauf $x^k \in \mathbb{R}^3$ für Jacobi- sowie Jacobi-Abstiegsverfahren graphisch dar. Obwohl der Verlauf des Jacobi-Abstiegsverfahrens wesentlich "gradliniger" scheint, konvergiert dieses

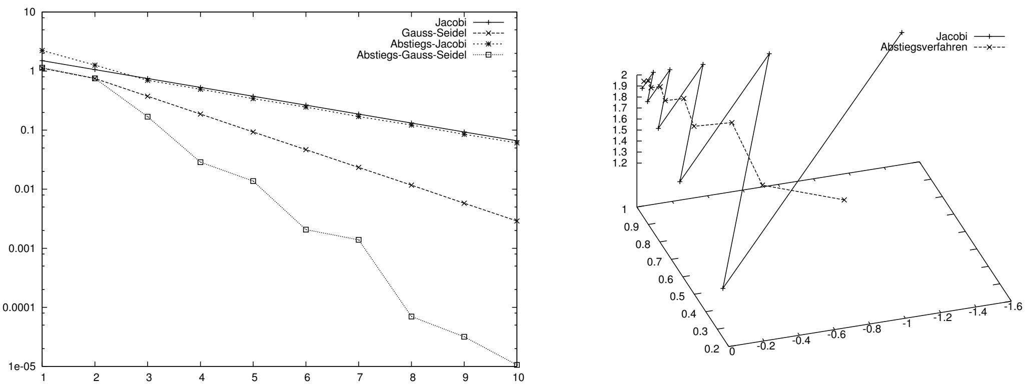


Abbildung 8.2.: Links: Konvergenz von Jacobi-, Gauß-Seidel- sowie den entsprechenden Abstiegsverfahren. Rechts: Vergleich der Annäherung bei Jacobi- und Jacobi-Abstiegs-Verfahren an die Lösung $x = (1, 0, 2)^T$.

Verfahren ebenso langsam wie das Jacobi-Verfahren selbst. Nur im Falle des Gauß-Seidel-Verfahrens wird die Konvergenz durch Wahl optimaler Schrittweite ω^k wesentlich beschleunigt.

Gradientenverfahren Abschließend werden wir ein erstes Verfahren entwickeln, welches die neue Suchrichtung $d^k \in \mathbb{R}^n$ systematisch so bestimmt, dass das quadratische Funktional $Q(x)$ möglichst stark minimiert werden kann. Wir suchen also die Richtung des *stärksten Abfalls*. Zu einem Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ ist dies gerade die Richtung $d \in \mathbb{R}^n$, die normal auf den Niveaumenge $N(x)$ steht:

$$N(x) := \{y \in \mathbb{R}^n : \; Q(y) = Q(x)\}$$

In einem Punkt x ist die Niveaumenge aufgespannt durch alle Richtungen $\delta x \in \mathbb{R}^n$ mit:

$$0 \stackrel{!}{=} Q'(x) \cdot \delta x = (\nabla Q(x), \delta x) = (b - Ax, \delta x).$$

Die Vektoren δx, welche die Niveaumenge aufspannen stehen orthogonal auf dem Defekt $b - Ax$, dieser zeigt daher in Richtung der stärksten Änderung von $Q(\cdot)$. Wir wählen $d^k := b - Ax^k$. Die so gefundene Suchrichtung wird dann mit dem Abstiegsverfahren kombiniert, d.h. wir iterieren:

$$d^k := b - Ax^k, \quad \omega^k := \frac{\|d^k\|_2^2}{(Ad^k, d^k)_2}, \quad x^{k+1} := x^k + \omega^k d^k.$$

Wir definieren das *Gradientenverfahren*:

Algorithmus 8.21 (Gradientenverfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit, $b \in \mathbb{R}^n$. Es sei $x^0 \in \mathbb{R}^n$ beliebig und $d^0 := b - Ax^0$. Iteriere für $k = 0, 1, 2, \dots$*

1. $r^k := Ad^k$
2. $\omega^k = \frac{\|d_k\|_2^2}{(r^k, d^k)_2}$
3. $x^{k+1} = x^k + \omega^k d^k$.
4. $d^{k+1} = d^k - \omega^k r^k$.

Durch Einführen eines zweiten Hilfsvektors $r^k \in \mathbb{R}^n$ kann in jeder Iteration ein Matrix-Vektor-Produkt gespart werden. Für Matrizen mit Diagonalanteil $D = \alpha I$ ist das Gradientenverfahren gerade das Jacobi-Verfahren in Verbindung mit dem Abstiegsverfahren. Daher kann für dieses Verfahren im Allgemeinen auch keine verbesserte Konvergenzaussage erreicht werden. Es stellt jedoch den Einstieg in eine ganze Klasse von komplexeren Verfahren, den Krylow-Unterraum-Verfahren dar. Wir zeigen:

Satz 8.22 (Gradientenverfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit. Dann konvergiert das Gradientenverfahren für jeden Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$ gegen die Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$.*

Beweis: Es sei $x^k \in \mathbb{R}^n$ eine gegebene Approximation. Weiter sei $d := b - Ax^k$. Dann berechnet sich ein Schritt des Gradientenverfahrens als:

$$x^{k+1} = x^k + \frac{(d,d)}{(Ad,d)} d.$$

Für das Energiefunktional gilt:

$$\begin{aligned}
Q(x^{k+1}) &= \frac{1}{2}(Ax^{k+1}, x^{k+1}) - (b, x^{k+1}) \\
&= \frac{1}{2}(Ax^k, x^k) + \frac{1}{2}\frac{(d,d)^2}{(Ad,d)^2}(Ad,d) + \frac{(d,d)}{(Ad,d)}(Ax^k, d) - (b, x^k) - \frac{(d,d)}{(Ad,d)}(b,d) \\
&= Q(x^k) + \frac{(d,d)}{(Ad,d)}\left\{\frac{1}{2}(d,d) + (Ax^k, d) - (b,d)\right\} \\
&= Q(x^k) + \frac{(d,d)}{(Ad,d)}\left\{\frac{1}{2}(d,d) + (\underbrace{Ax^k - b}_{=-d}, d)\right\}
\end{aligned}$$

Also folgt:

$$Q(x^{k+1}) = Q(x^k) - \frac{(d,d)^2}{2(Ad,d)}.$$

Wegen der positiven Definitheit von A gilt $\lambda_{\min}(A)(d,d) \le (Ad,d) \le \lambda_{\max}(A)(d,d)$ und schließlich ist mit

$$Q(x^{k+1}) \le Q(x^k) - \underbrace{\frac{(d,d)}{2\lambda_{\max}}}_{\ge 0},$$

die Folge $Q(x^k)$ monoton fallend. Weiter ist $Q(x^k)$ nach unten durch $Q(x)$ beschränkt. Also konvergiert die Folge $Q(x^k) \to c \in \mathbb{R}^n$. Im Grenzwert muss gelten $0 = (d, d) = \|b - Ax\|^2$, also $Ax = b$. □

Schließlich zitieren wir noch zur Abschätzung der Konvergenzgeschwindigkeit die folgende Fehlerabschätzung:

Satz 8.23 (Konvergenz des Gradientenverfahrens)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrisch positiv definite Matrix. Dann gilt für das Gradientenverfahren zur Lösung von $Ax = b$ die Fehlerabschätzung*

$$\|x^k - x\|_A \le \left(\frac{1 - 1/\kappa}{1 + 1/\kappa}\right)^k, \quad \kappa := \mathrm{cond}_2(A) = \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)}.$$

Beweis: Siehe [10] □

Die asymptotische Konvergenzrate des Gradientenverfahrens wir durch die Kondition der Matrix bestimmt. Für die Modellmatrix gilt $\kappa = O(n^2)$, siehe Beispiel 8.15. Also gilt:

$$\rho = \frac{1 - \frac{1}{n^2}}{1 + \frac{1}{n^2}} = 1 - \frac{2}{n^2} + O\left(\frac{1}{n^4}\right).$$

Die Konvergenz ist demnach ebenso langsam wie die des Jacobi-Verfahrens (wir haben bereits diskutiert, dass es für die Modellmatrix mit dem Jacobi-Abstiegsverfahren übereinstimmt). Für das Gradientenverfahren gilt jedoch der folgende Zusammenhang, der Basis des CG-Verfahrens ist:

Satz 8.24 (Abstiegsrichtungen im Gradientenverfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit. Dann stehen je zwei aufeinanderfolgende Abstiegsrichtungen d^k und d^{k+1} des Gradientenverfahren orthogonal aufeinander, also $(d^k, d^{k+1}) = 0$.*

Beweis: Zum Beweis, siehe Algorithmus 8.21. Es gilt:

$$d^{k+1} = d^k - \omega^k r^k = d^k - \frac{(d^k, d^k)}{(Ad^k, d^k)} Ad^k.$$

Also gilt:

$$(d^{k+1}, d^k) = (d^k, d^k) - \frac{(d^k, d^k)}{(Ad^k, d^k)}(Ad^k, d^k) = (d^k, d^k) - (d^k, d^k) = 0.$$

□

Das CG-Verfahren Der Zusammenhang aus Satz 8.24 gilt nur für jeweils aufeinander folgende Abstiegsrichtungen, im Allgemeinen gilt jedoch $d^k \not\perp d^{k+2}$. In Abbildung 8.2 rechts ist der Approximationsverlauf des Abstiegs-Jacobi-Verfahren, welches hier mit dem Gradientenverfahren übereinstimmt, dargestellt. Zwei aufeinander folgende Richtungen sind zwar je orthogonal, die dritte Richtung steht jedoch wieder nahezu parallel auf der ersten. Dies führt dazu, dass das Gradientenverfahren im Allgemeinen sehr langsam konvergiert. Das CG-Verfahren, oder "Verfahren der konjugierten Gradienten", entwickelt diesen Ansatz weiter und wählt Suchrichtungen $\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ die paarweise orthogonal sind. Orthogonalität wird dabei im A-Skalarprodukt (wir betrachten weiter nur symmetrische positiv definite Matrizen) erreicht:

$$(Ad^r, d^s) = 0 \quad \forall r \neq s.$$

Im k-ten Schritt wird die Approximation $x^k = x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d^i$ als das Minimum über alle $\alpha = (\alpha_0, \dots, \alpha_{k-1})$ bezüglich $Q(x^k)$ gesucht:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^k} Q\left(x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d^i\right) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^k} \left\{ \frac{1}{2} \left(Ax^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A d^i, x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d^i \right) - \left(b, x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d^i \right) \right\}.$$

Der stationäre Punkt ist bestimmt durch:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial \alpha_j} Q(x^k) = \left(Ax^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A d^i, d^j \right) - (b, d^j) = -\left(b - Ax^k, d^j \right), \quad j = 0, \dots, k-1.$$

D.h., das neue Residuum $b - Ax^k$ steht orthogonal auf allen Suchrichtungen d^j für $j = 0, \dots, k-1$. Dieses Gleichungssystem

$$(b - Ax^k, d^j) = 0 \quad \forall j = 0, \dots, k-1, \tag{8.8}$$

wird *Galerkin-Gleichung* genannt. Beim Entwurf des CG-Verfahrens ist es nun wichtig, dass die neu gewählte Suchrichtung d^k nicht im Erzeugnis der bisherigen Suchrichtungen $\operatorname{span}\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ enthalten ist. Denn in diesem Fall wird der Suchraum nicht größer und die Approximation kann nicht verbessert werden. Daher wählt man für das CG-Verfahren ausgehend von einer Startapproximation $x^0 \in \mathbb{R}^n$ mit $d^0 := b - Ax^0$ den *Krylow-Raum* $K_k(d^0, A)$:

$$K_k(d^0, A) := \operatorname{span}\{d^0, Ad^0, \dots, A^{k-1} d^0\}.$$

Es gilt:

Hilfsatz 8.25. *Angenommen, es gilt $A^k d^0 \in K_k$. Dann liegt die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ von $Ax = b$ im k-ten Krylow-Raum $K_k(d_0, A)$.*

Beweis: Es sei K_k gegeben und $x^k \in x_0 + K_k$ die beste Approximation, welche die Galerkin-Gleichung (8.8) erfüllt. Es sei $r^k := b - Ax^k$. Wegen

$$r^k = b - Ax^k = \underbrace{b - Ax^0}_{=d^0} + A \underbrace{(x^0 - x^k)}_{\in K_k} \in d^0 + AK_k,$$

gilt $r^k \in K_{k+1}$. Angenommen nun, $K_{k+1} \subset K_k$. Dann gilt $r^k \in K_k$. Die Galerkin-Gleichung besagt $r^k \perp K_k$, d.h. es gilt zwingend $r^k = 0$ und $Ax^k = b$. □

Falls das CG-Verfahren abbricht weil keine neuen Suchrichtungen hinzukommen, so ist die Lösung gefunden. Angenommen, die A-orthogonalen Suchrichtungen $\{d^0, d^1, \dots, d^{k-1}\}$ liegen vor, so kann die CG-Approximation durch Ausnutzen der Basisdarstellung $x^k = x^0 + \sum \alpha_i d^i$ aus der Galerkin-Gleichung berechnet werden:

$$\left(b - Ax^0 - \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A d^i, d_j\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad (b - Ax^0, d^j) = \alpha_j (Ad^j, d^j) \quad \Rightarrow \quad \alpha_j = \frac{(d^0, d^j)}{(Ad^j, d^j)}.$$

Die A-orthogonale Basis $\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ des Krylow-Raums $K_k(d^0, A)$ kann z.B. mit dem Gram-Schmidt-Verfahren berechnet werden. Der Nachteil dieser Methode ist der hohe Aufwand des Gram-Schmidt-Verfahrens. Zur Orthogonalisierung von eines Vektors bzgl. einer bereits vorhandenen Basis $\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ sind k Skalarprodukte erforderlich. Seine Leistungsfähigkeit erlangt das CG-Verfahren durch ausnutzen einer zweistufigen Rekursionsformel, welche die A-orthogonale Basis effizient und stabil berechnet:

Hilfsatz 8.26 (2-stufige Rekursionsformel zur Orthogonalisierung)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit, sowie $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und $d^0 := b - Ax^0$. Dann wird durch die Iteration*

$$r^k := b - Ax^k, \quad \beta_{k-1} := -\frac{(r^k, Ad^{k-1})}{(d^{k-1}, Ad^{k-1})}, \quad d^k := r^k - \beta_{k-1} d^{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

eine A-orthogonale Basis mit $(Ad^r, d^s) = 0$ für $r \neq s$ erzeugt. Dabei ist x^k in Schritt k definiert als die Galerkin-Lösung $(b - Ax^k, d^j) = 0$ für $j = 0, \dots, k-1$.

Beweis: Es sei durch $\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ eine A-orthogonale Basis des $K_k(d^0, A)$ gegeben. Weiter sei $x^k \in x^0 + K_k(d^0, A)$ die Galerkin-Lösung zu (8.8). Es sei $r^k := b - Ax^k \in K_{k+1}$ und wir fordern, dass $r^k \notin K_k(d^0, A)$. Ansonsten bricht die Iteration nach Hilfsatz 8.25 ab. Wir bestimmen d^k mit dem Ansatz:

$$d^k = r^k - \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^{k-1} d^j. \tag{8.9}$$

Die Orthogonalitätsbedingung besagt:

$$0 \stackrel{!}{=} (d^k, Ad^i) = (r^k, Ad^i) + \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^{k-1} (d^j, Ad^i) = (r^k, Ad^i) + \beta_i^{k-1} (d^i, Ad^i), \quad i = 0, \dots, k-1.$$

Es gilt $(r^k, Ad^i) = (b - Ax^k, Ad^i) = 0$ für $i = 0, \dots, k-2$, da $Ar^k \perp K_{k-1}$. Hieraus folgt $\beta_i^{k-1} = 0$ für $i = 0, 1, \dots, k-2$. Für $i = k-1$ gilt:

$$\beta_{k-1} := \beta_{k-1}^{k-1} = -\frac{(r^k, Ad^{k-1})}{(d^{k-1}, Ad^{k-1})}.$$

Schließlich gilt mit (8.9) $d^k = r^k - \beta_{k-1} d^{k-1}$. $\square$

Mit diesen Vorarbeiten können wir alle Bestandteile des CG-Verfahrens zusammensetzen. Es sei also mit x^0 eine Startlösung und mit $d^0 := b - Ax^0$ der Startdefekt gegeben. Angenommen, $K_k := \text{span}\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ sowie $x^k \in x^0 + K_k$ und der Defekt $r^k = b - Ax^k$ liegen vor. Dann berechnet sich d^k gemäß Hilfsatz 8.26 als

$$\beta_{k-1} = -\frac{(r^k, Ad^{k-1})}{(d^{k-1}, Ad^{k-1})}, \quad d^k = r^k - \beta_{k-1} d^{k-1}. \tag{8.10}$$

Für den neuen Entwicklungskoeffizienten α_k in $x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^k \alpha_i d^i$ gilt durch Testen der Galerkin-Gleichung (8.8) mit d^k:

$$\begin{aligned}\Bigg(\underbrace{b - Ax^0}_{=d^0} - \sum_{i=0}^{k} \alpha_i A d^i, d^k\Bigg) &= (b - Ax^0, d^k) - \alpha_k (Ad^k, d^k) \\ &= (b - Ax^0 + \underbrace{A(x^0 - x^k)}_{\in K_k}, d^k) - \alpha_k (Ad^k, d^k).\end{aligned}$$

Also:

$$\alpha_k = \frac{(r^k, d^k)}{(Ad^k, d^k)}, \quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k. \tag{8.11}$$

Hieraus lässt sich auch unmittelbar der neue Defekt r^{k+1} bestimmen:

$$r^{k+1} = b - Ax^{k+1} = b - Ax^k - \alpha_k Ad^k = r^k - \alpha_k Ad^k. \tag{8.12}$$

Wir fassen (8.10-8.12) zusammen und formulieren das klassische CG-Verfahren:

Algorithmus 8.27 (CG-Verfahren)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit, $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und $r^0 = d^0 = b - Ax^0$ gegeben. Iteriere für $k = 0, 1, \dots$*

1. $\alpha_k = \frac{(r^k, d^k)}{(Ad^k, d^k)}$
2. $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$
3. $r^{k+1} = r^k - \alpha_k Ad^k$
4. $\beta_k = \frac{(r^{k+1}, Ad^k)}{(d^k, Ad^k)}$
5. $d^{k+1} = r^{k+1} - \beta_k d^k$

Bei exakter Arithmetik liefert das CG-Verfahren für ein n-dimensionales Problem eine Lösung nach (höchstens) n Schritten und kann daher prinzipiell als direktes Verfahren betrachtet werden.

Satz 8.28 (CG als direkte Methode)**.** *Das CG-Verfahren bricht für jeden Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$ bei rundungsfreier Rechnung nach spätestens n Schritten mit $x^n = x$ ab. In jedem Schritt gilt*

$$Q(x^k) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} Q(x^{k-1} + \alpha d^{k-1}) = \min_{y \in x^0 + K_k} Q(y),$$

bzw.

$$\|b - Ax^k\|_{A^{-1}} = \min_{y \in x^0 + K_k} \|b - Ay\|_{A^{-1}},$$

in der Norm

$$\|x\|_{A^{-1}} = (A^{-1}x, x)_2^{\frac{1}{2}}.$$

Beweis: Die Eigenschaft ein direktes Verfahren zu sein folgt unmittelbar aus Hilfsatz 8.25. Die Iterierte des CG-Verfahrens ist zunächst bestimmt als

$$Q(x^k) = \min_{y \in x^0 + K_k} Q(y),$$

welches gleichbedeutend ist mit (8.8). Mit dem Ansatz

$$x^k = x^0 + \sum_{k=0}^{k-1} \alpha_k d^{k-1} = x^0 + \underbrace{y^{k-1}}_{\in K_{t-1}} + \alpha_{t-1} d^{k-1},$$

folgt

$$(b - Ax^k, d^j) = (b - Ay^{k-1}, d_j) - \alpha_{t-1}(Ad^{k-1}, d^j) = 0 \quad \forall j = 0, \dots, t-1,$$

also

$$(b - Ay^{k-1}, d_j) = 0 \; \forall j = 0, \dots, t-2,$$

und somit $y^{k-1} = x^{k-1}$ sowie

$$Q(x^k) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} Q(x^{k-1} + \alpha d^{k-1}).$$

Schließlich gilt mit Hilfe der Symmetrie $A = A^T$

$$\|b - Ay\|_{A^{-1}}^2 = (A^{-1}[b - Ay], b - Ay)_2 = (Ay, y)_2 - (A^{-1}b, Ay)_2 - (y, b)_2 = (Ay, y)_2 - 2(b, y)_2,$$

also die Beziehung $\|b - Ay\|_{A^{-1}}^2 = 2Q(y)$. □

Obwohl das CG-Verfahren prinzipiell eine direkte Methode ist, wird es in der Praxis als approximative, iterative Methode eingesetzt. Durch Rundungsfehler werden die Suchrichtungen $\{d^0, \dots, d^{k-1}\}$ nie wirklich orthogonal sein. Die Konvergenzanalyse des CG-Verfahrens erweist sich als sehr aufwendig. Schlüssel ist die folgende Charakterisierung einer Iteration $x^k = x^0 + K_k$ als

$$x^k = x^0 + p_{k-1}(A) d^0,$$

wobei $p_{k-1} \in P_{k-1}$ ein Polynom in A ist:

$$p_{k-1}(A) = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A^i.$$

Hiermit kann die Minimierungseigenschaft aus Satz 8.28 geschrieben werden als

$$\|b - Ax^k\|_{A^{-1}} = \min_{y \in x^0 + K_k} \|b - Ay\|_{A^{-1}} = \min_{q \in P_{k-1}} \|b - Ax^0 - Aq(A)d^0\|_{A^{-1}}.$$

Wenn wir zur $\|\cdot\|_A$-Norm übergehen folgt mit $d^0 = b - Ax^0 = A(x - x^0)$

$$\|b - Ax^k\|_{A^{-1}} = \|x - x^k\|_A = \min_{q \in P_{k-1}} \|(x - x^0) - q(A)A(x - x^0)\|_A,$$

also

$$\|x - x^k\|_A = \min_{q \in P_{k-1}} \|[I - q(A)A](x - x^0)\|_A.$$

Im Sinne einer Bestapproximation können wir diese Aufgabe schreiben als

$$p \in P_{k-1}: \quad \|[I - p(A)A](x - x^0)\|_A = \min_{q \in P_{k-1}} \|[I + q(A)A](x - x^0)\|_A. \tag{8.13}$$

Gesucht ist eine Bestapproximation. Der Konvergenzbeweis zum CG-Verfahren baut daher auf dem entsprechenden Abschnitt 9.6 und insbesondere Abschnitt 9.6.2 auf. Es ist $q(A)A \in P_k(A)$, also suchen wir ein Polynom $q \in P_k$ mit der Eigenschaft $q(0) = 1$, so dass

$$\|x^k - x\|_A \le \min_{q \in P_k,\, q(0)=1} \|q(A)\|_A \|x - x^0\|_A. \tag{8.14}$$

Die Konvergenz des CG-Verfahrens hängt davon ab, ob es uns gelingt, ein Polynom $q \in P_k$ mit der Eigenschaft $p(0) = 1$ zu finden, mit möglichst kleiner Norm in A. Wir zeigen:

Hilfsatz 8.29 (Schanke für Matrix-Polynome)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit mit Eigenwerten $0 < \lambda_1 \le \dots \le \lambda_n$, $p \in P_k$ ein Polynom mit $p(0) = 1$.*

$$\|p(A)\|_A \le M, \quad M := \min_{p \in P_k,\, p(0)=1} \sup_{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_n]} |p(\lambda)|.$$

Beweis: Es sei $\{q_1, \dots, q_n\}$ eine Orthogonalbasis aus Eigenvektoren von. $y \in \mathbb{R}^n$ beliebig hat die Darstellung

$$y = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i q_i.$$

Mit $Q = [q_1, \dots, q_n]$ gilt

$$A = Q^T D Q, \quad D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n),$$

so dass für Polynome $p \in P_{k-1}$ folgt:

$$p(A) = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A^i = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i (Q^T D Q)^i = Q^T \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i D^i Q = Q^T p(D) Q.$$

Dann ist

$$\|p(A)y\|_A^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i p(\lambda_i)^2 \gamma_i^2 \leq \underbrace{\sup_{\lambda\in[\lambda_1,\lambda_n]} |p(\lambda)|^2}_{=:M^2} \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_i^2 =: M^2 \|y\|_A^2.$$

Und schließlich folgt

$$\|p(A)\|_A = \sup_{y\in\mathbb{R}^n,\, y\neq 0} \frac{\|p(A)y\|_A}{\|y\|_A} = M.$$

□

Mit diesem Resultat und der Fehlerabschätzung (8.14) können wir nun eine Konvergenzabschätzung für das CG-Verfahren herleiten.

Satz 8.30 (Konvergenz des CG-Verfahrens)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch positiv definit, durch $b \in \mathbb{R}^n$ die rechte Seite und durch $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Startwert gegeben. Dann gilt*

$$\|x^k - x\|_A \leq 2\left(\frac{1-1/\sqrt{\kappa}}{1+1/\sqrt{\kappa}}\right)^k \|x^0 - x\|_A, \quad k \geq 0,$$

mit der Spektralkondition $\kappa = \mathrm{cond}_2(A)$ der Matrix A.

Beweis: Aus dem Hilfsatz und der Abschätzung (8.14) folgt:

$$\|x^k - x\|_A \leq M\|x^0 - x\|_A,$$

mit

$$M = \min_{q\in P_k,\, q(0)=1} \max_{\lambda\in[\lambda_1,\lambda_n]} |q(\lambda)|.$$

Es gilt, eine möglichst scharfe Abschätzung für die Größe M zu finden. Gesucht ist ein Polynom $q \in P_k$, welches am Nullpunkt den Wert eins annimmt $q(0) = 1$ und auf dem Bereich $[\lambda_1, \lambda_n]$ möglichst nahe (in der Maximums-Norm) an 0 liegt.

Hierzu verwenden wir die Tschebyscheff-Approximation. Wir suchen die beste Approximation $p \in P_k$ zur Nullfunktion auf $[\lambda_1, \lambda_n]$. Dieses Polynom soll zusätzlich die Normierungseigenschaft $p(0) = 1$ besitzen. Daher scheidet die triviale Lösung $p = 0$ aus. Das Tschebyscheff-Polynom (siehe Abschnitt 9.6.2 und Satz 9.73)

$$T_k = \cos\left(k \arccos(x)\right),$$

hat die Eigenschaft

$$2^{-k-1} \max_{[-1,1]} |T_k(x)| = \min_{\alpha_0,\dots,\alpha_{k-1}} \max_{[-1,1]} |x^k + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i x^k|,$$

ist also bei Normierung des größten Monoms das Polynom, dessen Maximum auf $[-1, 1]$ minimal ist. Wir wählen nun die Transformation

$$x \mapsto \frac{\lambda_n + \lambda_1 - 2t}{\lambda_n - \lambda_1}$$

und erhalten mit

$$p(t) = T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1 - 2t}{\lambda_n - \lambda_1}\right) T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1}\right)^{-1},$$

das Polynom von Grad k, welches auf $[\lambda_1, \lambda_n]$ minimal ist und der Normierung

$$p(0) = 1$$

genügt. Es gilt

$$\sup_{t\in[\lambda_1,\lambda_n]} |p(t)| = T_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1}\right)^{-1} = T_k\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right)^{-1}, \tag{8.15}$$

mit der Spektralkondition

$$\kappa := \frac{\lambda_n}{\lambda_1}.$$

Wir nutzen die Darstellung der Tschebyscheff-Polynome außerhalb von $[-1, 1]$ aus Satz 9.73:

$$T_n(x) = \frac{1}{2}\Big[(x + \sqrt{x^2 - 1})^n + (x - \sqrt{x^2 - 1})^n\Big].$$

Für $x = \frac{\kappa+1}{\kappa-1}$ gilt:

$$\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} + \sqrt{\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right)^2 - 1} = \frac{\kappa + 2\sqrt{\kappa} + 1}{\kappa - 1} = \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1},$$

und entsprechend

$$\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} - \sqrt{\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right)^2 - 1} = \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1},$$

Hiermit kann (8.15) abgeschätzt werden:

$$T_k\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right) = \frac{1}{2}\Big[\left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}\right)^k + \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^k\Big] \geq \frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1}\right)^k$$

Also folgt:

$$\sup_{t\in[\lambda_1,\lambda_n]} T_k\left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}\right)^{-1} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^k = 2\left(\frac{1 - \frac{1}{\sqrt{\kappa}}}{1 + \frac{1}{\sqrt{\kappa}}}\right)k$$

□

In Abbildung **??** zeigen wir für die Situation $\lambda_1 = 1$ und $\lambda_n = 4$ die entsprechenden Polynome für $n = 2, 3, 4$.

Die Konvergenz des CG-Verfahrens ist gerade doppelt so schnell wie die des Gradientenverfahrens. Es gilt:

$$\rho := \frac{1 - 1/\sqrt{\kappa}}{1 + 1/\sqrt{\kappa}} = 1 - 2\sqrt{\kappa} + O(\kappa).$$

Für die Modellmatrix folgt $\rho = 1 - \frac{1}{n}$. Das CG-Verfahren ist für dünn besetzte symmetrische Gleichungssysteme eines der effizientesten Iterationsverfahren. Die Konvergenz hängt

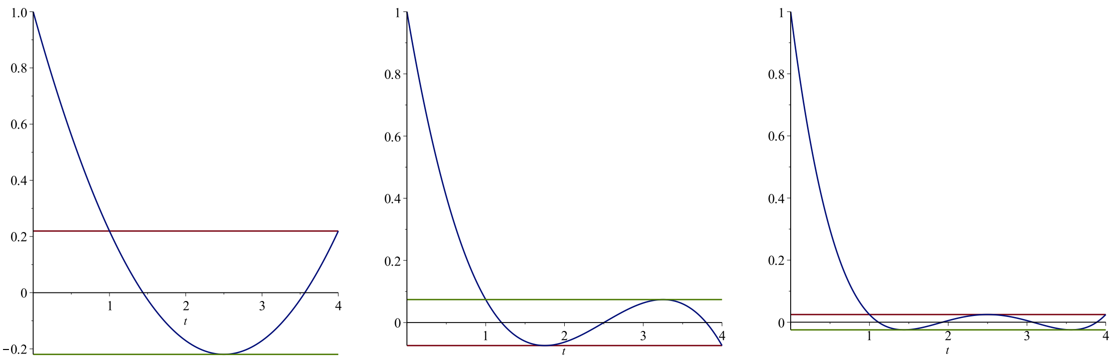


Abbildung 8.3.: abb:cgtscheby

wesentlich von der Kondition $\text{cond}_2(A)$ der Matrix A ab. Für $\text{cond}_2(A) \approx 1$ ist das Verfahren optimal: Zur Reduktion des Fehlers um einen gegebenen Faktor ϵ ist eine feste Anzahl von Schritten notwendig.

Abschließend diskutieren wir anhand der Modellmatrix die verschiedenen Verfahren im Vergleich:

Beispiel 8.31 (LGS mit der Modellmatrix)**.** *Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit $n = m^2$ die Modellmatrix:*

$$A = \begin{pmatrix} B & -I & & \\ -I & B & -I & \\ & -I & B & -I \\ & & -I & B \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & \\ & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix},$$

mit $B, I \in \mathbb{R}^{m\times m}$. Die Matrix A ist eine Bandmatrix mit Bandbreite $2m$. Weiter ist die Matrix A symmetrisch positiv definit. Sie ist irreduzibel und diagonaldominant und erfüllt in den Rändern der Blöcke das starke Zeilensummenkriterium. Alle bisher diskutieren Verfahren können auf die Matrix A angewendet werden. Größter sowie kleinster Eigenwert und Spektralkondition von A berechnen sich zu:

$$\lambda_{min} = \frac{2\pi^2}{n} + O(n^{-2}), \quad \lambda_{max} = 8 - \frac{2\pi^2}{n} + O(n^{-2}), \quad \kappa \approx \frac{4}{\pi^2} n \approx n.$$

Direkte Verfahren *Die LR-Zerlegung ist (da A positiv definit) ohne Permutierung durchzuführen. Gemäß Satz 3.25 beträgt der Aufwand hierzu $N_{LR} = nm^2 = 4n^2$ Operationen. Die Lösung ist dann bis auf Rundungsfehlereinflüsse exakt gegeben. Alternativ kann die Cholesky-Zerlegung von A erstellt werden. Hierzu sind $N_{LL} = 2n^2$ Operationen notwendig. LR- bzw. Cholesky-Zerlegung sind dicht besetzte Bandmatrizen. Das anschließende Lösen mit Vorwärts und Rückwärtselimination benötigt weitere $2nm$ Operationen. Wir fassen die notwendigen Operationen in folgender Tabelle zusammen:*

$n = m^2$	N_{LR}	N_{LL}
100	$5 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^4$
10000	$5 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^9$
1000000	$5 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{12}$

Bei effizienter Implementierung auf moderner Hardware ist das Gleichungssystem mit 10 000 *Unbekannten in wenigen Sekunden, das größte Gleichungssystem in wenigen Stunden lösbar. Grundlegend für die effiziente Anwendung direkter Verfahren ist eine Vorsortierung der dünn besetzten Systeme, siehe Abschnitt 3.5.*

Einfache Fixpunktiterationen *Wir schätzen zunächst für Jacobi- sowie Gauß-Seidel-Verfahren die Spektralradien ab. Mit einem Eigenwert λ und Eigenvektor w von A gilt:*

$$Aw = \lambda w \quad \Rightarrow \quad Dw + (L+R)w = \lambda w \quad \Rightarrow \quad -D^{-1}(L+R)w = -D^{-1}(\lambda I - D)w.$$

D.h. wegen $D_{ii} = 4$ gilt

$$Jw = \frac{\lambda - 4}{4} w,$$

und die Eigenwerte von J liegen zwischen

$$\lambda_{min}(J) = \frac{1}{4}(\lambda_{min}(A) - 4) \approx -1 + \frac{\pi^2}{2n}, \quad \lambda_{max}(J) = \frac{1}{4}(\lambda_{max}(A) - 4) \approx 1 - \frac{\pi^2}{2n}.$$

Minimaler und maximaler Eigenwert liegen jeweils nahe an -1 bzw. an 1. Für die Konvergenzrate gilt:

$$\rho_J := \mathrm{spr}(J) = 1 - \frac{\pi^2}{2n},$$

und mit (8.6) folgt für das Gauss-Seidel-Verfahren

$$\rho_H := \rho_J^2 \approx 1 - \frac{\pi^2}{n}.$$

Zur Reduktion des Fehlers um einen gegebenen Faktor ϵ sind t Schritte erforderlich:

$$\rho_J^{t_J} = \epsilon \quad \Rightarrow \quad t_J = \frac{\log(\epsilon)}{\log(\rho)} \approx \frac{2}{\pi^2} \log(\epsilon) n, \quad t_H \approx \frac{1}{\pi^2} \log(\epsilon) n,$$

Jeder Schritt hat den Aufwand eines Matrix-Vektor Produktes, d.h. im gegebenen Fall $5n$. Schließlich bestimmen wir gemäß (8.7) den optimalen SOR-Parameter zu

$$\omega_{opt} \approx 2 - 2\frac{\pi}{\sqrt{n}}.$$

Dann gilt:

$$\rho_\omega = \omega_{opt} - 1 \approx 1 - 2\frac{\pi}{\sqrt{n}}.$$

Hieraus erhalten wir:

$$t_\omega \approx \frac{\log(\epsilon)}{2\pi} \sqrt{n}.$$

Der Aufwand des SOR-Verfahrens entspricht dem des Gauß-Seidel-Verfahrens mit einer zusätzlichen Relaxation, d.h. $6n$ Operationen pro Schritt. Wir fassen für die drei Verfahren Konvergenzrate, Anzahl der notwendigen Schritte und Gesamtaufwand zusammen. Dabei ist stets $\epsilon = 10^{-4}$ gewählt:

	Jacobi		*Gauß-Seidel*		*SOR*		
$n = m^2$	t_J	N_j	t_H	N_H	ω_{opt}	t_J	N_J
100	*180*	10^5	*90*	$5 \cdot 10^4$	*1.53*	*9*	10^5
10000	*18500*	10^9	*9300*	$5 \cdot 10^8$	*1.94*	*142*	10^7
1000000	*1866600*	10^{13}	*933000*	$5 \cdot 10^{12}$	*1.99*	*1460*	10^9

Während das größte Gleichungssystem mit dem optimalen SOR-Verfahren in wenigen Sekunden gelöst werden kann, benötigen Jacobi und Gauß-Seidel-Verfahren etliche Stunden.

Abstiegsverfahren *Schließlich betrachten wir Gradienten und CG-Verfahren. Es gilt für die Kondition*

$$\kappa(A) = \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)} = \frac{4n}{\pi^2} - 1,$$

also folgt für die Konvergenzraten von Gradienten und CG-Verfahren:

$$\rho_{GR} \approx 1 - \frac{2}{\kappa} \approx 1 - \frac{\pi^2}{2n}, \quad \rho_{CG} \approx 1 - \frac{\pi}{\sqrt{n}}.$$

Bei effizienter Implementierung benötigt das Gradientenverfahren pro Iterationsschritt eine Matrix-Vektor Multiplikation ($5n$ Operationen), zwei Skalarprodukte ($2n$ Operationen) sowie 2 Vektor-Additionen ($2n$ Operationen), insgesamt somit $9n$ Operationen. Der Aufwand des CG-Verfahrens ist mit $15n$ Operationen etwas größer. Die Anzahl der Schritte bestimmt sich zu

$$\rho_{GR}^t = 10^{-4} \quad \Rightarrow \quad t_{GR} \approx \frac{n}{\pi^2}, \quad t_{CG} \approx \frac{\sqrt{n}}{\pi}.$$

Wir fassen zusammen:

	Gradienten		*CG*	
$n = m^2$	t_{GR}	N_{GR}	t_{CG}	N_{CG}
100	*18*	10^4	*9*	10^4
10000	*2 330*	10^8	*140*	10^7
1000000	*233 300*	10^{12}	*1400*	10^{10}

Wie bereits bekannt ist das Gradienten-Verfahren ebenso ineffektiv wie das Jacobi-Verfahren. Das CG-Verfahren erreicht etwa die gleiche Effizienz wie das SOR-Verfahren bei optimaler Wahl des Relaxationsparameters. Dieses Ergebnis darf nicht falsch interpretiert werden: im Allgemeinen ist dieser Relaxationsparameter nicht verfügbar und muss grob approximiert werden. D.h., in der praktischen Anwendung wird das SOR-Verfahren weit schlechter konvergieren und das CG-Verfahren ist im Allgemeinen überlegen.

8.5.1. Vorkonditionierung

Die Konvergenzrate des CG-Verfahrens hängt von der Konditionszahl der Systemmatrix ab. Es gilt:

$$\rho_{CG} = \frac{1 - \frac{1}{\sqrt{\kappa}}}{1 + \frac{1}{\sqrt{\kappa}}} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\kappa}} + O\left(\frac{1}{\kappa}\right).$$

Für Diskretisierungen von elliptischen partiellen Differentialgleichungen in 2 Dimensionen müssen wir z.B. $\kappa = O(N)$ erwarten, also

$$\rho_{CG} \sim 1 - \frac{1}{\sqrt{N}},$$

so dass die Konvergenzrate mit der Problemgröße noch immer schlechter wird.

Die Idee der Vorkonditionierung ist eine Reformulierung des linearen Gleichungssystems. Hier zu sei $P \in \mathbb{P}^{n\times n}$ eine Matrix, welche die Schreibweise

$$P = KK^T$$

erlaubt. Dann gilt:

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{K^{-1}A(K^T)^{-1}}_{=:\tilde{A}} \underbrace{K^T x}_{=:\tilde{x}} = \underbrace{K^{-1}b}_{=:\tilde{b}},$$

also

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}.$$

Im Fall

$$\mathrm{cond}_2(\tilde{A}) \ll \mathrm{cond}_2(A),$$

und falls die Anwendung von K^{-1} "preiswert" ist, so kann durch Betrachtung des *vorkonditionierten Systems* $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ eine wesentliche Beschleunigung erreicht werden. Die Bedingung $P = KK^T$ ist notwendig, damit die Matrix $\tilde{A}$ wieder symmetrisch ist.

Das CG-Verfahren mit Vorkonditionierung kann folgendermaßen formuliert werden:

Algorithmus 8.32 (CG-Verfahren mit Vorkonditionierung)**.** *Es sei* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *symmetrisch positiv definit,* $P = KK^T$ *ein symmetrischer Vorkonditionierer. Es sei* $x^0 \in \mathbb{R}^n$*. Berechne*

$$r^0 = b - Ax^0, \quad Pp^0 = r^0, \quad d^0 = p^0.$$

Iteriere für $k = 0, 1, \dots$

1. $\alpha_k = \frac{(r^k,d^k)}{(Ad^k,d^k)}$
2. $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$
3. $r^{k+1} = r^k - \alpha_k Ad^k$
4. $Pp^{k+1} = r^{k+1}$
5. $\beta_k = \frac{(r^{k+1},p^{k+1})}{(r^k,g^k)}$
6. $d^{k+1} = p^{k+1} + \beta_k d^k$.

In jedem Schritt der Verfahrens kommt als zusätzlicher Aufwand die Anwendung des Vorkonditionierers P hinzu. Beim der Auswahl des Vorkonditionierers ist darauf zu achten, dass er die Schreibweise $P = KK^T$ erlaubt - auch wenn die Teile K und K^T im Verfahren nicht genutzt werden. Für die Wahl des Vorkonditionierers gelten ähnliche Bedingungen wie für die Wahl der Iterationsmatrix einfacher Fixpunktverfahren, d.h. die Bedingung

$$P \approx A^{-1},$$

damit das vorkonditionierte Problem eine möglichst gute Kondition besitzt und

$$P \approx I,$$

damit die Anwendung des Vorkonditionierers möglichst billig ist. Dementsprechend werden im Allgemeinen auch ähnliche Verfahren gewählt:

- *Jacobi-Vorkonditionierung* Wir wählen $P \approx D^{-1}$, wobei D der Diagonalanteil der Matrix A ist. Hier gilt:
$$D = D^{\frac{1}{2}}(D^{\frac{1}{2}})^T,$$
d.h. bei $D_{ii} > 0$ ist dieser Vorkonditionierer zulässig. Für die vorkonditionierte Matrix gilt
$$\tilde{A} = D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad \tilde{a}_{ii} = 1$$
und die Vorkonditionierung bewirkt eine Skallierung der Matrix-Einträge. Diese Art der Vorkonditionierung kann die Kondition verbessern.

- *SSOR-Vorkonditionierung* Das SSOR-Verfahren ist eine symmetrische Variante des SOR-Verfahrens und basiert auf der Zerlegung
$$P = (D+\omega L)D^{-1}(D+\omega R) = \underbrace{(D^{\frac{1}{2}} + \omega LD^{-\frac{1}{2}})}_{K}\underbrace{(D^{\frac{1}{2}} + \omega D^{-\frac{1}{2}}R)}_{=K^T},$$

welches im Fall symmetrischer Matrizen $L = R^T$ die notwendige Bedingung an einen CG-Vorkonditionierer erfüllt.

Für die Modellmatrix der Diskretisierung der Laplace-Gleichung kann bei optimaler Wahl von ω (welches eine nicht-triviale Aufgabe ist) die Beziehung

$$\mathrm{cond}_2(\tilde{A}) = \sqrt{\mathrm{cond}_2(A)}$$

gezeigt werden. Die Konvergenzrate verbessert sich somit erheblich. Die Anzahl der notwendigen Schritte zum Erreichen einer Fehlerreduktion um den festen Faktor ϵ verbessert sich zu

$$t_{CG}(\epsilon) = \frac{\log(\epsilon)}{\log(1-\kappa^{-\frac{1}{2}})} \approx -\frac{\log(\epsilon)}{\sqrt{\kappa}}, \quad \tilde{t}_{CG}(\epsilon) = \frac{\log(\epsilon)}{\log(1-\kappa^{-\frac{1}{4}})} \approx \frac{\log(\epsilon)}{\sqrt[4]{\kappa}}$$

Anstelle von z.B. 100 werden nur 10 Schritte benötigt. Die Bestimmung eines optimalen Parameters ω ist im Allgemeinen jedoch sehr schwer.

- Schließlich betrachten wir die Vorkonditionierung durch unvollständige Cholesky-Zerlegung. Zur symmetrisch, positiv definiten Matrix A erstellen wir die approximative Zerlegung

$$A \approx C^T C,$$

wobei die Zerlegung in C^T und C die gleiche Besetzungsstruktur der Matrix A verwendet. D.h. $C_{ij} \neq 0$ nur dann, wenn auch $A_{ij} \neq 0$. Es gilt

$$A = C^T C + N,$$

wobei die Größe (also die Zahl der nicht-Nullen) und Bedeutung von N ganz wesentlich von der Sortierung der Matrix A abhängt (Siehe Abschnitt 3.5 und Beispiel **??**). Eine Analyse dieser Vorkonditionierung ist schwierig. In der Praxis zeigt sich jedoch, dass dieses Verfahren den anderen Methoden weit überlegen ist. Insbesondere kommt es ohne die Bestimmung des Parameters ω aus.

8.5.2. Krylow-Teilraum Verfahren für allgemeine Matrizen

Die CG-Iteration beruht stark auf der Symmetrie und positiven Definitheit der Matrix A. Wir wollen hier zum Abschluss kurz Methoden vorstellen, die auch bei allgemeinen Matrizen verwendet werden können.

Es sei also $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine reguläre, sonst aber allgemeine Matrix. Eine Symmetrisierung des Problems

$$Ax = b,$$

kann einfach durch Multiplikation mit A^T, also durch

$$A^T A x = A^T b,$$

erreicht werden. Die Matrix $B = A^T A$ ist positiv definit, da

$$(Bx, x)_2 = (A^T Ax, x)_2 = (Ax, Ax)_2 = \|Ax\|_2,$$

und prinzipiell könnte das CG-Verfahren auf $A^T A$ angewendet werden. Anstelle einer sind dann zwei Matrix-Vektor Multiplikationen pro Schritt durchzuführen. Gravierender ist die Auswirkung auf die Konvergenzrate, da

$$\kappa(B) = \mathrm{cond}_2(A^T A) = \mathrm{cond}_2(A)^2.$$

gilt. Die Konvergenz verschlechtert sich somit wesentlich.

Die GMRES-Methode, *Generalized Minimal Residual* überträgt die Idee des CG-Verfahrens auf allgemeine Matrizen. Aufbauend auf dem Krylow-Raum

$$K_k(d^0, A) = \{d^0, Ad^0, \dots, A^{k-1}d^0\},$$

wird zunächst eine Orthonormalbasis erstellt. Beim GMRES-Verfahren wird die Orthogonalität bzgl. des euklidischen Skalarprodukts erreicht

$$(d^i, d^j)_2 = \delta_{ij}, \quad i, j = 0, \dots, k-1.$$

Die Näherung $x^k \in x^0 + K_k$ wird dann mit Hilfe der Galerkin-Gleichung

$$(b - Ax^k, Ad^j)_2 = 0, \quad j = 0, \dots, k-1 \tag{8.16}$$

berechnet. Bei allgemeinen Matrizen kann kein 2-stufiges Orthogonalisierungsverfahren hergeleitet werden. Daher hat das GMRES-Verfahren einen weit höheren Aufwand als die CG-Iteration. Die Orthogonalbasis wird mit dem sogenannten *Arnoldi-Verfahren* entwickelt. Dieses erlaubt die Wiederverwendung der Faktoren, welche im Zuge der Orthonormalisierung berechnet wurden zur Lösung der Galerkin-Gleichung (8.16). Die Orthogonalisierung geschieht üblicherweise mit Givens-Rotationen oder auf Basis von Householder-Transformationen.

Die Schwachstelle des GMRES-Verfahrens ist der wachsende Aufwand mit der Anzahl der Schritte, da die Orthogonalisierung stets bis zum Anfang zurückgeführt werden muss. In der Praxis wird das GMRES-Verfahren daher meistens mit *Restart* durchgeführt: zur Orthogonalisierung wird stets nur eine feste Anzahl von Suchrichtungen N_o gespeichert. Nach jeweils N_o Schritten wird ein neuer Krylow-Raum aufgebaut und die Orthogonalisierung erneut gestartet.

Das GMRES-Verfahren ist die Standardmethode zur iterativen Lösung von großen linearen Gleichungssystemen mit dünn besetzter Matrix. Es lässt sich leicht mit Vorkonditionierung verbinden. Da die Matrix A sowieso nicht symmetrisch ist, erlaubt das GMRES-Verfahren eine sehr flexlible Wahl von Vorkonditionierern.

Alternativ zum GMRES-Verfahren ist die *Biconjugate Gradient Stabilized-Methode* (BiCG-Stab) die zweite gebräuchliche Iteration. Der Ansatz des BiCGStab-Verfahrens ist, Fehler in der Orthogonalität bewusst hinzunehmen. Das Verfahren basiert auf zwei kurzen Rekursionen für gestörte Orthogonale Vektoren. Eine Analyse des Verfahrens ist schwierig. In der praktischen Anwendung erweist es sich als ähnlich effizient wie die GMRES-Iteration. Die einzelnen Schritte sind schneller, da kurze Rekursionsformeln genutzt werden können. Dafür ist die Konvergenzrate meist schlechter. Auch das BiCGStab Verfahren kann mit Vorkonditionierern beschleunigt werden.

9. Interpolation und Approximation

In diesem Kapitel befassen wir uns mit der Frage, wie eine Reihe von Daten (z.B. aus physikalischen Messungen, experimentellen Beobachtungen, Börse, etc.) durch eine möglichst *einfache* Funktion $p(x)$ (z.B. Polynome) angenähert werden kann. Auf der anderen Seite soll geklärt werden, wie *komplizierte* Funktionen durch einfachere Funktionen aus einer bestimmten Klasse (z.B. Raum der Polynome) approximiert werden können.

Bei der *Interpolation* wird die approximierende Funktion p derart konstruiert, dass diese an den vorliegenden (diskreten) Daten exakt ist:

$$p(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, n.$$

Die Stützstellen und Stützwerte (x_k, y_k) sind entweder diskrete Datenwerte (z.B. von Experimenten) oder durch Funktionen bestimmt $y_k = f(x_k)$. Mit Hilfe der Interpolation $p(x)$ können bis dato unbekannte Werte an Zwischenstellen $\xi \in (x_k, x_{k+1})$ oder das Integral bzw. die Ableitung von $p(x)$ bestimmt werden. Darüberhinaus hat die Interpolation eine wesentliche Bedeutung zur Entwicklung weiterer numerischer Verfahren, wie beispielsweise numerische Quadratur, Differentiation oder in weiterführenden Vorlesungen Entwicklung Finiter Elemente [11].

Die *Approximation* ist allgemeiner gefasst. Wieder wird eine einfache Funktion $p(x)$ (also z.B. ein Polynom) gesucht, welche diskrete oder durch Funktionen bestimmte Datenwerte (x_k, y_k) möglichst gut approximiert. Im Gegensatz zur Interpolation wird jedoch nicht zwingend $p(x_k) = y_k$ in ausgezeichneten Punkten x_k gefordert. Was die Approximation auszeichnet wird von Fall zu Fall entschieden. Möglich ist z.B. bei der Approximation einer Funktion f die beste Approximation bzgl. einer Norm

$$p \in P: \quad \|p - f\| = \min_{q \in P} \|q - f\|,$$

wobei P die Klasse der betrachteten einfachen Funktionen ist (also z.B. alle quadratischen Polynome). Eine Anwendung der Approximation ist das "Fitten" von diskreten Datenwerten, welche durch Experimente gegeben sind. Oft werden viele tausend Messwerte berücksichtigt, die von der zugrundeliegenden (etwa physikalischen) Formel jedoch aufgrund von statistischen Messfehlern nicht exakt im Sinne der Interpolation, sondern nur approximativ erfüllt werden sollen. Eine zweite Anwendung ist wieder die möglichst einfache Darstellung von gegebenen Funktionen.

Grundsätzlich hat die Darstellung von diskreten Daten als einfache Funktion oder die Approximation einer allgemeinen Funktion durch z.B. ein Polynom den großen Vorteil, dass Elementaroperationen wie Ableitungsbildung und Integration, viel einfacher ausgeführt werden können. Als Funktionenräume zur Approximation werden möglichst *einfache* Funktionen verwendet. Beispiele sind die Polynomräume mit Funktionen

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k x^k,$$

oder z.B. die Räume der trigonometrischen Funktionen

$$q(x) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k \cos(k\pi x) + \beta_k \sin(k\pi_x).$$

Einen Zusammenhang zwischen Polynomen und stetigen Funktionen stellt der Weierstraßsche Approximationssatz her (Analysis I):

Satz 9.1 (Weierstraßsche Approximationssatz)**.** *Es sei $f \in C[a,b]$. Dann gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein auf $[a,b]$ definiertes Polynom p, so dass*

$$|f(x) - p(x)| < \varepsilon \quad \forall x \in [a,b].$$

Der Weierstraßsche Approximationssatz besagt zunächst, dass es möglich ist, jede stetige Funktion beliebig gut durch ein Polynom zu approximieren, hilft jedoch noch nicht bei der praktischen Durchführung. Auch hier gibt es einen einfachen Ansatz in der Analysis:

Satz 9.2 (Taylor-Entwicklung)**.** *Es sei $f \in C^{n+1}[a,b]$. Das n-te Taylor-Polynom zu $x_0 \in (a,b)$*

$$t_n(x;x_0) := \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

ist eine Approximation zu f in der Umgebung von x_0. Es gilt die Fehlerabschätzung:

$$f(x) - t_n(x;x_0) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1},$$

mit einer Zwischenstelle $\xi_x \in [a,b]$.

Hier ist $C([a,b])$ der Vektorraum der auf dem Intervall $[a,b]$ stetigen Funktionen und $C^k([a,b])$ der Raum der auf $[a,b]$ k-mal stetig differenzierbaren Funktionen. Die Taylor-Entwicklung ermöglicht eine konkrete Vorgehensweise zum Erstellen eines approximativen Polynoms. Wir sehen jedoch bereits, dass wir eine sehr starke Regularität von f benötigen. Darüber hinaus ist die Taylor-Entwicklung nur für Funktionen, nicht aber für diskrete Datenwerte (x_k, y_k) möglich.

Neben der Taylor-Entwicklung von Funktionen stellt die Analysis noch die *Fourier-Analyse* zur Approximation von periodischen Funktionen f mit Hilfe von trigonometrischen Polynomen zur Verfügung.

9.1. Polynominterpolation

Wir bezeichnen mit P_n den Vektorraum der Polynome vom Grad $\leq n$:

$$P_n := \left\{ p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k \;\; a_k \in \mathbb{R}, k = 0, \ldots, n \right\}.$$

Definition 9.3 (Lagrangesche Interpolationsaufgabe)**.** *Die Lagrangesche Interpolationsaufgabe besteht darin, zu $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen (Knoten) $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ und zugehörigen gegebenen Stützwerten $y_0, \ldots, y_n \in \mathbb{R}$ ein Polynom $p \in P_n$ zu bestimmen, so dass die Interpolationsbedingung*

$$p(x_k) = y_k, \quad k = 0, \ldots, n,$$

erfüllt ist.

Satz 9.4. *Die Lagrangesche Interpolationsaufgabe ist eindeutig lösbar.*

Beweis: Die Eindeutigkeit wird zuerst nachgewiesen. Es seien $p_1, p_2 \in P_n$ zwei Lösungen. Dann gilt für das Differenzpolynom $p := p_1 - p_2 \in P_n$:

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

d.h. p hat $n+1$ Nullstellen und ist folglich das Nullpolynom. Dies kann mit Hilfe des Satzes von Rolle nachgewiesen werden. Zum Nachweis der Existenz betrachten wir die Gleichungen $p(x_k) = y_k, k = 0, \ldots, n$. Dies kann als ein lineares Gleichungssystem aufgefasst werden, welches $n+1$ Gleichungen für die $n+1$ unbekannten Koeffizienten $a_0, \ldots, a_n$ des Polynoms $p \in P_n$. Wegen der bereits gezeigten Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms p (also der Injektivität) hat dieses System notwendigerweise eine Lösung (Surjektivität). □

Die gegebenen Stützwerte y_k können Werte einer gegebenen Funktion f sein, d.h.

$$f(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, \ldots, n,$$

oder auch beliebige diskrete Datenwerte

$$(x_k, y_k), \quad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Sind die Stützstellen paarweise verschieden, so lässt sich die Interpolationsaufgabe als ein System von linearen Gleichungen formulieren:

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n &= y_1 \\ a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \cdots + a_n x_2^n &= y_2 \\ &\vdots \\ a_n + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n &= y_n, \end{aligned}$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Das Erstellen des Interpolationspolynoms erfordert demnach das Lösen eines quadratischen linearen Gleichungssystems mit $n+1$ Gleichungen. Die Matrix ist die sogenannte *Vandermonde-Matrix*. Im allgemeinen Fall ist diese Matrix sehr schlecht konditioniert mit einer exponentiell steigenden Konditionszahl. Dieser direkte Weg eignet sich daher nicht zum praktischen Lösen der Interpolationsaufgabe.

9.1.1. Lagrangesche Darstellung

Zur Bewältigung der Interpolationsaufgabe werden wir eine Basis des Raums P_n definieren, welche ein unmittelbares Aufstellen des Interpolationspolynoms erlaubt. Wir definieren:

Satz 9.5 (Lagrange-Basispolynome)**.** *Es seien $x_k \in \mathbb{R}$ für $k = 0, \dots, n$ paarweise verschiedene Stützstellen. Die Lagrange-Polynome*

$$L_k^{(n)}(x) := \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \in P_n, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

definieren eine Basis des P_n. Weiter gilt

$$L_k^{(n)}(x_l) = \delta_{kl} \tag{9.1}$$

Beweis: *(i)* Wir zeigen zunächst die Eigenschaft (9.1). Es gilt

$$L_k^{(n)}(x_k) = \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x_k - x_j}{x_k - x_j} = 1.$$

Weiter ist für $l \neq k$

$$L_k^{(n)}(x_l) = \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x_l - x_j}{x_k - x_j} = \frac{x_l - x_l}{x_k - x_l} \prod_{j=0, j\neq k, j\neq l}^{n} \frac{x_l - x_j}{x_k - x_j} = 0.$$

(ii) Nach Konstruktion gilt $L_k^{(n)} \in P_n$ für $k = 0, \dots, n$. Weiter sind alle Polynome $L_k^{(n)}$ linear unabhängig. Ansonsten gäbe es Koeffizienten $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ mit

$$L_0^{(n)}(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i L_i^{(n)}(x).$$

Für $x = x_0$ ergibt sich ein Widerspruch. □

Satz 9.6 (Lagrangesche Darstellung). *Es seien $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ paarweise verschiedene Stützstellen und $y_0, \dots, y_n \in \mathbb{R}$. Die (eindeutige) Lösung der Lagrangesche Interpolationsaufgabe $p(x_k) = y_k$ für $k = 0, \dots, n$ ist gegeben durch*

$$p(x) := \sum_{k=0}^{n} y_k L_k^{(n)}(x).$$

Beweis: Diese Aussage folgt unmittelbar aus soeben nachgewiesenen Eigenschaften der Lagrangeschen Basispolynome. □

Die Lagrangesche Darstellung des Interpolationspolynoms besticht durch ihre Einfachheit. Sie hat allerdings den großen Nachteil, das jedes Basispolynom $L_k^{(n)}(x)$ von sämtlichen Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n$ abhängt. Angenommen zur Steigerung der Genauigkeit soll eine Stützstelle x_{n+1} hinzugenommen werden, so müssen sämtliche Basispolynome ausgetauscht werden.

9.1.2. Newtonsche Darstellung

Um dieses Problem zu lösen führen wir eine weitere Basis des Polynomraums P_n ein:

Satz 9.7 (Newton-Basispolynome). *Es seien x_k für $k = 0, \dots, n$ paarweise verschiedene Stützstellen. Durch*

$$N_0(x) := 1,$$
$$N_k(x) := \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j), \quad k = 1, \dots, n,$$

ist eine Basis des P_n gegeben.

Beweis: Die Basiseigenschaft kann wieder einfach nachgewiesen werden. Zunächst gilt $N_k \in P_n$ für $k = 0, \dots, n$. Weiter sind die Basispolynome linear unabhängig. Dies folgt aus der Eigenschaft

$$N_k(x_l) = \begin{cases} 0 & k > l \\ \neq 0 & k \le l. \end{cases}$$

Ein Polynom N_k kann nicht durch eine lineare Kombination von Polynomen P_l mit $l < k$ dargestellt werden. □

Das Basispolynom $N_k(x)$ hängt nur von den Stützstellen $x_0, \dots, x_k$ ab. Bei Hinzunahme einer Stützstelle x_{k+1} müssen die ersten Basispolynome nicht geändert werden. Das Interpolationspolynom wird nach dem Ansatz

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k N_k(x),$$

bestimmt. Für die Stützstelle x_k gilt $N_l(x_k) = 0$ für alle $l > k$. Wir gehen rekursiv vor:

$$\begin{aligned}
y_0 &\stackrel{!}{=} p(x_0) = a_0,\\
y_1 &\stackrel{!}{=} p(x_1) = a_0 + a_1(x_1 - x_0),\\
&\vdots\\
y_n &\stackrel{!}{=} p(x_n) = a_0 + a_1(x_n - x_0) + \ldots + a_n(x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1}).
\end{aligned}$$

Im Gegensatz zur vorher kennengelernten Lagrangeschen Darstellung kann ein weiteres Datenpaar (x_{n+1}, y_{n+1}) leicht hinzugefügt werden. Ist das Interpolationspolynom $p_n \in P_n$ gegeben, so kann eine Stützstelle x_{n+1} einfach hinzugenommen werden:

$$y_{n+1} \stackrel{!}{=} p_{n+1}(x_{n+1}) = p_n(x_{n+1}) + a_{n+1}N_{n+1}(x_{n+1}) \quad \Rightarrow \quad a_{n+1} = \frac{y_{n+1} - p_n(x_{n+1})}{N_{n+1}(x_{n+1})}. \tag{9.2}$$

In der Praxis werden die Koeffizienten a_k durch den folgenden Algorithmus numerisch stabil berechnet:

Satz 9.8. *Es seien $x_k \in \mathbb{R}$ für $k = 0, \ldots, n$ paarweise verschiedene Stützstellen und $y_k \in \mathbb{R}$. Das Lagrangesche Interpolationspolynom lautet bezüglich der Newtonschen Polynombasis:*

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} y[x_0, \ldots, x_k]N_k(x).$$

Die Notation $y[x_0, \ldots, x_k]$ bezeichnet die dividierten Differenzen*, welche über die folgende rekursive Vorschrift definiert sind:*

```
für k = 0,...,n setze y[x_k] := y_k
für l = 1,...,n und
    für k = 0,...,n-l berechne
        y[x_k,...,x_{k+l}] := (y[x_{k+1},...,x_{k+l}] - y[x_k,...,x_{k+l-1}]) / (x_{k+l} - x_k)
```

Beweis: Wir bezeichnen mit $p_{k,k+l} \in P_l$ das Polynom, welches die Interpolation zu den $l + 1$ Punkten $(x_k, y_k), \ldots, (x_{k+l}, y_{k+l})$ darstellt. Insbesondere ist durch $p_{0,n}$ das gesuchte Polynom $p \in P_n$ gegeben. Wir zeigen, dass die folgende Aussage für alle $l = 0, \ldots n$ und $k = 0, \ldots, n - l$ gilt:

$$p_{k,k+l}(x) = y[x_k] + y[x_k, x_{k+1}](x - x_k) + \cdots + y[x_k, \ldots, x_{k+l}](x - x_k)\cdots(x - x_{k+l-1}). \tag{9.3}$$

Wir führen den Beweis durch Induktion nach dem Polynomgrad l. Für $l = 0$ gilt $p_{k,k}(x) = y[y_k] = y_k$. Angenommen, die Behauptung sei richtig für $l - 1 \geq 0$. D.h. insbesondere, das Polynom $p_{k,k+l-1}$ ist in Darstellung (9.3) gegeben und interpoliert die Punkte $(x_k, y_k), \ldots, (x_{k+l-1}, y_{k+l-1})$ und das Polynom $p_{k+1,k+l}$ interpoliert die Punkte (x_{k+1}, y_{k+1}), $\ldots$, (x_{k+l}, y_{k+l}). Dann ist durch

$$q(x) = \frac{(x - x_k)p_{k+1,k+l}(x) - (x - x_{k+l})p_{k,k+l-1}(x)}{x_{k+l} - x_k}, \tag{9.4}$$

ein Interpolationspolynom durch die Punkte $(x_k, y_k), \dots, (x_{k+l}, y_{k+l})$ gegeben. Dies macht man sich durch Einsetzen von x_i in $q(x)$ deutlich. Für innere Punkte $i = k+1, \dots, k+l-1$ gilt $p_{k,k+l-1}(x_i) = p_{k+1,k+l}(x_i) = y_i$, für x_k und x_{k+l} ist jeweils einer der beiden Faktoren gleich Null. Es gilt somit für das gesuchte Interpolationspolynom $p_{k,k+l} = q$. Nach Konstruktion (9.2) gilt jedoch auch die folgende Darstellung:

$$p_{k,k+l}(x) = p_{k,k+l-1}(x) + a(x - x_k) \cdots (x - x_{k+l-1}).$$

Koeffizientenvergleich des führenden Monoms x^n zwischen dieser Darstellung und (9.4) liefert mit Hilfe von (9.3) für $p_{k,k+l-1}$ sowie $p_{k+1,k+l}$:

$$a = \frac{y[x_{k+1}, \dots, x_{k+l}] - y[x_k, \dots, x_{k+l-1}]}{x_{k+l} - x_k} = y[x_k, \dots, x_{k+l}].$$

□

Dieses rekursive Konstruktionsprinzip legt sofort einen Algorithmus zum Auswerten der Interpolation an einer Stelle $\xi \in \mathbb{R}$ nahe, ohne dass das gesuchte Interpolationspolynom $p(x)$ zuvor explizit bestimmt werden muss. Wir gehen hierzu von der Darstellung (9.4) aus:

Algorithmus 9.9 (Neville-Schema)**.** *Es seien die Stützstellenpaare* $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ *gegeben sowie der Auswertungspunkt* ξ. *Berechne* $p(\xi) = p_{0,n}$*:*

```
für k = 0,...,n setze p_{k,k} := y_k
für l = 1,...,n und
    für k = 0,...,n-l berechne
        p_{k,k+l} := p_{k,k+l-1} + (ξ - x_k) (p_{k+1,k+l} - p_{k,k+l-1}) / (x_{k+l} - x_k)
```

Bei der Durchführung des Neville-Schemas erhalten wir mit $p_{k,l}$ automatisch die Approximationen der Interpolationspolynome durch $(x_k, y_k), \dots, (x_{k+l}, y_{k+l})$. Wir führen das Neville-Schema exemplarisch durch:

Beispiel 9.10 (Neville-Schema)**.** *Wir betrachten die Stützstellenpaare* $(0,0), (1,1), (2,8), (3,27)$, *welche von der Funktion* $f(x) = x^3$ *abgegriffen sind. Wir führen das Neville-Schema zur Berechnung der Interpolation im Punkt* $\xi = 0.5$ *rekursiv aus:*

$$\begin{array}{ccccccc}
p_{00} = 0 & & p_{11} = 1 & & p_{22} = 8 & & p_{33} = 27 \\
\hline
& p_{01} = 0.5 & & p_{12} = -2.5 & & p_{23} = -20.5 & \\
& & p_{02} = -0.25 & & p_{13} = 2 & & \\
& & & p_{03} = 0.125 & & &
\end{array}$$

Die finale Approximation $p_{03} = 0.125 = 0.5^3$ *ist exakt. Dies ist zu erwarten, da* $f \in P_3$. *Als Stichprobe betrachten wir die sehr schlechte Approximation* p_{23}, *welche sich durch das linearen Interpolationspolynom* $p_{2,3}(x)$ *durch die Stützstellen* $(2,8)$ *und* $(3,27)$, *also durch*

$$p_{2,3}(x) = 8 + \frac{27-8}{3-2}(x-2) = 19x - 30$$

ergibt. Es gilt $p_{2,3}(0.5) = -20.5$.

9.1.3. Interpolation von Funktionen und Fehlerabschätzungen

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Interpolation von Funktionen. Die Punkte sind nun nicht mehr durch einen Datensatz gegeben, sondern durch Auswertung einer gegebenen Funktion f auf $[a,b]$:

$$y_k = f(x_k), \quad x_k \in [a,b],\ k = 0,\dots,n.$$

Die Durchführbarkeit, also Existenz und Eindeutigkeit eines Interpolationspolynoms wurde bereits in den vorangehenden Abschnitten beantwortet. Bei der Interpolation von Funktionen stellt sich hier die Frage, *wie gut* das Interpolationspolynom $p \in P_n$ die Funktion f auf $[a,b]$ approximiert.

Satz 9.11 (Interpolationsfehler mit differenziellem Restglied)**.** *Es sei $f \in C^{n+1}[a,b]$ und $p_n \in P_n$ das Interpolationspolynom zu f in den $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0,\dots,x_n$. Dann gibt es zu jedem $x \in [a,b]$ ein $\xi \in (a,b)$, so dass*

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j). \tag{9.5}$$

Insbesondere gilt

$$|f(x) - p(x)| \le \frac{\max_{\xi\in(a,b)} |f^{n+1}(\xi)|}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} |x - x_j|. \tag{9.6}$$

Beweis: Falls x mit einer Stützstelle zusammenfällt, d.h. $x = x_k$ für ein $k \in \{0,\dots,n\}$, dann verschwindet der Fehler und wir sind fertig. Es sei daher $x \neq x_k$ für alle $k = 0,1,\dots,n$ und $F \in C^{n+1}[a,b]$ mit

$$F(t) := f(t) - p_n(t) - K(x) \prod_{j=0}^{n} (t - x_j).$$

$K(x)$ sei so bestimmt, so dass $F(x) = 0$. Dies ist möglich, da

$$\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \neq 0 \quad \Rightarrow \quad K(x) = \frac{f(x) - p_n(t)}{\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)}.$$

Dann besitzt $F(t)$ in $[a,b]$ mindestens $n+2$ verschiedene Nullstellen $x_0, x_1, \dots, x_n, x$. Durch wiederholte Anwendung des Satzes von Rolle hat die Ableitung $F^{(n+1)}$ mindestens eine Nullstelle $\xi \in (a,b)$. Mit

$$0 = F^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - p^{(n+1)}(\xi) - K(x)(n+1)! = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - K(x)(n+1)!.$$

Hieraus folgt die Behauptung mittels

$$K(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad \Rightarrow \quad f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$$

□

Satz 9.12 (Interpolationsfehler mit Integral-Restglied)**.** *Es sei $f \in C^{n+1}[a,b]$. Dann gilt für $x \in [a,b] \setminus \{x_0,\dots,x_n\}$ die Darstellung*

$$f(x) - p(x) = f[x_0,\dots,x_n,x] \prod_{j=0}^{n} (x - x_j),$$

mit den Interpolationsbedingungen $f[x_i,\dots,x_{i+k}] := y[x_i,\dots,x_{i+k}]$ und

$$f[x_0,\dots,x_n,x] = \\ \int_0^1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_n} f^{(n+1)}(x_0 + t_1(x_1 - x_0) + \ldots + t(x - x_n))\, dt \,\ldots dt_2\, dt_1.$$

Beweis: Wird folgen. □

Für den Fehler der Lagrange-Interpolation können die folgenden Betrachtungen geführt werden. In (9.5) wird für großes n der Term $\frac{1}{(n+1)!}$ sehr klein. Das Produkt $\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$ wird klein, wenn die Stützstellen sehr dicht beieinander liegen. Sind alle Ableitungen von f gleichmäßig (bzgl. der Ableitungsstufe) beschränkt auf $[a,b]$, so gilt mit (9.6), dass

$$\max_{a \le x \le b} |f(x) - p(x)| \to 0, \quad n \to \infty.$$

Haben die Ableitungen der zu interpolierenden Funktion jedoch ein zu starkes Wachstumsverhalten für $n \to \infty$, z.B.

$$f(x) = (1 + x^2)^{-1}, \quad |f^n(x)| \approx 2^n n! O(|x|^{-2-n}),$$

so konvergiert die Interpolation nicht gleichmäßig auf $[a,b]$.

Beispiel 9.13. *Die Funktion $f(x) = |x|, x \in [-1,1]$ werde mit Hilfe der Lagrange-Interpolation in den Stützstellen*

$$x_k = -1 + kh, \quad k = 0,\dots,2m, \quad h = 1/m, \quad x \neq x_k$$

interpoliert. Dies ergibt das globale Verhalten

$$p_m(x) \nrightarrow f(x), \quad m \to \infty.$$

Zwar ist f in diesem Beispiel nicht differenzierbar, dennoch ist dieses Verhalten der Lagrange-Interpolation auch bei anderen Beispielen zu beobachten. Man betrachte z.B. die Funktion

$$f(x) = (1 + x^2)^{-1}, \quad x \in [-5,5].$$

Wir fassen die bisherigen Ergebnisse zusammen:

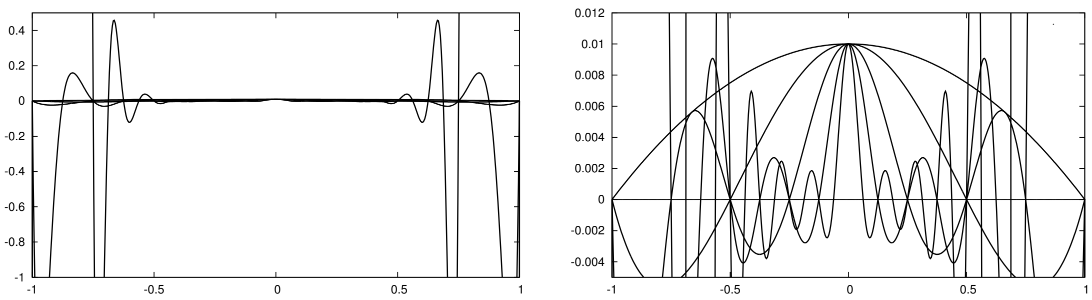


Abbildung 9.1.: Interpolationspolynome $\tilde{p}_m(x) \in P_{2m}$ für $m = 1, 2, 4, 8$. Links: das komplette Interpolationsintervall. Rechts: Ausschnitt nahe $y = 0$.

Bemerkung 9.14. *Der Approximationssatz von Weierstraß besagt, dass jede Funktion $f \in C([a, b])$ durch ein Polynom beliebig gut approximiert werden kann. Die Analysis gibt jedoch keine Hilfestellung bei der konkreten Durchführung der Approximation. Die Lagrangesche Interpolation ist eine Möglichkeit zur Approximation. Die Qualität dieser Approximation wird jedoch wesentlich durch die Regularität der Daten, also durch f bestimmt. Eine gleichmäßige Approximation von Funktionen mit Lagrangeschen Interpolationspolynomen ist im Allgemeinen nicht möglich.*

Die Lagrangesche Interpolation "krankt" demnach an den gleichen Einschränkungen wie die Taylor-Entwicklung, Satz 9.2. Von der Möglichkeit, eine nur stetige Funktion $f \in C([a, b])$ beliebig gut zu approximieren sind wir noch weit entfernt.

Ein zweiter Nachteil der Lagrange-Interpolation ist die fehlende Lokalität. Eine Störung in einer Stützstelle $(\tilde{x}_k, \tilde{y}_k)$ hat Auswirkung auf alle Lagrange-Polynome und insbesondere auf das gesamte Interpolationsintervall. Wir betrachten hierzu ein Beispiel:

Beispiel 9.15 (Globaler Fehlereinfluss)**.** *Wir suchen das Interpolationspolynom zu der Funktion $f(x) = 0$ in den $2m + 1$ Stützstellen*

$$x_k = -1 + kh, \quad k = -m, \dots, m, \quad h = \frac{1}{m}.$$

Das exakte Interpolationspolynom $p \in P_{2m}$ ist natürlich durch $p = 0$ gegeben. Wir nehmen an, dass die Funktionsauswertung in Nullpunkt gestört ist:

$$y_k = \begin{cases} 0 & k \neq 0 \\ \epsilon & k = 0 \end{cases},$$

mit einem kleinen ϵ. Das gestörte Interpolationspolynom ist in Lagrangescher Darstellung gegeben durch

$$\tilde{p}(x) = \prod_{i=-m, i\neq 0}^{m} \frac{x - x_i}{x_i}.$$

In Abbildung 9.1 zeigen wir $\tilde{p}_m \in P_{2m}$ *für die Fälle* $m = 1, 2, 4, 8$ *mit einer Störung* $\epsilon = 0.01$*. Trotz dieser kleinen Störung an der Stelle* $x = 0$ *weichen die Interpolationspolynom am Intervallrand sehr stark von* $y_k = 0$ *ab. In der rechten Abbildung sieht man, dass für kleine Polynomgrade, also* $m = 1$ *und* $m = 2$ *der maximale Fehler auf dem Intervall nicht größer als die anfängliche Störung* $\epsilon = 0.01$ *ist. Die Lagrangesche Interpolation ist instabil für große Polynomgrade.*

Das ungünstige Verhalten der Interpolation an den Intervallrändern wird *Runges Phänomen* genannt. Es erklärt sich aus der Tatsache, dass jedes Polynom $p(x)$ für $x \to \pm\infty$ gegen $p \to \pm\infty$ strebt. Eine zu interpolierende Funktion, welche diese Eigenschaft nicht hat, etwa

$$r(x) = \frac{1}{1 + x^2},$$

für welche $r \to 0$ für $x \to \pm\infty$, kann im allgemeinen mit Polynomen global schlecht dargestellt werden.

Hermite Interpolation

Zum Abschluss der Funktionsinterpolation erwähnen wir noch eine Verallgemeinerung, die sogenannte *Hermitesche Interpolationsaufgabe.* Diese unterscheidet sich von der Lagrange-Interpolation durch die Möglichkeit neben Funktionswerten $p(x_k) = f(x_k)$ auch Gleichheit von Ableitungswerten $p^{(i)}(x_k) = f^{(i)}(x_k)$ zu fordern. Wir fassen zusammen:

Satz 9.16 (Hermite Interpolation)**.** *Es sei* $f \in C^{(n+1)}([a, b])$*. Es seien* $x_0, \dots, x_m$ *paarweise verschiedene Stützstellen und* $\mu_k \in \mathbb{N}$ *für* $k = 0, \dots, m$ *ein Ableitungsindex. Ferner gelte* $n = m + \sum_{k=0}^{m} \mu_k$ *. Das Hermitesche Interpolationspolynom zu*

$$k = 0, \dots, m: \quad p^{(i)}(x_k) = f^{(i)}(x_k), \quad i = 0, \dots, \mu_k,$$

ist eindeutig bestimmt und zu jedem $x \in [a, b]$ *existiert eine Zwischenstelle* $\xi \in [a, b]$*, so dass gilt:*

$$\begin{aligned} f(x) - p(x) &= f[\underbrace{x_0, \dots, x_0}_{\mu_0+1}, \dots, \underbrace{x_m, \dots, x_m}_{\mu_m+1}, x] \prod_{k=0}^{m} (x - x_k)^{\mu_k+1} \\ &= \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \prod_{k=0}^{m} (x - x_k)^{\mu_k+1}. \end{aligned}$$

9.2. Stückweise Interpolation

Ein wesentlicher Defekt der *globalen* Interpolation aus dem vorherigen Abschnitt ist, dass die interpolierenden Polynome starke Oszillationen zwischen den Stützstellen mit immer größeren Werten annehmen. Der Grund ist die generische Steifheit, die durch die *implizite* Forderung von C^∞-übergängen in den Stützstellen gegeben ist. Die Steifheit kann dadurch reduziert werden, dass die globale Funktion als *stückweise* polynomiale (Teil)-Funktionen bzgl. der Zerlegung $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n < b$ zusammengesetzt wird. In den Stützstellen x_i werden dann geeignete Differenzierbarkeitseigenschaften gefordert. Das Wort Spline wird in der Literatur meist für den *kubischen* Spline verwendet, auf den wir noch eingehen werden, allgemeiner für stückweise Interpolierende, die höhere globale Regularitätseigenschaften haben. Einfache stückweise Interpolierende, etwa stückweise lineare Funktionen haben darüber hinaus eine herausragende Bedeutung bei der Finite Elemente Methode zur Approximation der Lösung von Differentialgleichungen.

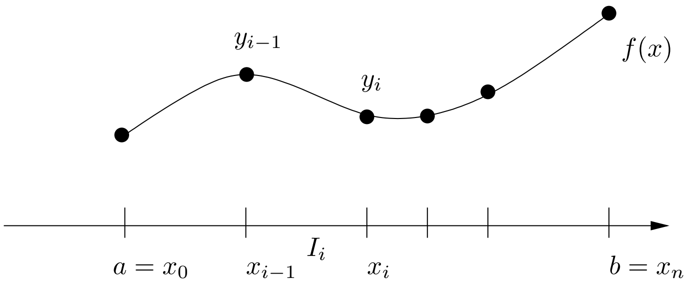


Abbildung 9.2.: Stückweise Interpolation.

Das globale Intervall (wie vorher $[a, b] =: I$) wird in Teilintervalle $I_i = [x_{i-1}, x_i]$ mit der Länge $h_i = x_i - x_{i-1}$ unterteilt. Die Feinheit der gesamten Intervallunterteilung wird durch $h := \max_{i=1,\ldots n} h_i$ charakterisiert. Zur Definition der Splinefunktion (kurz Spline) seien die Vektorräume von stückweisen polynomialen Funktionen wie folgt gegeben:

$$S_h^{k,r}[a, b] := \{p \in C^r[a, b],\, p|_{I_i} \in P_k(I_i)\}, \quad k, r \in \{0, 1, 2, \ldots\}.$$

Zu einem Satz gegebener Stützwerte (die wie in Abschnitt 9.1 aus gegebenen Datenwerten oder Funktionswerten stammen können) in dem Gesamtintervall I, wird eine Interpolierende $p \in S_h^{k,r}[a, b]$ mit Hilfe von geeigneten Interpolationsbedingungen bestimmt.

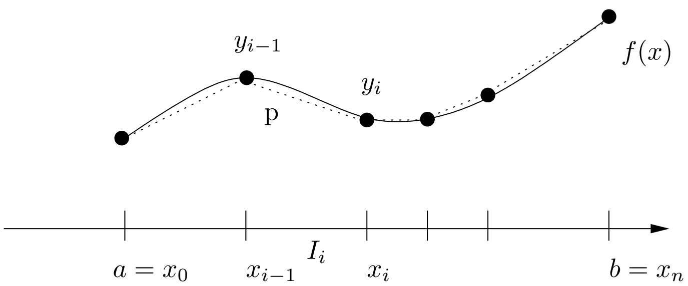


Abbildung 9.3.: Stückweise lineare Interpolation p einer Funktion f.

Wir diskutieren nun einige Beispiele, wobei der Fokus auf der Idee des ganzen Prozesses liegt und weniger auf der Beweisführung bei Fragen zu Existenz, Eindeutigkeit und Fehlerabschätzung.

Beispiel 9.17 (Stückweise lineare Interpolation)**.** *Die stückweise lineare Lagrange-Interpolierende (d.h. $k = 1, r = 0$) approximiert eine gegebene Funktion f auf $[a, b]$ durch einen Polygonzug in den Stützstellen x_i, $i = 0, \dots, n$:*

$$p \in S_h^{1,0}[a, b] = \{p \in C[a, b],\ p|_{I_i} \in P_1(I_i)\},$$

mit den Interpolationsbedingungen

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Anwendung der Fehlerabschätzung für die Lagrange-Interpolation separat auf jedem I_i liefert die globale Fehlerabschätzung

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p(x)| \leq \frac{1}{2} h^2 \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|. \tag{9.7}$$

Für kleine Schrittweiten gilt

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p(x)| \to 0 \quad (h \to 0),$$

gleichmäßig auf dem gesamten Intervall. Im Gegensatz hierzu erhalten wir für $n \to \infty$ also für größer werdenden Polynomgrad keine gleichmäßige Konvergenz!

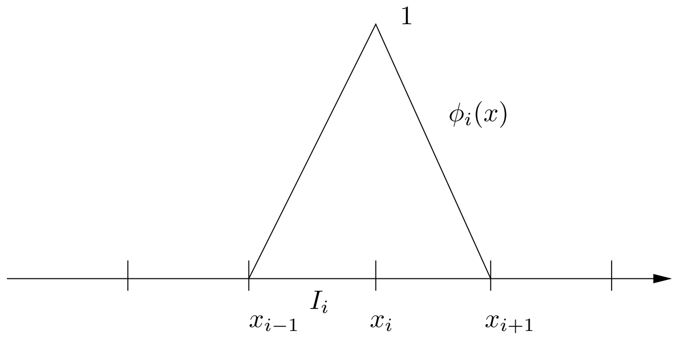


Abbildung 9.4.: Lineare Knotenbasisfunktion - auch Hutfunktion genannt.

Die Interpolierende des vorangegangenen Beispiels wird mit Hilfe der sogenannten Knotenbasis von $S_h^{1,0}([a, b])$ konstruiert. Diese Knotenbasis besteht aus den *Hutfunktionen* $\phi_i \in S_h^{1,0}[a, b], i = 0, \dots, n$, die durch die Bedingung

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij}$$

eindeutig bestimmt sind. Die Interpolierende p von f erlaubt dann die Darstellung in Form von

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\phi_i(x).$$

Diese Konstruktion stellt die Analogie zur Lagrangeschen Darstellung des Lagrange-Interpolationspolynoms her. Im Gegensatz zu dieser *globalen* Sichtweise arbeiten wir aber bei den Splines *lokal*, da die Hutfunktionen ϕ_i nur in den direkt an der jeweiligen Stützstelle x_i angrenzenden Teilintervallen von Null verschieden ist (siehe Abbildung 9.4).

Die Konstruktion von linearen Splines mit höheren globalen Glattheitseigenschaften ist nicht ohne weiteres möglich. Erhöht man jedoch den lokalen Polynomgrad auf jedem Teilintervall, so kann mit Hilfe der Interpolationsbedingungen höhere Glattheit erzielt werden. Dies führt auf die kubischen Splines, d.h. $k = 3$.

Beispiel 9.18 (Stückweise kubische Interpolation)**.** *Es sei auf jedem Teilintervall I_i ein kubisches Polynom vorgeschrieben, d.h. $k = 3$ mit $r = 0$, so dass $S_h^{3,0}[a, b]$. Die Interpolationsbedingungen für den Fall $r = 0$ (d.h. globale Stetigkeit) lauten*

$$p(x_i) = f(x_i).$$

Zur eindeutigen Bestimmung eines kubischen Polynoms sind in jedem I_i vier Bedingungen notwendig, so dass zwei zusätzliche Interpolationspunkte vorgegeben werden:

$$p(x_{ij}) = f(x_{ij}),$$

wobei $x_{ij} \in I_i$, $i = 1, \ldots,$ $j = 1, 2$. Durch diese stückweise kubische Lagrange-Interpolation ist eindeutig eine global stetige Funktion $p \in S_h^{3,0}[a, b]$ festgelegt.

Anstatt die Interpolationsbedingung durch Zwischenwerte $x_{ij} \in (x_{i-1}, x_i)$ anzureichern ist es auch möglich Ableitungswerte vorzugeben:

Beispiel 9.19 (Stückweise kubische Hermite-Interpolation)**.** *Es sei wiederum auf jedem Teilintervall I_i ein kubisches Polynom vorgeschrieben, d.h. $k = 3$ und dieses Mal mit $r = 1$, so dass $S_h^{3,1}[a, b]$. Die Interpolationsbedingungen für den Fall $r = 1$ (d.h. globale Stetigkeit und einmalige globale Differenzierbarkeit) lauten*

$$p(x_i) = f(x_i), \quad p'(x_i) = f'(x_i)$$

Durch diese vier Bedingungen $p \in S_h^{3,1}[a, b]$ eindeutig festgelegt.

Satz 9.20 (Stückweise kubische Interpolation)**.** *Für die stückweise kubische Interpolation p (d.h. $k = 3$) mit $r = 0$ oder $r = 1$ zur Approximation der Funktion f gilt die globale Fehlerabschätzung*

$$\max_{x \in [a,b]} |f(x) - p(x)| \leq \frac{1}{4!} h^4 \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Beweis: Auf jedem Intervall $I_i = [x_{i-1}, x_i]$ mit $h_i = x_i - x_{i-1}$ kann die Abschätzung für die Lagrange- oder Hermite-Interpolation angewendet werden:

$$f(x) - p(x)\Big|_{I_i} \leq \frac{\max_{I_i} f^{(iv)}}{4!} h_i^4.$$

□

Zur eindeutigen Bestimmung einer stückweise kubischen Funktion sind auf jedem Intervall I_i vier Bedingungen erforderlich. Dennoch unterscheiden sich die Sätze an Bedingungen in den beiden betrachteten Beispielen. Bei der stückweise kubischen Lagrange Interpolation in Beispiel 9.18 werden in den n Intervallen jeweils vier Bedingungen $p(x_{ij}) = f(x_{ij})$ gestellt, wobei an den Intervallenden x_i die gleiche Interpolationsbedingung doppelt auftaucht. Insgesamt ist die stückweise kubische Lagrange Interpolation durch $3n + 1$ Bedingungen gegeben. Die stückweise Hermite Interpolation in Beispiel 9.19 hat auch vier Bedingungen pro Intervall. An den Intervallenden treten nun jedoch 2 Bedingungen doppelt auf, so dass sich global $2n + 2$ Bedingungen ergeben.

Soll die globale Regularität der Interpolation weiter gesteigert werden, so schlägt der triviale Ansatz zusätzlich $p''(x_i) = f''(x_i)$ zu fordern fehl, da dies zu sechs Bedingungen pro Teilintervall führen würde (bei nur vier Unbekannten eines kubischen Polynoms). Anstatt Funktionswerte für Ableitung und zweite Ableitung in jeder Stützstelle x_k vorzuschreiben fordern wir lediglich die Stetigkeit der Ableitungen:

$$\lim_{h\downarrow 0} s'(x_k + h) = \lim_{h\downarrow 0} s'(x_k - h), \quad \lim_{h\downarrow 0} s''(x_k + h) = \lim_{h\downarrow 0} s''(x_k - h).$$

Wir zählen die Bedingungen und Unbekannten. Der Raum $S_h^{(3,2)}$ hat auf jedem der n Intervalle I_i für $i = 1, \dots, n$ vier unbekannte Parameter

$$s(x)\big|_{I_i} = \alpha_0^{(i)} + \alpha_1^{(i)} x + \alpha_2^{(i)} x^2 + \alpha_3^{(i)} x^3.$$

Die Interpolationsbedingung $s(x_k) = y_k$ stellt insgesamt $n + 1$ Bedingungen. Durch die geforderte globale Stetigkeit von Funktionswert, Ableitung und zweiter Ableitung kommen auf jedem der $n - 1$ Intervallübergänge weitere drei Bedingungen hinzu. So stehen den $4n$ unbekannten Parametern $4n - 2$ Bedingungen gegenüber. Das Problem wird geschlossen durch die Vorgabe von weiteren Randbedingungen in den Punkten a und b. Durch Vorgabe von

$$p''(a) = p''(b) = 0,$$

wird der *natürliche kubische Spline* definiert.

Die Übersetzung von *Spline* ins Deutsche bedeutet *Straklatte* oder *Biegestab*, welches eine elastische Latte aus Holz oder Kunststoff ist, die traditionell im Schiffsbau zum Entwurf und Bau verwendet wurde. Man stelle sich einen elastischen Stab vor, welcher an gewissen Punkten festgehalten wird, dazwischen jedoch eine freie Form annehmen darf. Nach physikalischen Grundprinzipien wird diese Form die Energie des Stabes minimieren. Die Energie ist gerade durch die Krümmung des Stabes gegeben. Der natürliche Spline kann als die Energieminimierende Funktion beschrieben werden, welche global zweimal stetig differenzierbar ist und in den Stützstellen die Interpolationseigenschaft erfüllt:

$$\min_{s\in S[a,b]} E(s), \quad E(s) := \int_a^b |s''(x)|^2 \,\mathrm{d}x, \quad S := \{\phi \in S_h^{3,2},\ \phi(x_k) = y_k \text{ für } k = 0, \dots, n\}.$$

Diese Form des Splines ist die am häufigsten genutzte Spline-Interpolationsaufgabe und hat z.B. große Anwendungen in der Computergrafik.

Definition 9.21 (Kubischer Spline)**.** *Eine Funktion $s_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ wird* kubischer *Spline bzgl. Zerlegung $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ genannt, wenn gilt*

i) $s_n \in C^2[a,b]$.

ii) $s_n|_{[x_{i-1},x_i]} \in P_3, \quad i = 1, \ldots n.$

Falls zusätzlich

iii) $s_n''(a) = s_n''(b) = 0$

gilt, so heißt der Spline natürlich.

Satz 9.22 (Natürliche, kubische Splines)**.** *Es seien $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ paarweise verschiedene Stützstellen und $y_k \in \mathbb{R}$ gegeben. Der durch die Interpolationsvorschrift*

$$s_n(x_i) = y_i \in \mathbb{R}, \quad i = 0, \ldots, n, \quad s_n''(a) = y_a \in \mathbb{R}, \quad s_n''(b) = y_b \in \mathbb{R} \tag{9.8}$$

beschriebene kubische Spline existiert eindeutig.
Für jede Funktion $g \in C^2[a,b]$ mit $g(x_k) = y_k$ für $k = 0, \ldots, n$ gilt

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

Im Fall $y_k = f(x_k)$ für eine Funktion $f \in C^4[a,b]$ gilt die Fehlerabschätzung

$$\max_{a \le x \le b} |f(x) - s_n(x)| \le \frac{1}{2} h^4 \max_{a \le x \le b} |f^{(4)}(x)|.$$

Beweis: *(i) Bestimmung des Splines:* Wir zeigen, dass der Spline als Lösung eines linearen Gleichungssystems gegeben ist. Auf jedem Intervall $I_i := [x_{i-1}, x_i]$ schreiben wir

$$s(x)\Big|_{I_i} = a_0^{(i)} + a_1^{(i)}(x - x_i) + a_2^{(i)}(x - x_i)^2 + a_3^{(i)}(x - x_i)^3, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Es gilt die $4n$ Koeffizienten $a_j^{(i)}$ zu bestimmen. Der erste Koeffizient kann unmittelbar als $a_0^{(i)} = y_i$ abgelesen werden:

$$y_i = s(x_i) = a_0^{(i)}, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Es bleiben für die $3n$ unbekannten Koeffizienten die Bedingungen

$$\begin{aligned}
&s(x_{i-1}) = y_{i-1} & y_{i-1} &= a_0^{(i)} - a_1^{(i)} h_i + a_2^{(i)} h_i^2 - a_3^{(i)} h^3 & i &= 1, \ldots, n \\
&s'(x_i)\Big|_{I_i} = s'(x_i)\Big|_{I_{i+1}} & a_1^{(i)} &= a_1^{(i+1)} - 2a_2^{(i+1)} h_i + 3a_3^{(i+1)} h_i^2 & i &= 1, \ldots, n-1 \\
&s''(x_i)\Big|_{I_i} = s''(x_i)\Big|_{I_{i+1}} & 2a_2^{(i)} &= 2a_2^{(i+1)} - 6a_3^{(i+1)} h_i & i &= 1, \ldots, n-1 \\
&a''(x_0) = 0 & 0 &= a_2^{(1)} - 2a_3^{(1)} h_1 & i &= 0 \\
&a''(x_n) = 0 & 0 &= a_2^{(n)} & i &= n,
\end{aligned}$$

d.h. $n + 2(n-1) + 2 = 3n$ Gleichungen. Bei entsprechender Nummerierung kann das LGS als Bandmatrix mit Bandbreite 3 geschrieben werden. Zur effizienten Bestimmung des Splines kann das Gleichungssystem unter Reformulierung der Bedingungen weiter reduziert werden, so sich ein Tridiagonalsystem ergibt.

(ii) Existenz und Eindeutigkeit: Da der Spline als Lösung eines LGS bestimmt ist, genügt es die Eindeutigkeit zu zeigen. Wir betrachten hierzu den Raum

$$N := \{\phi \in C^2[a,b],\ \phi(x_i) = 0,\ i = 0,\dots,n\}.$$

Auf diesem Raum ist durch

$$(u,v)_N := \int_a^b u''(x)v''(x)\,\mathrm{d}x,$$

ein Skalarprodukt gegeben. Linearität, Symmetrie und Dreiecksungleichung sind klar. Die Homogenität folgt, da aus $(v,v)_N = 0$ sofort punktweise $v'' = 0$ folgt. D.h. v ist eine lineare Funktion. Aus $v(a) = v(b) = 0$ folgt dann $v = 0$.

Es seien jetzt s_1, s_2 zwei Splines zu den Stützstellen und Werten $\{(x_i, y_i),\ i = 0,\dots,n\}$. Dann ist $s = s_1 - s_2 \in N$ und es gilt für $w \in N$ mit partieller Integration (beachte, dass $s \in C^\infty(I_i)$, da Polynom):

$$\begin{aligned}
(s,w)_N &= \int_a^b s''w''\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^N \left\{ s''w'\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} - \int_{I_i} s'''(x)w'(x)\,\mathrm{d}x \right\} \\
&= \sum_{i=1}^N \left\{ s''w'\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} - s''' \underbrace{w}_{=0}\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} + \int_{I_i} \underbrace{s^{(iv)}(x)}_{=0} w(x)\,\mathrm{d}x \right\} \\
&= \sum_{i=1}^n \left\{ s''(x_i)w'(x_i) - s''(x_{i-1})w'(x_{i-1}) \right\} \\
&= s''(b)w'(b) - s''(a)w'(a) = 0,
\end{aligned} \tag{9.9}$$

da $s''(a) = s_1''(a) - s_2''(a) = 0$ und ebenso an b. Hieraus folgt

$$(s,s)_N = 0 \quad \Rightarrow \quad s'' = 0 \quad \Rightarrow \quad s = 0,$$

und also die Eindeutigkeit $s_1 = s_2$ und somit auch die Existenz einer Lösung.

(iii) Energieminimierung: Der Zusammenhang

$$(s,w)_N = 0,$$

gilt nicht nur für $s \in N$, sondern für alle Splines, welche die beschreibende Bedingung (9.8) erfüllen. Man vergleiche hierzu die Argumente in (9.9). D.h., der Raum N steht orthogonal auf dem spline s. Es sei nun $f \in C^2[a,b]$ mit $y_i = f(x_i)$ für $i = 0,\dots,n$. Dann gilt $w := s - f \in N$ und also

$$0 = (s, s-f)_N = (s,s)_N - (s,f)_N,$$

also

$$\int_a^b s''(x)^2\,\mathrm{d}x = \int_a^b s''(x)f''(x)\,\mathrm{d}x \le \left(\int_a^b s''(x)^2\,\mathrm{d}x\right)\left(\int_a^b f''(x)^2\,\mathrm{d}x\right),$$

woraus die Energieminimierung folgt.

(iv) Fehlerabschätzung: Der Nachweis der Fehlerabschätzung ist aufwändig und wir verweisen für den Beweis auf die Literatur [14]. □

Die Minimierung der zweiten Ableitung lässt sich einerseits als physikalisches Prinzip verwenden. Für die Numerik ist jedoch relevant, dass durch die Minimierung der zweiten Ableitungen auch Oszillationen unterbunden werden. Der natürliche Spline hat sehr gute Stabilitätseigenschaften. Zur Berechnung des Splines ist ein lineares Gleichungssystem zu lösen. die Gleichungen sind im Beweis zu Satz 9.22 angegeben. Dabei können die Werte $a_0^{(i)} = y_i$ sofort angegeben werden. Weiter können in einem Vorbereitungsschritt die Unbekannten $a_1^{(i)}$ sowie $a_3^{(i)}$ durch die $a_2^{(i)}$ ausgedrückt werden. Somit bleibt ein lineares Gleichungssystem in den n Unbekannten $a_2^{(1)}, \dots, a_2^{(n)}$. Die Matrix hat dabei eine Tridiagonalgestalt und kann sehr effizient gelöst werden.

9.3. Numerische Differentiation

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit einer einfachen numerischen Aufgabe: zu einer gegebenen Funktion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ soll in einem Punkt $x_0 \in (a,b)$ die Ableitung $f'(x_0)$ oder die n-te Ableitung $f^{(n)}(x_0)$ berechnet werden. Wir gehen davon aus, dass es mit vertretbarem Aufwand nicht möglich ist, die Funktion $f(x)$ symbolisch zu Differenzieren und die Ableitung an der Stelle x_0 auszuwerten. Wir benötigen also Approximationsverfahren zur Bestimmung der Ableitung. Die grundlegende Idee wird durch das folgende Verfahren beschrieben:

Verfahren 9.23 (Numerische Differentiation)**.** *Die Funktion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ wird durch ein Polynom $p(x)$ interpoliert. Die n-te Ableitung $f^{(n)}(x_0)$ wird durch die n-te Ableitung des Polynoms $p^{(n)}(x_0)$ approximiert.*

Im Folgenden entwickeln wir einige einfache Verfahren zur Approximation von Ableitungen, welche auf der Interpolation beruhen.

Lineare Interpolation Wir interpolieren eine Funktion $f(x)$ linear in den beiden Stützstellen x_0 und x_1.

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1),$$

und Approximieren die Ableitung $f'(x)$ durch die entsprechende Ableitung des Polynoms

$$p_1'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Für das lineare Interpolationspolynom ist die Ableitung eine Konstante Funktion. Wir erhalten somit für alle Werte x die gleiche Approximation an die Ableitung. Es gilt:

Satz 9.24 (Differenzenquotient der ersten Ableitung)**.** *Es sei* $f \in C^2[a,b]$. *Für beliebige Punkte* $x_0, x_1 \in [a,b]$ *mit* $h := x_1 - x_0 > 0$ *gelten die* einseitigen Differenzenquotienten

$$\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} = f'(x_0)+\frac{1}{2}hf''(x_0)+O(h^2), \qquad \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} = f'(x_1)-\frac{1}{2}hf''(x_0)+O(h^2).$$

Im Fall $f \in C^4[a,b]$ *gilt für* $x_0, x_0-h, x_0+h \in [a,b]$ *für den* zentralen Differenzenquotient

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = f'(x_0) + \frac{1}{4}h^2 f^{(iv)}(x_0) + O(h^3).$$

Beweis: *(i)* Mit Taylor-Entwicklung gilt

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) \pm \frac{1}{6}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{24}h^4 f^{(iv)}(\xi) \quad \xi \in [a,b].$$

Hieraus folgt z.B. für den rechtsseitigen Differenzenquotienten

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = \frac{hf'(x_0)+\frac{1}{2}h^2 f''(x_0)+O(h^3)}{h} = f'(x_0) + \frac{1}{2}hf''(x_0) + O(h^2).$$

Für den rechtsseitigen Differenzenquotienten folgt das Ergebnis entsprechend.

(ii) Für den zentralen Differenzenquotienten heben sich in der Taylor-Entwicklung alle geraden Potenzen von h aus Symmetriegründen auf:

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2f'(x_0) + \frac{1}{3}h^3 f'''(x_0) + O(h^4).$$

Hieraus folgt das gewünschte Ergebnis. □

Bei der Berechnung der Approximation der Ableitung mit Hilfe der Polynominterpolation kommt es somit auf die Auswertungsstelle an. Numerische Verfahren, welche in einzelnen Punkten - oder in speziellen Situationen - besser konvergieren als im allgemeinen Fall werden *superkonvergent* genannt. Bei der Berechnung des Zentralen Differenzenquotienten liegt ein superkonvergentes Verhalten vor. Es kommt hier entscheidend auf die Symmetrie an. Angenommen, die Ableitung in x_0 wird durch die lineare Interpolation zwischen $x_0 - h$ und $x_0 + 2h$ approximiert, so gilt mit Taylor-Entwicklung um x_0:

$$\begin{aligned}&\frac{f(x_0+2h)-f(x_0-h)}{3h} \\ &\quad = f'(x_0) + \left(2hf''(x_0) + \frac{8}{6}h^2 f'''(x_0)\right) - \left(\frac{1}{2}hf''(x_0) - \frac{1}{6}h^2 f'''(x_0)\right) + O(h^3) \\ &\qquad\qquad f'(x_0) + \frac{3}{2}hf''(x_0) + O(h^2).\end{aligned}$$

Terme höherer Ordnung in h heben sich nicht gegenseitig auf und der zentrale aber unsymmetrische Differenzenquotient (welcher ja auch nicht mehr zentral ist) konvergiert nur von erster Ordnung.

Quadratische Interpolation Wir interpolieren $f(x)$ mit Hilfe der drei Stützstellen x_0-h, x_0, x_0+h durch ein quadratisches Polynom:

$$\begin{aligned} p_2(x) = f(x_0-h)&\frac{(x_0-x)(x_0+h-x)}{2h^2} \\ &+ f(x_0)\frac{(x-x_0+h)(x_0+h-x)}{h^2} + f(x_0+h)\frac{(x-x_0+h)(x-x_0)}{2h^2}. \end{aligned}$$

In $x=x_0$ gilt für erste und zweite Ableitungen:

$$p_2'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}, \quad p_2''(x_0) = \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}.$$

Für die erste Ableitung ergibt sich erstaunlicherweise wieder der zentrale Differenzenquotient, der schon durch lineare Interpolation hergeleitet wurde. Die Ordnung muss also wirklich von Fall zu Fall nachgewiesen werden. Der einfache Schluss, dass bei symmetrischen zentralen Differenzenquotienten immer Superkonvergenz vorliegt ist falsch!. Mit Hilfe der linearen Interpolierenden wird ein Ergebnis erreicht, das eigentlich erst bei quadratischer Interpolierender zu erwarten wäre. Dieses bessere Ergebnis wird jedoch nur bei Abgreifen der Ableitung im Mittelpunkt erreicht.

Für die zweite Ableitung erhalten wir mit Taylorentwicklung:

$$p_2''(x_0) = \frac{-2f(x_0)+f(x_0-h)+f(x_0+h)}{h^2} = f''(x_0) + \frac{1}{12}h^2 f^{(iv)}(x_0) + O(h^4)$$

den zentralen Differenzenquotient für die zweite Ableitung.

Wir können auf der Basis von p_2 auch einen einseitigen Differenzenquotienten für die zweite Ableitung herleiten. Dies erfolgt durch Approximation von $f''(x_0-h) \approx p_2''(x_0-h)$. Wieder mit Taylorentwicklung erhalten wir

$$p''(x_0-h) = f''(x_0-h) + hf'''(x_0-h) + O(h^2)$$

lediglich eine Approximation erster Ordnung. Neben der Ordnung des Interpolationspolynoms $p(x)$ kommt es entscheidend auf die entsprechende Wahl der Stützstellen an.

Wir betrachten ein Beispiel:

Beispiel 9.25. *Es sei*

$$f(x) = \tanh(x).$$

Wir suchen eine Approximation von

$$f'\left(\frac{1}{2}\right) \approx 0.7864477329659274, \quad f''\left(\frac{1}{2}\right) \approx -0.7268619813835874.$$

Zur Approximation verwenden wir für die vier bisher diskutieren Differenzenquotienten zu verschiedenen Schrittweiten $h>0$, siehe Tabelle 9.1.

In Abbildung 9.5 tragen wir die Fehler der Approximationen gegenüber der Schrittweite auf. Hier ist deutlich der Unterschied zwischen linearer und quadratischer Ordnung in h zu erkennen.

h	$\frac{f(\frac12+h)-f(\frac12)}{h}$	$\frac{f(\frac12+h)-f(\frac12-h)}{2h}$	$\frac{f(\frac12+2h)-f(\frac12+h)+f(\frac12)}{h^2}$	$\frac{f(\frac12+h)-2f(\frac12)+f(\frac12-h)}{h^2}$
$\frac12$	**0.**598954	**0.7**61594	−**0.**623692	−**0.**650561
$\frac14$	**0.**692127	**0.78**0461	−**0.7**45385	−**0.7**06667
$\frac18$	**0.7**39861	**0.78**4969	−**0.7**63733	−**0.72**1740
$\frac1{16}$	**0.7**63405	**0.786**079	−**0.7**53425	−**0.72**5577
$\frac1{32}$	**0.7**75004	**0.786**356	−**0.7**42301	−**0.726**540
$\frac1{64}$	**0.78**0747	**0.7864**25	−**0.7**35134	−**0.726**782
Exakt	0.786448	0.786448	−0.726862	−0.726862

Tabelle 9.1.: Differenzenapproximation von $f'(1/2)$ (zwei Tabellen links) und $f''(1/2)$ (rechts) der Funktion $f(x) = \tanh(x)$. Dabei ist jeweils der einseitige bzw. der zentrale Differenzenquotient genutzt worden.

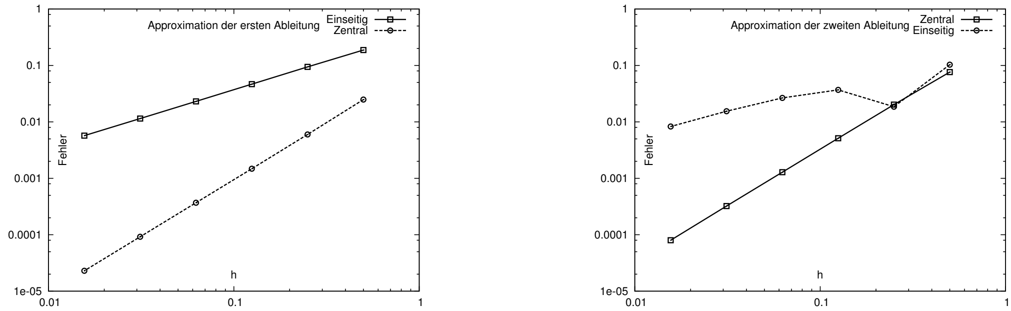


Abbildung 9.5.: Fehler bei der Differenzenapproximation der ersten (links) und zweiten (rechts) Ableitung von $f(x) = \tanh(x)$ im Punkt $x_0 = \frac{1}{2}$.

Stabilität

Abschließend untersuchen wir die Stabilität der Differenzenapproximation. Die Koeffizienten der verschiedenen Formeln wechseln das Vorzeichen, somit besteht die Gefahr der Auslöschung. Exemplarisch führen wir die Stabilitätsanalyse für die zentralen Differenzenapproximation zur Bestimmung der ersten Ableitung durch. Wir gehen davon aus, dass die Funktionswerte an den beiden Stützstellen nur fehlerhaft (mit relativem Fehler $|\epsilon| \le eps$) ausgewertet werden können und erhalten:

$$
\begin{aligned}
\tilde p'(x_0) &= \frac{f(x_0+h)(1+\epsilon_1) - f(x_0-h)(1+\epsilon_2)}{2h}(1+\epsilon_3) \\
&= \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}(1+\epsilon_3) + \frac{\epsilon_1 f(x_0+h) - \epsilon_2 f(x_0-h)}{2h} + O(eps^2).
\end{aligned}
$$

Für den relativen Fehler gilt

$$
\left|\frac{\tilde p'(x_0) - p'(x_0)}{p'(x_0)}\right| \le eps + \frac{|f(x_0+h)| + |f(x_0-h)|}{|f(x_0+h) - f(x_0-h)|} eps + O(eps^2).
$$

Im Fall $f(x_0+h) \approx f(x_0-h)$ also $f'(x_0) \approx 0$ kann der Fehler beliebig stark verstärkt werden. Je kleiner h gewählt wird, umso größer wird dieser Effekt, denn:

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2hf'(x_0) + O(h^2).$$

Dieses Ergebnis ist gegenläufig zur Fehlerabschätzung für den Differenzenquotienten in Satz 9.24. Bei der numerischen Approximation müssen beide Fehleranteile addiert werden:

$$\begin{aligned}
\frac{|f'(x_0) - \tilde{p}'(x_0)|}{|f'(x_0)|} &\le \frac{|f'(x_0) - p'(x_0)|}{|f'(x_0)|} + \frac{|p'(x_0) - \tilde{p}'(x_0)|}{|f'(x_0)|} \\
&= \frac{|f'(x_0) - p'(x_0)|}{|f'(x_0)|} + \frac{|p'(x_0) - \tilde{p}'(x_0)|}{|p'(x_0)|} \cdot \frac{|p'(x_0)|}{|f'(x_0)|} \\
&\le \frac{1}{3}h^2 + O(h^4) + \frac{\max_\xi |f(\xi)|}{|f'(x_0)|h} eps + O(eps^2).
\end{aligned}$$

Für kleines h steigt der Rundungsfehleranteil. Der Gesamtfehler wird minimal, falls beide Fehleranteile balanciert sind, also im Fall:

$$h^2 \approx \frac{eps}{h} \quad \Rightarrow \quad h \approx \sqrt[3]{eps}.$$

Für $eps \approx 10^{-16}$ sind Schrittweiten $h < 10^{-5}$ demnach nicht sinnvoll.

9.4. Richardson Extrapolation zum Limes

Eine wichtige Anwendung der Interpolation ist die *Extrapolation zum Limes*. Die Idee lässt sich am einfachsten anhand eines Beispiels erklären. Wir wollen die Ableitung $f'(x_0)$ einer Funktion f im Punkt x_0 mit Hilfe des einseitigen Differenzenquotienten berechnen:

$$a(h) := \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}.$$

Der Schrittweitenparameter h bestimmt die Qualität der Approximation $a(h) \approx f'(x_0)$. Für $h \to 0$ gilt (bei Vernachlässigung von Rundungsfehlern) $a(h) \to f'(x_0)$. An der Stelle $h = 0$ lässt sich $a(h)$ jedoch nicht auswerten. Die Idee die Extrapolation zum Limes ist es nun, ein Interpolationspolynom $p(x)$ durch die Stützstellenpaare $(h_i, a(h_i))$ für eine Folge von Schrittweiten $h_0, h_1, \dots, h_n$ zu legen und den Wert $p(0)$ als Approximation für $a(0)$ zu verwenden.

Es stellt sich die grundlegende Frage, ob die Interpolierende in den Stützstellen $h_0, \dots, h_n$ auch Aussagekraft außerhalb des Intervalls $I := [\min_i\{h_i\}, \max_i\{h_i\}]$ hat. Beispiel 9.15 lässt dies zunächst nicht vermuten. Hier war die Approximationseigenschaft durch Oszillationen in Punkten zwischen den Stützstellen schon am Rande des Intervalls I stark gestört. Wir betrachten dennoch ein einfaches Beispiel:

Beispiel 9.26 (Extrapolation des einseitigen Differenzenquotienten)**.** *Es sei* $f(x) = \tanh(x)$ *und wir wollen die Ableitung an der Stelle* $x_0 = 1/2$ *auswerten. Der exakte Wert ist* $f'(1/2) \approx 0.786448$*. Hierzu definieren wir den Differenzenquotienten*

$$a(h) = \frac{\tanh(x+h) - \tanh(x)}{h},$$

und werten zu den Schrittweiten $h = 2^{-1}, 2^{-2}, 2^{-3}, 2^{-4}$ *aus:*

h	$a(h)$
2^{-1}	*0.5989*
2^{-2}	*0.6921*
2^{-3}	*0.7399*
2^{-4}	*0.7634*

Formal können wir nun ein Interpolationspolynom $p(h)$ *durch die Punkte* $h_i = 2^{-i}$ *und* $a_i = a(h_i)$ *legen und dieses an der Stelle* $h = 0$ *auswerten. Dies geschieht effizient mit dem Neville-Schema zum Punkt* $h = 0$*, den wir noch einmal kurz angeben:*

$$\begin{aligned} a_{k,k} &= a_i && i = 1, \dots, n, \\ a_{k,k+l} &= a_{k,k+l-1} - h_k \frac{a_{k+1,k+l} - a_{k,k+l-1}}{h_{k+l} - h_k} && l = 1, \dots, n-1,\ k = 1, \dots, n-l \end{aligned}$$

h_i	$a_i = p_{ii}$	$p_{i,i+1}$	$p_{i,i+2}$	$p_{i,i+3}$
2^{-1}	0.5989	$\underline{0.78}53$	$\underline{0.78}836$	$\underline{0.786}5$
2^{-2}	0.6921	$\underline{0.7}976$	$\underline{0.786}73$	
2^{-3}	$\underline{0.7}399$	$\underline{0.786}9$		
2^{-4}	$\underline{0.7}634$			

Die jeweils exakten Stellen sind unterstrichen. Durch Extrapolation kann die Genauigkeit also wirklich verbessert werden.

Wir wollen dieses Beispiel nun für den einfachsten Fall, einer linearen Interpolation untersuchen. Zu $f \in C^3([a,b])$ sei

$$a(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + \frac{h}{2} f''(x_0) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi_{x_0,h}), \tag{9.10}$$

die einseitige Approximation der ersten Ableitung. Wir legen durch die Stützstellen $(h, a(h))$ sowie $(h/2, a(h/2))$ das lineare Interpolationspolynom,

$$p(t) = \left(\frac{t - \frac{h}{2}}{h - \frac{h}{2}} \right) a(h) + \left(\frac{t - h}{\frac{h}{2} - h} \right) a\left(\frac{h}{2}\right),$$

und werten dieses an der Stelle $t = 0$ als Approximation von $a(0)$ aus:

$$a(0) \approx p(0) = 2a\left(\frac{h}{2}\right) - a(h).$$

Für $a(h/2)$ sowie $a(h)$ setzen wir die Taylor-Entwicklung (9.10) ein und erhalten mit

$$\begin{aligned} p(0) &= 2\left(f'(x_0) + \frac{h}{4}f''(x_0) + \frac{h^2}{24}f'''(\xi_{x_0,h/2})\right) - \left(f'(x_0) + \frac{h}{2}f''(x_0) + \frac{h^2}{6}f'''(\xi_{x_0,h})\right) \\ &= f'(x_0) + O(h^2), \end{aligned}$$

eine Approximation der ersten Ableitung von zweiter Ordnung in der Schrittweite h.

Durch Extrapolation können Verfahren höherer Ordnung generiert werden. Eine solche Vorgehensweise, bei der Ergebnisse eines numerischen Verfahrens weiter verarbeitet werden, wird *Postprocessing* genannt.

Satz 9.27 (Einfache Extrapolation)**.** *Es sei $a(h) : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ eine $n+1$ mal stetig differenzierbare Funktion mit der Summenentwicklung*

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j h^j + a_{n+1}(h)h^{n+1},$$

mit Koeffizienten $a_j \in \mathbb{R}$ sowie $a_{n+1}(h) = a_{n+1} + o(1)$. Weiter sei $(h_k)_{k=0,1,\ldots}$ mit $h_k \in \mathbb{R}_+$ eine monoton fallende Schrittweitenfolge mit der Eigenschaft

$$0 < \frac{h_{k+1}}{h_k} \le \rho < 1. \tag{9.11}$$

Es sei $p_n^{(k)} \in P_n$ das Interpolationspolynom zu $(h_k, a(h_k)), \ldots, (h_{k+n}, a(h_{k+n}))$. Dann gilt:

$$a(0) - p_n^{(k)}(0) = O(h_k^{n+1}) \quad (k \to \infty).$$

Beweis: In Lagrangescher Darstellung gilt

$$p_n^{(k)}(t) = \sum_{i=0}^{n} a(h_{k+i}) L_{k+i}^{(n)}(t), \quad L_{k+i}^{(n)} = \prod_{l=0, l\neq i}^{n} \frac{t - h_{k+l}}{h_{k+i} - h_{k+l}}. \tag{9.12}$$

Wir setzen die Entwicklung von $a(h)$ in die Polynomdarstellung (9.12) ein und erhalten für $t = 0$:

$$p_n^{(k)}(0) = \sum_{i=0}^{n} \left\{ a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j h_{k+i}^j + a_{n+1}(h_{k+i}) h_{k+i}^{n+1} \right\} L_{k+i}^{(n)}(0).$$

Für die Lagrangeschen Basispolynome gilt die Beziehung:

$$\sum_{i=0}^{n} h_{k+i}^r L_{k+i}^{(n)}(0) = \begin{cases} 1 & r = 0, \\ 0 & r = 1, \ldots, n, \\ (-1)^n \prod_{i=0}^{n} h_{k+i} & r = n+1. \end{cases} \tag{9.13}$$

Der Nachweis erfolgt durch Analyse der Lagrangeschen Interpolation von t^r für verschiedene Exponenten r. Mit (9.13) und $a_{n+1}(h_{k+i}) = a_{n+1} + o(h_{k+i})$ folgt:

$$p_n^{(k)}(0) = a_0 + a_{n+1}(-1)^n \prod_{i=0}^{n} h_{i+k} + \sum_{i=0}^{n} o(1) h_{k+i}^{n+1} L_{k+i}^{(n)}(0).$$

Mit der Schrittweitenbedingung (9.11) $h_{k+i} \leq \rho^i h_k$ gilt für die Lagrangeschen Basispolynome in $t = 0$:

$$|L_{k+i}^{(n)}(0)| = \prod_{l=0, l\neq i}^{n} \left| \frac{1}{\frac{h_{k+i}}{h_{k+l}} - 1} \right| \leq \prod_{l=0, l\neq i}^{n} \left| \frac{1}{\rho^{i-l} - 1} \right| = c(\rho, n). \tag{9.14}$$

Insgesamt folgt mit $h_{k+i} \leq h_k$

$$p_n^{(k)} = a(0) + (-1)^n a_{n+1} h_k^{n+1} + o(h_k^{n+1}).$$

□

Die Schrittweitenbedingung ist notwendig zum Abschätzen von $|L_{k+i}^{(n)}| = O(1)$ und verhindert das starke Oszillieren der Basisfunktionen bei $t = 0$ wie in Beispiel 9.15 beobachtet. Eine zulässige Schrittweitenfolgen zur Extrapolation ist $h_i = \frac{h_0}{2^i}$. Die einfache Wahl $h_i = h_0/i$ hingegen ist nicht zulässig, da hier $h_{k+1}/h_k \to 1$ gilt und eine Abschätzung in Schritt (9.14) nicht mehr gleichmäßig in k möglich ist.

Um die Extrapolationsvorschrift auf ein gegebenes Verfahren anzuwenden, werden die Approximationen $p_n^{(k)}(0)$ mit Hilfe des Neville-Schemas aus Algorithmus 9.9 berechnet. Wir führen hierzu Beispiel 9.26 fort:

Beispiel 9.28 (Extrapolation des zentralen Differenzenquotienten)**.** *Wir approximieren wieder die Ableitung von* $f(x) = \tanh(x)$ *an der Stelle* $x_0 = 0.5$ *und berechnen die Approximationen nun mit dem zentralen Differenzenquotienten. Exakter Wert* $\tanh'(0.5) \approx 0.78645$*:*

h	$a(h) = a_{kk}$	$a_{k,k+1}$	$a_{k,k+2}$	$a_{k,k+3}$
2^{-1}	**0.7**_616_	**0.7**_993_	**0.786**_20_	**0.78645**_93_
2^{-2}	**0.78**_05_	**0.78**_95_	**0.7864**_3_	
2^{-3}	**0.78**_50_	**0.78**_72_		
2^{-4}	**0.786**_1_			

Die Approximation wird wieder verbessert. Es zeigt sich jedoch, dass im ersten Schritt, d.h. für alle Werte $a_{k,k+1}$ *welche aus linearer Interpolation zweier Werte folgen keine Verbesserung erreicht werden kann.*

Im vorangegangenen Beispiel wird der zentrale Differenzenquotient extrapoliert. Für diesen gilt bei $f \in C^\infty$ die Reihenentwicklung

$$a(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{1}{2h}\left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} h^k - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} (-h)^k \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(2k+1)}(x)}{(2k+1)!} h^{2k}.$$

D.h., bei $a(h)$ liegt eine Entwicklung in graden Potenzen von h vor. Dies erklärt, warum die Interpolation mit linearen Polynomen keinen Gewinn bringt. Stattdessen werden wir nun die bekannte Potenzentwicklung von $a(h)$ ausnutzen uns suchen nach Interpolationspolynomen in h^2

$$p(h) = a_0 + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots .$$

Beispiel 9.29 (Extrapolation des zentralen Differenzenquotienten mit quadratischen Polynomen)**.** *Wir approximieren wieder die Ableitung von $f(x) = \tanh(x)$ und interpolieren die bereits berechneten Werte $(a(h_3), h_3)$ sowie $a(h_4), h_4$ mit Hilfe eines linearen Polynoms in h^2. Es gilt*

$$p(h) = a(h_3)\frac{h^2 - h_4^2}{h_3^2 - h_4^2} + a(h_4)\frac{h^2 - h_3^2}{h_4^2 - h_3^2} \quad \Rightarrow \quad p(0) = \frac{h_3^2 a(h_4) - h_4^2 a(h_3)}{h_3^2 - h_4^2}.$$

Mit den Werten aus Beispiel 9.28 folgt

$$p(0) = \underline{\mathbf{0.7864}}493,$$

d.h. nach nur einem Schritt mit richtiger Ordnung sind bereits die ersten vier Stellen exakt.

Die Richardson-Extrapolation spielt ihre Stärke erst dann voll aus, wenn die zugrundeliegende Funktion $a(h)$ eine spezielle Reihenentwicklung besitzt, welche z.B. nur gerade Potenzen von h beinhaltet. Für den zentralen Differenzenquotienten gilt bei hinreichender Regularität von f:

$$a(h) := \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = f'(x_0) + \sum_{i=1}^{n} \frac{f^{(2i+1)}(x_0)}{(2i+1)!} h^{2i} + O(h^{2n+1}).$$

Die Idee ist es nun, diese Entwicklung bei der Interpolation auszunutzen und nur Polynome in $1, h^2, h^4, \ldots$ zu berücksichtigen. Der zentrale Differenzenquotient ist kein Einzelfall. Bei der numerischen Quadratur werden wir das Romberg-Verfahren kennenlernen, welches ebenso auf der Extrapolation einer Vorschrift mit Entwicklung in h^2 beruht. Auch bei der Approximation von gewöhnlichen Differentialgleichungen lernen wir mit dem Gragg'schen Extrapolationsverfahren eine Methode kennen, die auf diesem Prinzip beruht. Daher formulieren wir ohne Beweis denn allgemeinen Satz zur Richardson-Extrapolation:

Satz 9.30 (Richardson-Extrapolation zum Limes). *Es sei* $a(h) : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ *für ein* $q > 0$ *eine* $q(n+1)$ *mal stetig differenzierbare Funktion mit der Summenentwicklung*

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j h^{qj} + a_{n+1}(h) h^{q(n+1)},$$

mit Koeffizienten $a_j \in \mathbb{R}$ *sowie* $a_{n+1}(h) = a_{n+1} + o(1)$. *Weiter sei* $(h_k)_{k=0,1,\dots}$ *eine monoton fallende Schrittweitenfolge* $h_k > 0$ *mit der Eigenschaft*

$$0 < \frac{h_{k+1}}{h_k} \le \rho < 1. \tag{9.15}$$

Es sei $p_n^{(k)} \in P_n$ *(in* h^q*) das Interpolationspolynom zu* $(h_k^q, a(h_k)), \dots, (h_{k+n}^q, a(h_{k+n}))$. *Dann gilt:*

$$a(0) - p_n^{(k)}(0) = O(h_k^{q(n+1)}) \quad (k \to \infty).$$

Beweis: Der Beweis ist eine einfache Modifikation von Satz 9.27 und kann im Wesentlichen mit Hilfe der Substitution $\tilde{h}_k = h_k^q$ übertragen werden. Für Details, siehe [10]. □

Prinzipiell erlaubt die Richardson-Extrapolation bei hinreichender Regularität eine beliebige Steigerung der Verfahrensordnung. üblicherweise werden jedoch nur einige wenige Extrapolationsschritte aus den letzten Verfahrenswerten $h_k, h_{k+1}, \dots, h_{k+n}$ verwendet. Die Extrapolation wird am einfachsten mit dem modifizierten Neville-Schema durchgeführt.

Algorithmus 9.31 (Modifiziertes Neville-Schema zur Extrapolation). *Für* $h_0, h_1, \dots, h_n$ *sei* $a(h_i)$ *bekannt. Berechne:*

```
für k = 0,...,n setze a_{k,k} := a(h_k)
für l = 1,...,n und
    für k = 0,...,n-l berechne
        a_{k,k+l} := a_{k,k+l-1} - (((h_{k+l}/h_k)^q - 1)^{-1} (a_{k+1,k+l} - a_{k,k+l-1})
```

$$a_{k,k+l} := a_{k,k+l-1} - \left(\left(\frac{h_{k+l}}{h_k}\right)^q - 1\right)^{-1} (a_{k+1,k+l} - a_{k,k+l-1})$$

Wir schließen die Richardson-Extrapolation mit einem weiteren Beispiel ab:

Beispiel 9.32 (Extrapolation des zentralen Differenzenquotienten). *Wir approximieren die Ableitung von* $f(x) = \tanh(x)$ *an der Stelle* $x = 0.5$ *mit dem zentralen Differenzenquotienten und Extrapolation. Exakter Wert ist* $\tanh'(0.5) \approx 0.7864477329$*:*

h	$a(h) = p_{kk}$	$p_{k,k+1}$	$p_{k,k+2}$	$p_{k,k+3}$
2^{-1}	**0.7**61594156	**0.786**7493883	**0.7864**537207	**0.78644774**43
2^{-2}	**0.78**0460580	**0.7864**721999	**0.786447**8377	
2^{-3}	**0.78**4969295	**0.78644**93603		
2^{-4}	**0.786**079344			

Bereits die jeweils erste Extrapolation $p_{k,k+1}$ *liefert weit bessere Ergebnisse als die Extrapolation des einseitigen Differenzenquotienten. Die beste Approximation verfügt über 8 richtige Stellen.*

Beispiel 9.33 (Extrapolation mit verschiedenen Fehlerordnungen)**.** *Wir betrachten*

$$f(x) = -e^{1-\cos(\pi x)},$$

und approximieren $f''(1) \approx 72.9270606$ *mit dem zentralen Differenzenquotienten für die zweite Ableitung*

$$a(h) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

Wir führen jeweils 2 Schritte der Extrapolation durch. Dabei wählen wir zunächst suboptimal $q = 1$

h	$a(h_k) = p_{kk}$	$a(h_k) - f'(1)$	$p_{k,k+1}$	$p_{k,k+1} - f'(1)$	$p_{k,k+2}$	$p_{k,k+2} - f'(1)$
2^{-0}	12.78	$6.01e+01$	61.95	$1.10e+01$	89.61812	$1.67e+01$
2^{-1}	37.37	$3.56e+01$	82.70	$9.78e+00$	77.24775	$4.32e+00$
2^{-2}	60.03	$1.29e+01$	78.61	$5.68e+00$	73.36353	$4.36e-01$
2^{-3}	69.32	$3.60e+00$	74.68	$1.75e+00$	**72.9**5825	$3.12e-02$
2^{-4}	**72**.00	$9.28e-01$	73.39	$4.61e-01$	**72.92**908	$2.02e-03$
2^{-5}	**72**.69	$2.34e-01$	73.04	$1.17e-01$	**72.927**19	$1.27e-04$
2^{-6}	**72**.87	$5.85e-02$	**72.9**6	$2.93e-02$		
2^{-7}	**72.9**1	$1.46e-02$				
Ordnung		$O(h^2)$		$O(h^2)$		$O(h^4)$

Ein Schritt der Extrapolation bringt keinen Vorteil. Dies erklärt sich dadurch, dass sich die rein quadratische Fehlerentwicklung des Differenzenquotienten durch ein lineares Polynom nicht approximieren lässt. Wir wiederholen die Rechnung und wählen nun - dem Differenzenquotienten angepasst - die Extrapolationsordnung $q = 2$*:*

h	$a(h_k) = p_{kk}$	$a(h_k) - f'(1)$	$p_{k,k+1}$	$p_{k,k+1} - f'(1)$	$p_{k,k+2}$	$p_{k,k+2} - f'(1)$
2^{-0}	12.78	$6.01e+01$	45.56222	$2.74e+01$	69.0586998	$3.87e+00$
2^{-1}	37.37	$3.56e+01$	67.59017	$5.34e+00$	**72**.7408810	$1.86e-01$
2^{-2}	60.03	$1.29e+01$	**72**.41896	$5.08e-01$	**72.92**27341	$4.33e-03$
2^{-3}	69.32	$3.60e+00$	**72**.89125	$3.58e-02$	**72.92**69850	$7.56e-05$
2^{-4}	**72**.00	$9.28e-01$	**72.92**475	$2.31e-03$	**72.9270**594	$1.22e-06$
2^{-5}	**72**.69	$2.34e-01$	**72.92**692	$1.45e-04$	**72.9270606**	$1.91e-08$
2^{-6}	**72**.87	$5.85e-02$	**72.9270**5	$9.11e-06$		
2^{-7}	**72.9**1	$1.46e-02$				
Ordnung		$O(h^2)$		$O(h^4)$		$O(h^6)$

Hier erhalten wir durch Extrapolation den entsprechenden Ordnungsgewinn.

9.5. Numerische Quadratur

Die numerische Approximation von Integralen, Quadratur genannt, ist aus verschiedenen Gründen notwendig:

- Die Stammfunktion eines Integrals lässt sich nicht durch eine elementare Funktion ausdrücken, etwa bei

$$\int_0^\infty \exp(-x^2)\,\mathrm{d}x, \qquad \int_0^\infty \frac{\sin(x)}{x}\,\mathrm{d}x.$$

- Eine Stammfunktion existiert in geschlossener Form, aber die Berechnung ist aufwendig, so dass numerische Methoden vorzuziehen sind.

- Der Integrand ist nur an diskreten Stellen bekannt; beispielsweise bei Messreihendaten.

Bei der numerischen Integration basieren die Methoden auf den bereits kennengelernten Interpolatonsmethoden. Sie sind somit eine klassische Anwendung der der Polynom-Interpolation sowie Spline-Interpolation. Erstere führen auf die sogenannten *interpolatorischen Quadraturformeln* während die Spline-Interpolation auf die *stückweise interpolatorische Quadraturformeln* (die in der Literatur auch häufig unter dem Namen der zusammengesetzten oder summierten Quadratur zu finden ist).

Bei der interpolatorischen Quadratur einer Funktion $f(x)$ auf dem Intervall $[a,b]$ wird zunächst eine Interpolationspolynom zu gegebenen Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n$ kreiert, welches dann integriert wird (basiert dementsprechend auf Abschnitt 9.1). Bei der Gauß Quadratur wird die Position der Stützstellen $x_i \in [a,b]$ im Intervall so bestimmt, dass die resultierende Integrationsformel eine *optimale* Ordnung erzielt. Zuletzt betrachten wir als Anwendung der Extrapolation zum Limes (Abschnitt 9.4), das sogenannte Romberg'sche Integrationsverfahren in Abschnitt 9.5.3.

Definition 9.34 (Quadraturformel)**.** *Es sei $f \in C[a,b]$. Unter einer* numerischen Quadraturformel *zur Approximation von $I(f) := \int_a^b f(x)\,dx$ verstehen wir die Vorschrift:*

$$I^n(f) := \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i),$$

mit $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen *$x_0, \dots, x_n$ sowie $n+1$* Quadraturgewichten *$\alpha_0, \dots, \alpha_n$.*

Zunächst bringen wir zur Veranschaulichung einige einfache Beispiele:

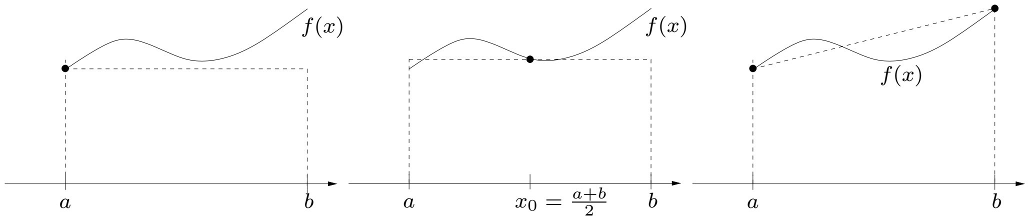


Abbildung 9.6.: Linksseitige Boxregel, Mittelpunktsregel und Trapezregel zur Integralapproximation.

Definition 9.35 (Boxregel)**.** *Die Box-Regel zur Integration auf* $[a, b]$ *ist die einfachste Quadraturformel und basiert auf Interpolation von* $f(x)$ *mit einem konstanten Polynom* $p(x) = f(a)$ *und Integration von* $p(x)$ *(siehe Abbildung 9.6):*

$$I^0(f) = (b-a)f(a).$$

Neben dieser linksseitigen Boxregel *existiert mit* $I^0(f) = (b-a)f(b)$ *auch die* rechtsseitige Boxregel.

Die Boxregel hat ihre Bedeutung bei der Herleitung des Riemann-Integrals. Die Boxregel ist vergleichbar mit dem einseitigen Differenzenquotienten. Eine bessere Quadraturformel erhalten wir durch Ausnutzen von Symmetrieeigenschaften:

Definition 9.36 (Mittelpunktsregel)**.** *Zur Herleitung der Mittelpunktregel wird die Funktion* $f(x)$ *in der Mitte des Intervalls mit einem konstanten Polynom interpoliert:*

$$I^0(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Siehe Abbildung 9.6.

Diese beiden Regeln basieren auf einer Interpolation der Funktion f mit einer konstanten Funktion. Herleitung der Trapezregel wird $f(x)$ in den beiden Intervallenden linear interpoliert:

Definition 9.37 (Trapezregel)**.** *Die Trapezregel ist durch Integration der linearen Interpolation in* $(a, f(a))$ *sowie* $(b, f(b))$ *gebildet:*

$$I^1(f) = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)).$$

Siehe auch Abbildung 9.6

9.5.1. Interpolatorische Quadratur

Die interpolatorischen Quadraturformeln werden über die Konstruktion eines geeigneten Interpolationspolynoms hergeleitet. Zu den gegebenen Stützstellen $a \le x_0 < \ldots < x_n \le b$ wird gemäß Abschnitt 9.1 das Lagrangsche Interpolationspolynom als Approximation der Funktion f gebildet:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i^{(n)}(x).$$

Dieses wird dann integriert:

$$I^{(n)}(f) := \int_a^b p_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b L_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x}_{=:\alpha_i} = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$$

Die Quadraturgewichte

$$\alpha_i = \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x \tag{9.16}$$

hängen offensichtlich nicht von der zu integrierenden Funktion $f(x)$ ab, dafür vom Intervall $[a, b]$ sowie von den Stützstellen $x_0, \ldots, x_n$. Dies impliziert die Frage, ob durch geschickte Verteilung der Stützstellen die Qualität der Gewichte verbessert werden kann.

Bevor wir einzelne Quadratur-Formeln analysieren und nach möglichst leistungsfähigen Formeln suchen, können wir zunächst ein einfaches aber doch allgemeines Resultat herleiten:

Satz 9.38 (Lagrange-Quadratur)**.** *Für die interpolatorischen Quadraturformeln $I^n(f)$ mit $n + 1$ paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, x_1, \ldots, x_n$ gilt zur Approximation des Integrals $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$ die Fehlerdarstellung*

$$I(f) - I^n(f) = \int_a^b f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\,dx,$$

mit Newtonscher Restglieddarstellung.

Beweis: Der Beweis folgt unmittelbar durch Integration der entsprechenden Fehlerabschätzung für die Lagrange-Interpolation in Satz 9.12. □

Hieraus folgt eine wichtige Eigenschaft der interpolatorischen Quadraturformeln:

Korollar 9.39. *Die interpolatorische Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ ist exakt für alle Polynome vom Grad n. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der konkreten Wahl der $n + 1$ paarweise verschiedenen Stützstellen.*

Beweis: Folgt direkt aus der Konstruktion der interpolatorischen Quadraturformeln, da für jedes $f \in P_n$ sofort $p = f$ gilt. □

Definition 9.40 (Ordnung von Quadraturregeln)**.** *Eine Quadraturformel $I^{(n)}(\cdot)$ wird (mindestens) von der Ordnung m genannt, wenn durch sie mindestens alle Polynome aus P_{m-1} exakt integriert werden. D.h. die interpolatorischen Quadraturformeln $I^{(n)}(\cdot)$ zu $n+1$ Stützstellen sind mindestens von der Ordnung $n+1$.*

Im Folgenden werden wir die bereits eingeführten einfachen Quadraturformeln näher analysieren und ihre Fehlerabschätzung sowie Ordnung bestimmen. Hierzu werden wir die Newtonsche Integraldarstellung des Interpolationsfehlers aus Satz 9.38 nutzen.

Satz 9.41 (Boxregel)**.** *Es sei $f \in C^1[a,b]$. Die Boxregel (Definition 9.35) ist von erster Ordnung und es gilt die Fehlerabschätzung:*

$$I^0(f) := (b-a)f(a), \quad I(f) - I^0(f) = \frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi),$$

mit einer Zwischenstelle $\xi \in (a,b)$.

Beweis: Die Boxregel basiert auf der Interpolation mit einem konstanten Polynom, hat daher erste Ordnung. Aus Satz 9.38 folgt mit $x_0 = a$:

$$I(f) - I^0(f) = \int_a^b f[a,x](x-a)\,\mathrm{d}x,$$

wobei mit Satz 9.12 weiter gilt:

$$I(f) - I^0(f) = \int_a^b \int_0^1 f'(a + t(x-a))(x-a)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x.$$

Wir wenden den Mittelwertsatz der Integralrechnung zweimal an und erhalten

$$I(f) - I^0(f) = f'(\xi) \int_a^b \int_0^1 (x-a)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2} f'(\xi)(b-a)^2,$$

mit einem Zwischenwert $\xi \in (a,b)$. □

Die Boxregel ist die einfachste Quadraturformel. In Analogie zur Diskussion bei den Differenzenquotienten können wir bei der Mittelpunktsregel durch geschickte Ausnutzung der Symmetrie eine bessere Approximationsordnung erwarten. Um diese bessere Ordnung zu erreichen müssen wieder Superapproximationeigenschaften genutzt werden, welche im Allgemeinen etwas Mehraufwand erfordern:

Satz 9.42 (Mittelpunktsregel)**.** *Es sei $f \in C^2[a,b]$. Die Mittelpunktsregel (Definition 9.36) ist von Ordnung 2 und es gilt die Fehlerabschätzung:*

$$I^0_m(f) := (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad I(f) - I^0_m(f) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi),$$

mit einer Zwischenstelle $\xi \in (a,b)$.

Beweis: Aufgrund der Interpolation mit konstantem Polynom ist zunächst ist nur erste Ordnung zu erwarten. Es gilt mit Satz 9.12:

$$I(f) - I_m^0(f) = \int_a^b f\left[\frac{a+b}{2}, x\right]\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\mathrm{d}x.$$

Zur Vereinfachung setzen wir $x_m := (a+b)/2$ und es sei $\bar{f} \in \mathbb{R}$ ein beliebiger, fester Wert. Dann gilt:

$$I(f) - I_m^0(f) = \int_a^b (f[x_m, x] - \bar{f})(x - x_m)\,\mathrm{d}x + \bar{f}\underbrace{\int_a^b x - x_m\,\mathrm{d}x}_{=0} \tag{9.17}$$

Mit der Integraldarstellung der dividierten Differenzen aus Satz 9.12 gilt bei Taylor-Entwicklung um x_m:

$$f[x_m, x] = \int_0^1 f'(x_m + t(x - x_m))\,\mathrm{d}t = \int_0^1 f'(x_m) + t(x - x_m)f''(\xi)\,\mathrm{d}t,$$

für ein $\xi \in [x_m, x]$. Bei Wahl von $\bar{f} = f'(x_m)$ folgt mit (9.17) für den Fehler

$$I(f) - I_m^0(f) = f''(\xi)\int_a^b \int_0^1 t(x - x_m)^2\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x = \frac{|b-a|^3}{24}f''(\xi).$$

□

Mit dem gleichen Aufwand wie die Boxregel, also mit einer Auswertung der Funktion $f(x)$ erreicht die Mittelpunktsregel die doppelte Ordnung.

Satz 9.43 (Trapezregel)**.** *Es sei $f \in C^2([a,b])$. Die Trapezregel (Definition 9.37) ist von Ordnung 2 und es gilt die Fehlerabschätzung:*

$$I^1(f) := \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)), \quad I(f) - I^1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi),$$

mit einer Zwischenstelle $\xi \in (a,b)$.

Beweis: Mit Satz 9.12 gilt:

$$I(f) - I^1(f) = \int_a^b f[a,b,x](x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x. \tag{9.18}$$

Für $f[a,b,x]$ gilt bei zweimaliger Anwendung des Mittelwertsatzes der Integralrechnung (der Ausdruck $(x-a)(x-b)$ hat im Intervall keinen Vorzeichenwechsel)

$$f[a,b,x] = \int_0^1 \int_0^{t_1} f''(a + t_1(b-a) + t(x-b))\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}t_1 = \frac{1}{2}f''(\xi_{a,b,x}),$$

mit einem Zwischenwert $\xi_{a,b,x}$. Hiermit erhalten wir mit nochmaliger Anwendung des Mittelwertsatzes (da $(x-a)(x-b) \le 0$) die Restgliedabschätzung:

$$I(f) - I^1(f) = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi_x)(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x = \frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi),$$

mit einem weiteren Zwischenwert $\xi \in (a,b)$. □

Die Verwendung eines quadratischen Interpolationspolynoms führt auf die Simpson Regel:

Satz 9.44 (Simpson-Regel)**.** *Es sei $f \in C^4[a,b]$. Die* Simpson-Regel*, basierend auf Interpolation mit quadratischem Polynom:*

$$I^2(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right),$$

ist von Ordnung vier und es gilt:

$$I(f) - I^2(f) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5,$$

wobei $\xi \in (a,b)$.

Beweis: Der Beweis folgt analog zu den Beweisen zu Mittelpunkts- und Trapezregel und sei dem Leser als Übung gestellt. Dabei muss wieder das Superapproximationsprinzip ausgenutzt werden. □

Bemerkung 9.45. *Wie bei der Mittelpunktsregel ist die Ordnung der Simpson-Regel eine Potenz höher als zu erwarten wäre. Treibt man dieses Spiel weiter und konstruiert noch höhere Quadraturformeln, dann erkennen wir ein allgemeines Prinzip: bei Quadratur mit geraden Interpolationspolynomen, wird die Fehlerordnung um eine Potenz erhöht. Dies folgt jeweils aus Symmetriegründen.*

Bei allen bisherigen Quadraturformeln sind die Stützstellen gleichmäßig im Intervall $[a,b]$ verteilt. Diese Formeln werden *Newton-Cotes-Formeln* genannt:

Definition 9.46 (Newton-Cotes-Formeln)**.** *Quadraturregeln mit äquidistant im Intervall $[a,b]$ verteilten Stützstellen heißen* Newton-Cotes-Formeln*. Gehören die Intervallenden a sowie b zu den Stützstellen, so heißen die Formeln* abgeschlossen*, ansonsten* offen*.*

In Tabelle 9.2 fassen wir einige gebräuchliche Newton-Cotes Formeln zusammen. Ab $n \ge 8$ bei den abgeschlossenen Formeln und ab $n = 2$ bei den offenen Formeln, treten negative Quadraturgewichte α_i auf. Dies führt zu dem Effekt, dass auch bei rein positiven Integranden Auslöschung auftreten kann. Daher sind diese Formeln aus numerischer Sicht nicht mehr anwendbar. Für die Gewichte einer Quadratur-Regel gilt stets

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i = b - a.$$

Tabelle 9.2.: Eigenschaften und Gewichte einiger Newton-Cotes Formeln.

n	Gewichte α_i		Name	Ordnung
0	1	offen	Boxregel	1
1	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	geschlossen	Trapezregel	2
2	$\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6}$	geschlossen	Simpson-Regel	4
3	$\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}$	geschlossen	Newton's 3/8-Regel	4
4	$\frac{7}{90}, \frac{32}{90}, \frac{12}{90}, \frac{32}{90}, \frac{7}{90}$	geschlossen	Milne's-Regel	6
6	$\frac{41}{840}, \frac{216}{840}, \frac{27}{840}, \frac{272}{840}, \frac{27}{840}, \frac{216}{840}, \frac{41}{840}$	geschlossen	Weddle-Regel	8
8	$\frac{3956}{14175}, \frac{23552}{14175}, -\frac{3712}{14175}, \frac{41984}{14175}, -\frac{3632}{2835},$			
	$\frac{41984}{14175}, -\frac{3712}{14175}, \frac{23552}{14175}, \frac{3956}{14175}$	geschlossen		10 ?

Im Fall negativer Gewichte gilt

$$\sum_{i=0}^{n} |\alpha_i| > (b-a).$$

Ein allgemeiner Satz (Theorem von Kusmin) besagt, dass für $n \to \infty$ sogar gilt

$$\sum_{i=0}^{n} |\alpha_i| \to \infty \quad (n \to \infty).$$

Regeln von sehr hoher Ordnung sind somit numerisch nicht stabil einsetzbar.

9.5.2. Stückweise interpolatorische Quadraturformeln

Die interpolatorische Quadratur aus dem vorangegangenen Abschnitt beruht auf der Integration eines Interpolationspolynoms p. Für dieses gilt die Fehlererabschätzung (Satz 9.11):

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Die Genauigkeit der Quadratur kann prinzipiell auf zwei Wege verbessert werden: der Vorfaktor kann durch Wahl von mehr Stützstellen klein gehalten werden, denn es gilt $1/(n+1)! \to 0$. Dies führt jedoch nur dann zur Konvergenz des Fehlers, falls die Ableitungen $f^{(n)}$ nicht zu schnell wachsen, siehe Beispiel 9.15. Als zweite Option bleibt das Produkt der Stützstellen. Eine einfache Abschätzung besagt wegen $x, x_0, \dots, x_n \in [a,b]$:

$$\left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right| \leq (b-a)^{n+1}.$$

Interpolationsfehler (und somit auch Quadraturfehler) lassen sich durch Potenzen der Intervallgröße beschränken. Dies wird zur Entwicklung von stabilen und konvergenten Quadraturformeln entsprechend dem Vorgehen der summierten Interpolation (Abschnitt 9.2)

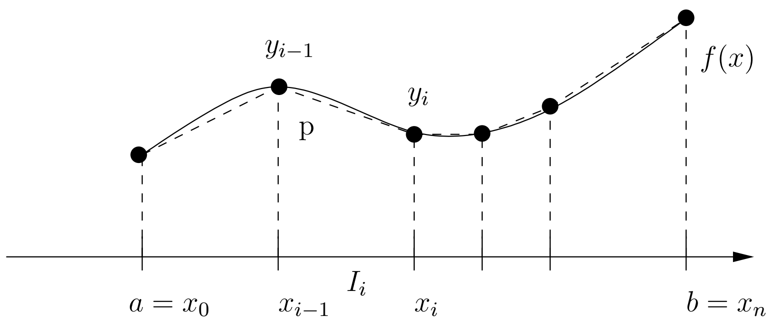


Abbildung 9.7.: Summierte Trapezregel zur Integralapproximation.

genutzt. Hierzu sei

$$a = y_0 < y_1 < \cdots < y_m = b, \quad h_i := y_i - y_{i-1},$$

eine Zerlegung des Intervalls $[a, b]$ in m Teilintervalle mit Schrittweite h_i. Auf jedem dieser m Teilintervalle wird die Funktion f mit Hilfe einer Quadraturformel approximiert:

$$I_h^n(f) = \sum_{i=1}^{m} I^n_{[y_{i-1}, y_i]}(f).$$

Aus Satz 9.38 folgt sofort eine allgemeine Fehlerabschätzung für die summierten Quadraturformeln

Satz 9.47 (Summierte Quadratur)**.** *Es sei $f \in C^{n+1}([a, b])$ sowie $a = y_0 < \cdots < y_m = b$ eine Zerlegung des Intervalls mit Schrittweiten $h_i := y_i - y_{i-1}$ sowie $h := \max h_i$. Für die summierte Quadraturformel $I_h^n(f)$ gilt die Fehlerabschätzung:*

$$I(f) - I_h^n(f) \le c \max_{[a,b]} |f^{(n+1)}| h^{n+1},$$

mit einer Konstante $c(n) > 0$.

Beweis: Der Beweis folgt einfach aus Kombination von Satz 9.38 sowie der differentiellen Restglieddarstellung der Lagrange-Interpolation. □

Aus diesem Resultat kann ein wichtiges Ergebnis abgelesen werden: für $h \to 0$, also für steigende Feinheit der Intervallzerlegung konvergiert die summierte Quadratur für beliebiges n. Mit Hilfe von summierten Quadraturregeln lassen sich somit auch Funktionen mit schnell wachsenden Ableitungen integrieren. Darüber hinaus eignen sich summierte Regeln auch zur Integration von Funktionen, die nur eine geringe Regularität, etwa $f \in C^1([a, b])$ aufweisen. Da es möglich ist die Ordnung n klein zu halten sind summierte Quadraturregeln numerisch stabiler. Zur Veranschaulichung betrachten wir in Abbildung 9.7 die summierte Trapezregel.

Im Folgenden konkretisieren wir einige einfache summierte Quadraturregeln. Hierzu betrachten wir ausschließlich äquidistante Zerlegungen des Intervalls $[a, b]$:

$$a = y_0 < \cdots < y_m = b, \quad h := \frac{b-a}{m}, \quad y_i := a + ih, \quad i = 0, \dots, m. \tag{9.19}$$

Satz 9.48 (Summierte Boxregel). *Es sei $f \in C^1[a, b]$ sowie durch (9.19) eine äquidistante Zerlegung des Intervalls gegeben. Für die summierte Boxregel*

$$I_h^0(f) = h \sum_{i=1}^{m} f(y_i),$$

gilt die Fehlerabschätzung:

$$|I(f) - I_h^0(f)| \le \frac{b-a}{2} h \max_{[a,b]} |f'|.$$

Beweis: Aus Satz 9.41 folgern wir durch Summation über die Teilintervalle

$$I(f) - I_h^0(f) = \sum_{i=1}^{m} \frac{h^2}{2} f'(\xi_i),$$

mit Zwischenstellen $\xi_i \in [y_{i-1}, y_i]$. Das Ergebnis folgt nun mit $(b - a) = \sum_i h_i$ sowie durch Übergang zum Maximum. □

Mit der summierten Boxregel haben wir also sogar für nur stückweise stetig differenzierbare Funktionen eine konvergente Quadraturformel für $h \to 0$. Entsprechend gilt für die Trapezregel:

Satz 9.49 (Summierte Trapezregel). *Es sei $f \in C^2[a, b]$ sowie durch (9.19) eine äquidistante Zerlegung des Intervalls gegeben. Für die summierte Trapezregel*

$$I_h^1(f) = \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{m} (f(y_{i-1}) + f(y_i)) = \frac{h}{2} f(a) + h \sum_{i=1}^{m-1} f(y_i) + \frac{h}{2} f(b)$$

gilt die Fehlerabschätzung:

$$|I(f) - I_h^1(f)| \le \frac{b-a}{12} h^2 \max_{[a,b]} |f''|.$$

Beweis: Übung! □

Die summierte Trapezregel ist besonders attraktiv, da sich die Stützstellen überschneiden: der Punkt y_i ist sowohl Stützstelle im Teilintervall $[y_{i-1}, y_i]$ als auch $[y_i, y_{i+1}]$ und $f(y_i)$ muss nur einmal bestimmt werden. Darüber hinaus eignet sich die summierte Trapezregel als Grundlage von *adaptiven Quadraturverfahren*, bei denen die Genauigkeit Stück für

Stück dem Problem angepasst wird: wurde auf einer Zerlegung zur Schrittweite h die Approximation $I_h^1(f)$ bestimmt, so kann die Genauigkeit durch Intervallhalbierung $I_{h/2}^1(f)$ einfach gesteigert werden. Alle Stützstellen $f(y_i)$ können weiter verwendet werden, die Funktion $f(x)$ muss lediglich in den neuen Intervallmitten berechnet werden. Ein entsprechendes Resultat gilt für die summierte Simpsonregel:

$$\begin{aligned} I_h^2(f) &= \sum_{i=1}^m \frac{h}{6}\left(f(y_{i-1}) + 4f\left(\frac{y_{i-1}+y_i}{2}\right) + f(y_i)\right) \\ &= \frac{h}{6}f(a) + \sum_{i=1}^m \frac{h}{3}f(y_i) + \sum_{i=1}^m \frac{2h}{3} f\left(\frac{y_{i-1}+y_i}{2}\right) + \frac{h}{6}f(b). \end{aligned}$$

Bei geschickter Anordnung sind nur $2m+2$ statt $3m$ Funktionsauswertungen notwendig.

9.5.3. Romberg-Quadratur

Die Idee der Richardson Extrapolation in Abschnitt 9.4, Approximationsprozesse hoher Ordnung zu erzielen, die auf Basismethoden niedriger Ordnung basieren, wird hier auf die numerische Quadratur angewendet. Konkret werden wir die summierte Trapezregel zur Extrapolation nutzen. Die Trapezregel gehört zu den sehr einfachen Verfahren mit niedriger Ordnung. Wir fassen die wesentlichen Ergebnisse aus Abschnitt 9.5.2 zusammen. Auf einer gleichmäßigen Zerlegung des Intervalls $[a,b]$ in N Teilintervalle mit Schrittweite $h = 1/N$ ist die summierte Trapezregel zur Approximation von $\int_a^b f\,\mathrm{d}x$ gegeben durch:

$$I_h(f) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(b)\right), \quad x_j := a + jh,$$

und liefert im Falle $f \in C^2([a,b])$ die Fehlerabschätzung:

$$I(f) - I_h(f) = \frac{b-a}{12}h^2 f^{(2)}(\xi),$$

mit einer Zwischenstelle $\xi \in [a,b]$. Um die Extrapolationsmethode erfolgreich anwenden zu können brauchen wir Kenntnis über die weitere Fehlerentwicklung der Trapezregel. Die Basis hierzu ist die Euler-Maclaurinsche Summenformel, die eine Entwicklung des Fehlers in geraden Potenzen von h zeigt:

Satz 9.50 (Euler-Maclaurinsche Summenformel)**.** *Falls $f^{2m+2}[a,b]$, dann gilt die Euler-Maclaurinsche Summenformel*

$$I(f) - I_h(f) = \sum_{k=1}^m h^{2k}\frac{B_{2k}}{(2k)!}\left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right) + h^{2m+2}\frac{b-a}{(2m+2)!}B_{2m+2}f^{(2m+2)}(\xi),$$

mit $\xi \in [a,b]$ und den Bernoulli-Zahlen B_{2k}.

Beweis: Seminarthema! □

Die Bernoulli-Zahlen sind definiert als die Koeffizienten der Taylorreihendarstellung von

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} x^k = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}\frac{x^2}{2!} - \frac{1}{30}\frac{x^4}{4!} + \frac{1}{42}\frac{x^6}{6!} + \dots,$$

und genügen der Rekursionsformel

$$B_0 = 0, \quad B_k = -\sum_{j=0}^{k-1} \frac{k!}{j!(k-j+1)!} B_j, \quad k = 1, 2, \dots.$$

Die ersten Bernoulli-Zahlen sind gegeben als:

$$1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, 0, -\frac{1}{30}, 0, \frac{1}{42}, 0, -\frac{1}{30}, \dots.$$

Ausgenommen $B_1 = -\frac{1}{2}$ gilt für jede zweite (ungerader Index) Bernoulli-Zahl $B_{2k+1} = 0$. Ansonsten folgen sie keinem erkennbaren Gesetz Für große k wachsen die Bernoulli-Zahlen sehr schnell an und verhalten sich asymptotisch wie

$$|B_{2k}| \sim 2(2k)!(2\pi)^{-2k}, \quad k \to \infty.$$

Die Euler-Maclaurinsche Summenformel besagt, dass die Trapezregel eine Entwicklung in geraden Potenzen von h besitzt. Daher eignet sie sich gleich in zweifacher Hinsicht optimal zur Extrapolation: aufgrund der quadratischen Fehlerentwicklung gewinnen wir in jedem Extrapolationsschritt zwei Ordnungen Genauigkeit und aufgrund der Stützstellenwahl an den Enden der Teilintervalle x_{j-1} und x_j können bereits berechnete Werte $f(x_j)$ zu einer Schrittweite h bei der nächst feineren Approximation zu $h/2$ weiter verwendet werden. Zur Approximation von

$$a(0) \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x, \quad a(h) := I_h(f) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(b)\right),$$

verwenden wir das Extrapolationsprinzip aus Abschnitt 9.4:

Verfahren 9.51 (Romberg-Quadratur)**.**

1) Berechne für eine Folge von Schrittweiten $(h_k)_{k\in\mathbb{N}}$ *mit*

$$\frac{h_{k+1}}{h_k} \le \rho < 1,$$

die Approximationen

$$a(h_k), \quad k = 0, \dots, m.$$

2) Extrapoliere die Werte $(h_k^2, a(h_k)), k = 0, \dots, m$ *mit Polynomen in* h^2.

Als Schrittweitenfolge kann mit einem $h > 0$ die einfache Vorschrift

$$h_k = 2^{-k} h,$$

verwendet werden. Diese Folge wird *Romberg-Folge* genannt und hat den Vorteil, dass bereits berechnete Stützstellen weiter verwendet werden können. Der Nachteil dieser Folge ist das schnelle Wachstum der Anzahl der Stützstellen. Die Extrapolation selbst wird mit dem modifizierten Neville-Schema 9.31 durchgeführt.

Die Diagonalelemente $a_{k,k}$ sind gerade die Näherungen zu $a(0)$. Basierend auf Satz 9.30 zur allgemeinen Richardson-Extrapolation erhalten wir die Fehlerabschätzung:

Satz 9.52 (Romberg-Quadratur)**.** *Es sei $f^{2m+2}[a,b]$ sowie $h > 0$ gegeben. Das Romberg-Verfahren zur Schrittweitenfolge $h_k = 2^{-k}h,\ k = 0,\dots,m$ liefert nach m Extrapolationsschritten die Approximation:*

$$I(f) - a_{m,m} = O(h^{2m+2}).$$

Beweis: Der Beweis folgt durch Kombination von Satz 9.30 über die Richardson-Extrapolation mit der Euler-Maclaurinschen Summenformel aus Satz 9.50. □

Bemerkung 9.53. *Anstatt der Romberg-Folge $h_k = 2^{-k}h$ kann auch mit der Burlisch-Folge*

$$h_k = \begin{cases} h \cdot 2^{-\frac{k}{2}} & k \text{ gerade} \\ \frac{h}{3} 2^{-\frac{k-1}{2}} & k \text{ ungerade} \end{cases}$$

gearbeitet werden, da diese wesentlich weniger Funktionsauswertungen benötigt. Bei $h = 1$ sind die ersten Folgenglieder gegeben durch:

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{8}, \frac{1}{12}, \dots,$$

Beispiel 9.54 (Romberg'sches Quadraturverfahren)**.** *Wir untersuchen das Integral*

$$I(f) = \int_0^1 \exp\left\{1 + \sin^2(x)\right\}\,dx \approx 4.7662017991376737307$$

Für die zu integrierende Funktion gilt $f \in C^\infty(\mathbb{R})$*. Das Romberg-Verfahren sollte sich also gut anwenden lassen. In der folgenden Tabelle führen wir das Romberg-Verfahren mit der summierten Trapez-Regel durch:*

h	$I_h(f) = a(h)$	$I(f) - I_h(f)$	$a^{(1)}(h)$	$I(f) - a^{(1)}(h)$	$a^{(2)}(h)$	$I(f) - a^{(2)}(h)$
2^{-0}	4.11830	$-4.56e-01$	3.65324	$9.17e-03$	3.6623410	$7.47e-05$
2^{-1}	3.76951	$-1.07e-01$	3.66177	$6.43e-04$	3.6624169	$1.24e-06$
2^{-2}	3.68871	$-2.63e-02$	3.66238	$3.91e-05$	3.6624157	$2.30e-08$
2^{-3}	3.66896	$-6.54e-03$	3.66241	$2.42e-06$	3.6624157	$3.65e-10$
2^{-4}	3.66405	$-1.63e-03$	3.66242	$1.51e-07$	3.6624157	$5.72e-12$
2^{-5}	3.66282	$-4.08e-04$	3.66242	$9.42e-09$	3.6624157	$8.93e-14$
2^{-6}	3.66252	$-1.02e-04$	3.66242	$5.89e-10$		
2^{-7}	3.66244	$-2.55e-05$				
Ordnung		$O(h^2)$		$O(h^4)$		$O(h^6)$

Bei diesem Beispiel wird beim Romberg'schen Quadratur-Verfahren bei nur zwei Extrapolationsschritten sehr schnell die Maschinengenauigkeit erreicht.

Wir betrachten als zweites Beispiel die Funktion

$$f(x) = |sin(x) - 0.75|, \quad I(f) = \int_0^1 f(x)\,dx \approx 0.304666468$$

Hier ergibt sich bei Extrapolation der Trapezregel keine wesentliche Verbesserung:

h	$I_h(f) = a(h)$	$I(f) - I_h(f)$	$a^{(1)}(h)$	$I(f) - a^{(1)}(h)$	$a^{(2)}(h)$	$I(f) - a^{(2)}(h)$
2^{-0}	0.42074	$-1.16e-01$	0.32063	$1.60e-02$	0.3045314	$1.35e-04$
2^{-1}	0.34565	$-4.10e-02$	0.30554	$8.71e-04$	0.3036544	$1.01e-03$
2^{-2}	0.31557	$-1.09e-02$	0.30377	$8.94e-04$	0.3049991	$3.33e-04$
2^{-3}	0.30672	$-2.05e-03$	0.30492	$2.56e-04$	0.3045325	$1.34e-04$
2^{-4}	0.30537	$-7.06e-04$	0.30456	$1.10e-04$	0.3046924	$2.59e-05$
2^{-5}	0.30476	$-9.42e-05$	0.30468	$1.75e-05$	0.3046680	$1.58e-06$
2^{-6}	0.30470	$-3.66e-05$	0.30467	$2.57e-06$		
2^{-7}	0.30468	$-1.11e-05$				

Konvergenzordnungen lassen sich bei diesem Beispiel nicht klar bestimmen. Der Grund hierfür ist die fehlende Regularität der Funktion f*. Die Funktion ist zwar integrierbar, ihre Ableitungen haben jedoch an der Stelle* $\arcsin(0.75) \approx 0.86$ *Singularitäten.*

Integration periodischer Funktionen

Im Falle periodischer Funktionen, d.h. es sei $f^{2m+2}(-\infty, \infty)$ mit dem Periodenintervall $[a, b]$ und

$$f^{(2k-1)}(a) = f^{(2k-1)}(b), \quad k = 1, 2, \ldots$$

kann die Euler-Maclaurinsche Summenformel *entscheidend* vereinfacht werden. Aus

$$I(f) - I_h(f) = \sum_{k=1}^{m} h^{2k} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right) + h^{2m+2} \frac{b-a}{(2m+2)!} B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi),$$

mit

$$I_h(f) = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2} f(b) \right), \quad x_j := a + jh,$$

folgt dann

$$I(f) - I_h(f) = h^{2m+2} \frac{b-a}{(2m+2)!} B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) = O(h^{2m+2}),$$

mit

$$I_h(f) = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2} f(b) \right) = h \left(f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right) = h \left(\sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) \right)$$

mit $x_j := a + jh$. Die summierte Trapezregel *vereinfacht* sich dadurch zur summierten linksseitigen Boxregel.

Falls $f \in C^{\infty}(-\infty, \infty)$, dann konvergiert die summierte Trapezregel (d.h. bei $[a, b]$-periodischen Funktionen, die summierte Boxregel) schneller gegen den Integralwert, für $h \to 0$, als jede andere Quadraturregel.

Beispiel 9.55 (Quadratur periodischer Funktionen)**.** *Wir betrachten wie oben die Funktion*

$$f(x) = \exp\left\{1 + \sin^2(x)\right\},$$

nun aber das Integral

$$I(f) = \int_0^{\pi} f(x)\, dx \approx 14.97346455769737.$$

Die summierte Trapezregel liefert

h	$I_h(f) = a(h)$	$I(f) - I_h(f)$
$2^{-0}\pi$	8.53973	$6.43e+00$
$2^{-1}\pi$	15.87657	$-9.03e-01$
$2^{-2}\pi$	14.97811	$-4.64e-03$
$2^{-3}\pi$	14.97346	$-1.07e-08$
$2^{-4}\pi$	14.97346	$< eps$

9.5.4. Gauß-Quadratur

Wie bereits diskutiert, sind die interpolatorischen Quadraturformeln

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$$

zu den Stützstellen $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$ nach Konstruktion mindestens von der Ordnung $n+1$. D.h.:

$$I(p) = I^{(n)}(p) \quad \forall p \in P_n.$$

Wir haben jedoch mit der Mittelpunktsregel $n = 0$ und der Simpsonregel $n = 2$ bereits Quadraturformeln kennengelernt, die exakt sind für alle Polynome P_{n+1}, die also von der Ordnung $n+2$ sind.

Wir untersuchen in diesem Abschnitt die Frage, ob die Ordnung mit anderen bisher noch nicht kennengelernten Methoden weiter erhöht werden kann. Bisher lag die Freiheit lediglich in der Wahl des Polynomgrads und somit in der Anzahl der Stützstellen. Die Frage nach der optimalen Verteilung der Stützstellen im Intervall $[a,b]$ wurde bisher nicht untersucht. In diesem Abschnitt werden wir mit der *Gauß-Quadratur* interpolatorische Quadraturformeln kennenlernen, welche durch optimale Positionierung der Stützstellen die maximale Ordnung $2n+2$ erreichen.

Satz 9.56 (Ordnungsbarriere der Quadratur)**.** *Eine interpolatorische Quadraturformel zu $n+1$ Stützstellen kann höchstens die Ordnung $2n+2$ haben.*

Beweis: Angenommen $I^{(n)}(\cdot)$ mit den Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ wäre von höherer Ordnung, insbesondere exakt für Polynome P_{2n+2}, dann auch für

$$p(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)^2 \in P_{2n+2}.$$

Die eindeutige Interpolierende $p_n \in P_n$ mit $p_n(x_i) = p(x_i) = 0$ hat $n+1$ Nullstellen und stellt somit die Nullfunktion dar. Dies ergibt einen Widerspruch:

$$0 < \int_a^b p(x)\,dx = I^{(n)}(p) = I^{(n)}(p_n) = 0.$$

□

Im Folgenden untersuchen wir interpolatorische Quadraturregeln genauer und versuchen Bedingungen herzuleiten, unter denen die höchst mögliche Ordnung $2n+2$ wirklich erreicht werden kann. Wir müssen demnach eine Quadraturformel in $n+1$ Stützstellen finden, welche exakt ist für alle Polynome aus P_{2n+1}. Hierzu wählen wir zunächst eine Quadraturformel mit den $2n+2$ Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{2n+1}$. Von dieser wissen wir, dass sie auf jeden Fall der Ordnung $2n+2$ ist. Es gilt in Newtonscher Darstellung des Interpolationspolynoms

$$\begin{aligned} I(f) - I^{2n+1}(f) &= I(f) - \sum_{i=0}^{2n+1} f[x_0,\dots,x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)\,\mathrm{d}x \\ &= I(f) - I^n(f) - \sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0,\dots,x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)\,\mathrm{d}x, \end{aligned}$$

wobei $I^n(\cdot)$ diejenige Quadraturregel ist, welche durch die ersten $n+1$ Stützstellen $x_0,\dots,x_n$ gegeben ist. Wir versuchen nun die Stützstellen $x_0,\dots,x_{2n+1}$ so zu bestimmen, dass das Restglied

$$\sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0,\dots,x_i] \int_a^b \prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)\,\mathrm{d}x = 0$$

für alle Funktionen $f \in C^{2n+2}([a,b])$ verschwindet. Das bedeutet, dass die Hinzunahme der Stützstellen $x_{n+1},\dots,x_{2n+1}$ nicht notwendig ist:

$$I(f) - I^{2n+1}(f) = I(f) - I^n(f) \quad \Rightarrow \quad I^{2n+1}(f) = I^n(f).$$

Die Formel $I^n(f)$ mit $n+1$ Stützstellen hat dann bereits die Ordnung $2n+1$. Die Newton-Basispolynome für $i = n+1,\dots,2n+1$ müssen die folgende Bedingung erfüllen:

$$\int_a^b \underbrace{\prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)}_{\in P_{2n+1}}\,\mathrm{d}x = \int_a^b \underbrace{\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)}_{\in P_{n+1}} \underbrace{\prod_{j=n+1}^{i-1}(x-x_j)}_{\in P_n}\,\mathrm{d}x \stackrel{!}{=} 0.$$

Ziel ist also eine Bestimmung der ersten $n+1$ Stützstellen $x_0,\dots,x_n$, so dass das Integral

$$\int_a^b \underbrace{\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)}_{=:p_{n+1}(x)} q(x)\,\mathrm{d}x = 0, \quad \forall q \in P_n, \tag{9.20}$$

für alle $q \in P_n$ verschwindet. Wählen wir eine Basis des P_n (mit Dimension $n+1$), so ergibt sich ein System von $n+1$ Gleichungen für die $n+1$ Unbekannten $x_0,\dots,x_n$. Geometrisch betrachtet handelt es sich hier um eine Orthogonalisierungsaufgabe bzgl. des L^2-Skalarproduktes

$$(f,g)_{L^2[a,b]} := \int_a^b f(x)g(x)\,\mathrm{d}x.$$

Kurz geschrieben: Suche $x_0,\dots,x_n \in \mathbb{R}$, so dass für $p_{n+1}(x) := \prod_{i=0}^n (x-x_i)$

$$(p_{n+1},q) = 0 \quad \forall q \in P_n \tag{9.21}$$

gilt. Der Raum der Polynome P_n ist ein linearer Vektorraum. Durch $(\cdot,\cdot)$ ist ein Skalarprodukt gegeben. Mit Hilfe des Gram-Schmitt Verfahrens, Satz 4.6, lässt sich aus der Monombasis $\{1,x,\dots,x^n\}$ ein Polynom $p_{n+1} \in P_{n+1}$ erzeugen, welches auf allen $q \in P_n$

orthogonal ist. Dies löst jedoch noch nicht das Problem, eine entsprechende Quadraturformel zu finden, da nicht gesagt ist, dass dieses Polynom p_{n+1} auch $n+1$ paarweise verschiedene Nullstellen im Intervall $[a,b]$ besitzt.

Bevor wir die allgemeine Lösbarkeit dieser Aufgabe betrachten untersuchen wir zunächst als einfaches Beispiel die Fälle $n=0$ sowie $n=1$:

Beispiel 9.57 (Optimale Stützstellenwahl durch Orthogonalisierung)**.** *Wir wollen die Polynome $p_1(x) = (x-x_0)$ sowie $p_2(x) = (x-x_0)(x-x_1)$ bestimmen, so dass sie im L^2-Skalarprodukt orthogonal auf allen Polynomen von Grad 0 bzw. 1 stehen. Ohne Einschränkung betrachten wir das Intervall $[-1,1]$:*

Für $n=0$ gilt mit $q \equiv \alpha_0 \in P_0$

$$0 \stackrel{!}{=} (x-x_0, \alpha_0)_{L^2([-1,1])} = -2x_0\alpha_0 \quad \forall \alpha_0 \in \mathbb{R},$$

also muss $x_0 = 0$ gelten.

Im Fall $n=1$ gilt mit $q = \alpha_0 + \beta_0 x$:

$$0 \stackrel{!}{=} ((x-x_0)(x-x_1), \alpha_0 + \beta_0 x)_{L^2[-1,1]} = \frac{-2(x_0+x_1)}{3}\beta_0 + \frac{2(1+3x_0x_1)}{3}\alpha_0 \quad \forall \alpha_0, \beta_0 \in \mathbb{R}.$$

Aus $\alpha_0 = 0$ sowie $\beta_0 = 1$ folgern wir $x_0 = -x_1$ und aus $\alpha_0 = 1$ und $\beta_0 = 0$ folgt hiermit $x_{1/2} = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$. Die zugehörigen Gewichte bestimmen wir gemäß

$$\alpha_i = \int_a^b L_i^{(n)}(x)\,dx.$$

Vergleiche hierzu auch Formel (9.16) zu:

$$\alpha_0^0 = \int_{-1}^1 1\,dx = 2, \quad \alpha_0^1 = \int_{-1}^1 \frac{x - \frac{-1}{\sqrt{3}}}{\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{-1}{\sqrt{3}}}\,dx = 1, \quad \alpha_1^1 = \int_{-1}^1 \frac{x - \frac{1}{\sqrt{3}}}{\frac{-1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}}\,dx = 1,$$

und wir erhalten die beiden ersten Gauß-Quadraturformeln:

$$I_G^0(f) = 2f(0), \quad I_G^1(f) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Die erste Formel ist gerade die Mittelpunktsregel, von der wir bereits die Ordnung zwei (also $2n+2 = 2\cdot 0 + 2$) kennen. Die zweite Formel hat die Ordnung 4, dies kann einfach durch Integration der Monome $1, x, x^2, x^3$ überprüft werden.

Gauß-Legendre-Quadratur

In diesem Abschnitt werden allgemeine Resultate zur Existenz und Eindeutigkeit von Gauß'schen Quadraturregeln $I_G^n(f)$ untersucht. Aus Konventionsgründen betrachtet man dabei das Intervall $[-1,1]$ (zur Transformation auf allgemeine Intervalle sei auf Bemerkung 9.77 verwiesen).

Definition 9.58 (Gauß-Quadratur)**.** *Eine Quadraturformel zur Integration einer Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ mit*

$$I_G^n(f) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k)$$

mit $n+1$ Quadratur-Stützstellen wird Gauß-Quadraturformel genannt, falls alle Polynome $p \in P_{2n+1}$ exakt integriert werden, d.h. falls gilt:

$$\int_{-1}^{1} p(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} a_k p(x_k) \quad \forall p \in P_{2n+1}.$$

Die beiden im Beispiel hergeleiteten Quadraturregeln sind somit Gauß'sche Quadraturformeln. Wir wollen im Folgenden die Existenz von Gauß'schen Quadraturregeln mit allgemeiner Ordnung, also für beliebige Stützstellenzahl $n \in \mathbb{N}$ untersuchen. Zunächst weisen wir nach, dass die Stützstellen der Gauß-Quadratur stets Nullstellen von orthogonalen Polynomen sein müssen:

Satz 9.59. *Es seien $x_0, \dots, x_n$ paarweise verschiedene Quadratur-Stützstellen einer Gauß-Quadraturformel $I^n(\cdot)$. Dann gilt die Orthogonalitätsbeziehung*

$$\int_{-1}^{1} p_{n+1}(x) q(x)\,dx = 0 \quad \forall q \in P_n, \quad p_{n+1}(x) := (x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

Beweis: Diese Aussage wurde bereits in der Herleitung der Gauss-Regeln bewiesen, vergleiche (9.20) und (9.21). Falls die Quadraturregel mit $n + 1$ Punkten die Ordnung $2n + 2$ hat, also eine Gauß'sche Regel ist, so muss das Restglied der möglichen Punkte $x_{n+1}, \dots, x_{2n+1}$ wegfallen. Dies entspricht gerade der Orthogonalitätsbeziehung in (9.20). □

Falls eine interpolatorische Quadratur-Formel also die Gauß-Ordnung $2n + 2$ besitzt, so bilden die $n+1$ Stützstellen ein Polynom $p_{n+1}(x) = \prod(x - x_i)$, welches Orthogonal auf P_n steht. Es bleibt zu zeigen, dass durch die Nullstellen eines orthogonalen Polynoms auch immer die Stützstellen einer Gauss-Formel bilden, d.h. die Rückrichtung.

Satz 9.60. *Es sei $p_{n+1} \in P^{n+1}$, gegeben als*

$$p_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j),$$

mit paarweise verschiedenen und reellen Nullstellen $x_j \in (-1,1)$ ein Polynom, welches L^2-orthogonal auf allen Polynomen $q \in P^n$ steht, d.h.

$$\int_{-1}^{1} p_{n+1}(x)q(x)\,dx = 0 \quad \forall q \in P^n.$$

Dann ist durch die Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ und Gewichte

$$\alpha_i = \int_{-1}^{1} L_i^{(n)}(x)\,dx = \int_{-1}^{1} \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,dx,$$

eine Gauß'sche Quadraturformel von Ordnung $2n+2$ gegeben.

Beweis: Es sei p_{n+1} entsprechend gegeben. Weiter sei $f \in C^{2n+2}([-1,1])$ beliebig und $p_n \in P_n$ das Interpolationspolynom durch die Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ und p_{2n+1} das Interpolationspolynom von f durch die Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ sowie durch weitere (paarweise verschiedene) Stützstellen $x_{n+1}, \dots, x_{2n+1}$. Durch p_{2n+1} wird mit $2n+2$ paarweise verschiedenen Stützstellen mindestens eine Quadraturregel der Ordnung $2n+2$ erzeugt. In Newton'scher Darstellung gilt für p_{2n+1} und p_n

$$p_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{2n+1} f[x_0, \dots, x_i] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) = p_n(x) + \sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0, \dots, x_i] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j)$$

Für die Differenz von p_{2n+1} und p_n gilt

$$p_{2n+1}(x) - p_n(x) = \sum_{i=n+1}^{2n+1} f[x_0, \dots, x_i] \underbrace{\prod_{j=0}^{n} (x - x_j)}_{=p_{n+1}(x)} \underbrace{\prod_{j=n+1}^{i-1} (x - x_j)}_{=:q(x)},$$

mit einem Polynom $q \in P^n$. Da $p_{n+1} \perp q$ folgt

$$\int_{-1}^{1} p_n(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} p_{2n+1}(x)\,\mathrm{d}x.$$

D.h., die Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ erzeugen bereits eine Gauß'sche Quadraturregel mit der Ordnung $2n+2$. □

Diese beiden Sätze besagen, dass die Charakterisierung von Gauß'schen Quadraturregeln durch Nullstellen orthogonaler Polynome eindeutig ist. Zum Abschluss müssen wir noch zeigen, dass überhaupt zu jedem Polynomgrad n orthogonale Polynome existieren, welche reelle Nullstellen im Intervall $(-1,1)$ besitzen.

Satz 9.61. *Durch die Vorschrift*

$$
\begin{aligned}
p_0(x) &\equiv 1, \\
p_n(x) &= x^n - \sum_{i=0}^{n-1} (x^n, p_i(x)) \frac{p_i(x)}{\int_{-1}^1 p_i^2(x)\, dx}, \quad n = 1, 2, \dots
\end{aligned}
\tag{9.22}
$$

ist eine Folge von orthogonalen Polynomen $p_n \in P^n$ mit $p_n \in x^n + P^{n-1}$ und der Orthogonalitätsbeziehung

$$\int_{-1}^1 p_k(x) p_l(x)\, dx = 0, \quad 0 \le l < k,$$

bestimmt. Die Polynome $\{p_k, k = 0, \dots, n\}$ bilden eine Orthogonalbasis des P_n.

Beweis: Der Raum der Polynome P^n ist ein $n+1$ dimensionaler Vektorraum und mit dem Skalarprodukt

$$(f, g) := \int_{-1}^1 f(x) g(x)\, \mathrm{d}x,$$

ein Hilbertraum. Durch die Monome $\{1, x, \dots, x^n\}$ ist eine Basis des P^n gegeben. Es lässt sich somit das Gram-Schmidt'sche Ortogonalisierungsverfahren aus Satz 4.6 anwenden. D.h., es gilt

$$p_0(x) \equiv 1,$$

und dann induktiv

$$p_n(x) = x^n - \sum_{i=0}^{n-1} (x^n, p_i(x)) \frac{p_i(x)}{\int_{-1}^1 p_i^2(x)\, \mathrm{d}x}.$$

Im Gegensatz zum üblichen Gram-Schmidt Verfahren fühen wir keine Normierung durch. Daher haben die Polynome p_n die gewünschte Form $p_n(x) \in x^n + P^{n+1}$.

Die Orthogonalität folgt aus dem Gram-Schmidt Verfahren. □

Dieses Resultat folgt unmittelbar aus einer Anwendung des Gram-Schmidt Verfahrens. Wir rechnen die Orthogonalitätsbeziehung dennoch separat nach:

Bemerkung 9.62 (Orthogonale Polynome)**.** *Es sei $0 \le l < k$. Wir weisen die Orthogonalität per Induktion nach k nach. Zunächst sei $k = 1$. Dann gilt mit (9.22)*

$$(p^1, p^0) = (x, 1) - (x, 1)\frac{(1,1)}{(1,1)} = 0.$$

Nun sei die Aussage wahr für ein $k \in \mathbb{N}$. Dann folgt für $0 \le l < k+1$:

$$(p_{k+1}, p_l) = (x^{k+1}, p_l) - \sum_{i=0}^{k} (x^{k+1}, p_i)(p_l, p_i)(p_i, p_i)^{-1}.$$

es gilt nach Induktionanfang $(p_l, p_i) = 0$ für $0 \le i < l \le k$. Daher folgt

$$(p_{k+1}, p_l) = (x^{k+1}, p_l) - (x^{k+1}, p_l)(p_l, p_l)(p_l, p_l)^{-1} = 0.$$

Die so hergeleiteten Polynome sind paarweise orthogonal, jedoch nicht bzgl. der L^2-Norm normiert. Stattdessen gilt eine Normierung über den Koeffizienten vor dem höchsten Monoms (stets 1).

Satz 9.63 (Nullstellen orthogonaler Polynome). *Die bezüglich des $L^2([-1,1])$-Skalarprodukts orthogonalen Polynome p_n besitzen reelle, einfache Nullstellen im Intervall $(-1,1)$.*

Beweis: Der Beweis wird über Widerspruchsargumente geführt. Die Polynome $p_n(x)$ sind alle reellwertig.

(i) Wir nehmen zunächst an, dass p_n eine reelle Nullstelle λ hat, die aber nicht im Intervall $(-1,1)$ liegt. Wir definieren

$$q(x) := \frac{p_n(x)}{x-\lambda}.$$

Die Funktion q ist ein Polynom $q \in P_{n-1}$. Daher gilt $q \perp p_n$. Dies impliziert

$$0 = (q, p_n) = \int_{-1}^{1} \frac{p_n^2(x)}{x-\lambda}\, dx.$$

Dies ist aber ein Widerspruch, da $p_n(x)^2$ auf $[-1,1]$ stets positiv ist (da p_n reellwertig ist), noch die Nullfunktion ist, und darüber hinaus der Faktor $(x-\lambda)^{-1}$ keinen Vorzeichenwechsel haben kann, da λ außerhalb von $[-1,1]$ liegt. Deshalb kann p_n keine Nullstelle außerhalb von $(-1,1)$ haben.

(ii) Im zweiten Teil zeigen wir, dass im Intervall $(-1,1)$ nur einfache und reelle Nullstellen liegen. Wir arbeiten wieder mit einem Widerspruchsargument. Wir nehmen an, dass p_n eine Nullstelle λ besitzt, die entweder mehrfach oder nicht reell ist. Falls λ nicht reell ist, so ist auch durch $\bar{\lambda}$ eine Nullstelle gegeben. In beiden Fällen definieren wir

$$q(x) := \frac{p_n(x)}{(x-\lambda)(x-\bar{\lambda})} = \frac{p_n(x)}{|x-\lambda|^2}.$$

Das Polynom $q(x)$ liegt in P_{n-2}. Es gilt

$$0 = (p_n, q) = \int_{-1}^{1} \frac{p_n^2(x)}{|x-\lambda|^2}\, dx.$$

Wieder folgt ein Widerspruch, da p_n^2 und $|x-\lambda|^2$ beide größer gleich Null, nicht aber die Nullfunktion sind. □

Mit diesen Vorarbeiten sind wir in der Lage den Hauptsatz dieses Abschnitts zu aufzustellen:

Satz 9.64 (Existenz und Eindeutigkeit der Gaußquadratur). *Zu $n \in \mathbb{N}$ existiert eine eindeutige Gaußquadraturformel der Ordnung $2n+2$ mit $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen, die als Nullstellen des orthogonalen Polynoms $p_{n+1} \in P_{n+1}$ gegeben sind.*

Beweis: Der Beweis besteht aus der Zusammenfassung der bisherigen Resultate:

- Satz 9.61 liefert die eindeutige Existenz des orthogonalen Polynoms $p_{n+1} \in P_{n+1}$.
- Satz 9.63 garantiert, dass dieses Polynom $n+1$ paarweise verschiedene, reelle Nullstellen besitzt.
- Satz 9.60 besagt, dass durch Wahl der Nullstellen als Stützstellen bei entsprechenden Gewichten eine Quadraturformel der Ordnung $2n+2$, also eine Gauß-Quadratur gegeben ist, siehe Definition 9.58.
- Schließlich besagt Satz 9.59, dass nur durch diese Wahl der Stützstellen eine Gauß-Quadraturformel erzeugt wird, liefert also die Eindeutigkeit des Konstruktionsprinzips.

Damit ist der Beweis geführt. □

Ein Nachteil der Newton-Cotes-Formeln sind negative Gewichte ab $n \geq 7$ für geschlossene Formeln. Die Gaußquadraturgewichte hingegen sind stets positiv:

Satz 9.65 (Gewichte der Gauß-Quadratur)**.** *Die Gewichte der Gaußquadratur zu den Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ sind stets positiv und es gilt*

$$\alpha_k = \int_{-1}^{1} L_k^{(n)}(x)\, dx = \int_{-1}^{1} L_k^{(n)}(x)^2\, dx > 0$$

Beweis: Es sei durch $I_G^n(f) = \sum_k \alpha_k f(x_k)$ die Gauß-Quadratur zu den $n+1$ Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ gegeben. Für die Lagrangeschen Basispolynome gilt

$$L_i^{(n)}(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad L_i^{(n)}(x_k) = \delta_{ik}.$$

Es gilt $L_i^{(n)} \in P_n$, also wird auch $(L_i^{(n)})^2$ von der Gauss-Formel exakt integriert. Somit ist

$$0 < \int_{-1}^{1} L_k^{(n)}(x)^2\, \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_k^{(n)}(x_i)^2 = \alpha_k.$$

□

Die Gauß'schen Quadraturformeln haben neben der hohen Ordnung den weiteren Vorteil, dass bei beliebiger Ordnung alle Gewichte positiv sind, also keine Auslöschung auftritt.

Weiter haben wir gesehen, dass die die Newton-Cotes Formeln unter dem gleichen Mangel wie die Lagrangesche Interpolation leidet: falls die Ableitungen des Integranden zu schnell steigen, so muss keine Konvergenz bei steigendem Polynomgrad vorliegen. Im Fall der Gauss-Quadratur erhalten wir hingegen Konvergenz des Integrals:

Satz 9.66 (Konvergenz der Gauss-Quadratur)**.** *Es sei* $f \in C^\infty([-1,1])$*. Die Folge* $(I^{(n)}(f))_n,\ n = 1, 2, \dots$ *der Gaußformeln zur Berechnung von*

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

ist konvergent:

$$I^{(n)}(f) \to I(f) \quad (n \to \infty).$$

Beweis: Es gilt

$$I^{(n)}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} f(x_i^{(n)}), \quad \alpha_i^{(n)} > 0, \quad \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^{(n)} = 2.$$

Es sei $\epsilon > 0$. Nach dem Approximationssatz von Weierstraß gibt es ein $p \in P_m$ (wobei m hinreichend groß), so dass

$$\max_{-1 \le x \le 1} |f(x) - p(x)| \le \frac{\epsilon}{4}.$$

Für hinreichend großes $2n+2 > m$ gilt $I(p) - I_G^n(p) = 0$. Damit folgern wir

$$|I(f) - I^{(n)}(f)| \le \underbrace{|I(f-p)|}_{\le \frac{\epsilon}{4}\cdot 2} + \underbrace{|I(p) - I^{(n)}(p)|}_{=0} + \underbrace{|I^{(n)}(p-f)|}_{\le \frac{\epsilon}{4}\cdot 2} \le \epsilon.$$

Da $\epsilon > 0$ beliebig gewählt worden ist, muss $I^{(n)}(f) \to I(f)$ für $n \to \infty$ konvergieren. □

Schließlich beweisen wir noch ein optimales Resultat für den Fehler der Gauß-Quadratur:

Satz 9.67 (Fehlerabschätzung der Gauß-Quadratur)**.** *Es sei* $f \in C^{2n+2}[a,b]$*. Dann lautet die Restglieddarstellung zu einer Gaußquadraturformel der Ordnung* $2n+2$ *:*

$$R^{(n)}(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b p_{n+1}^2(x)\,dx$$

für $\xi \in [a,b]$ *und mit* $p_{n+1} = \prod_{j=0}^{n}(x - \lambda_j)$*.*

Beweis: Der Beweis erfolgt unter Zuhilfenahme der Hermite-Interpolation (siehe Satz 9.16). Hiernach existiert ein Polynom $h \in P_{2n+1}$ zu einer zu interpolierenden Funktion $f \in C^{2n+2}[-1,1]$, welches die Hermitesche Interpolationsaufgabe löst, mit den Interpolationsbedingungen

$$h(\lambda_i) = f(\lambda_i), \quad h'(\lambda_i) = f'(\lambda_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Hierzu lautet die (bereits bekannte) Restglieddarstellung

$$f(x) - h(x) = f[\lambda_0, \lambda_0, \dots, \lambda_n, \lambda_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x - \lambda_j)^2.$$

Wendet man nun die Gaußsche-Quadraturformel auf $h(x)$ an, dann gilt zunächst $I_G^{(n)}(h) = I(h)$, und weiter unter Anwendung des Mittelwertsatzes der Integralrechnung

$$\begin{aligned} I(f) - I_G^{(n)}(f) &= I(f-h) - I_G^{(n)}(f-h) \\ &= \int_{-1}^{1} f[\lambda_0, \lambda_0, \dots, \lambda_n, \lambda_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x-\lambda_j)^2 \, dx - \sum_{i=0}^{n} a_i [f(\lambda_i) - h(\lambda_i)] \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^{1} \prod_{j=0}^{n} (x-\lambda_j)^2 \, dx. \end{aligned}$$

Der Mittelwertsatz darf hier angewendet werden, da stets $\prod_{j=0}^{n}(x-\lambda_j)^2 \geq 0$. Der Term $[f(\lambda_i) - h(\lambda_i)] = 0$, da hier die Interpolationsbedingungen ausgenutzt worden sind. Damit ist alles gezeigt. $\square$

Bemerkung 9.68 (Zur Regularität in der Fehlerformel). *Für die Gauß-Quadratur gelten die gleichen Anforderungen wie für alle anderen Integrationsmethoden: um die volle Ordnung $2n+2$ zu erreichen, muss die zu integrierende Funktion $f(x)$ entsprechend regulär sein, also $f \in C^{2n+2}[a,b]$. Liegt diese Regularität nicht vor, so kann die Gauß-Quadratur nicht die volle Ordnung entfalten. In diesem Fall ist eine summierte Formel von niedriger Ordnung (durchaus auch eine Gauß-Formel) angebracht.*

Nachdem wir nun das theoretische Fundament der Gaußquadratur bereitgestellt haben verbleibt im finalen Schritt die explizite Angabe der Stützstellen sowie der (Quadratur)-Gewichte. Hierzu definieren wir die Legendre-Polynome.

Legendre-Polynome und zweistufige Orthogonalisierung

Für die bezüglich des $L^2(-1,1)$ orthogonalen Polynome lässt sich eine geschlossene Formel angeben:

Satz 9.69 (Legendre-Polynome)**.** *Die aus der Monombasis $\{1, x, x^2, \dots\}$ mit dem Gram-Schmidt-Verfahren (ohne Normierung) erstellte Orthogonalbasis $\{p_0, \dots, p_k\}$ hat die explizite Darstellung*

$$p_k(x) := \frac{k!}{(2k)!}\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k. \tag{9.23}$$

Für diese Polynome gilt

$$\|p_k\| = \frac{k!^2}{(2k)!}\sqrt{\frac{2^{2k+1}}{2k+1}}, \quad p_k(1) = \frac{2^k k!^2}{(2k)!}. \tag{9.24}$$

Sie lassen sich durch eine zweistufige Rekursionsformel berechnen

$$\begin{aligned} & p_0(x) = 1 \\ & p_1(x) = x \\ k = 1, \dots, n-1: \qquad & p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \frac{k^2}{4k^2-1}p_{k-1}(x). \end{aligned} \tag{9.25}$$

Durch Normierung bei $x = 1$ sind die Legendre-Polynome *$L_n \in P_n$ definiert*

$$L_k(x) := \frac{(2k)!}{2^k k!^2}p_k(x), \quad L_k(1) = 1.$$

Beweis: *(i)* Wir zeigen zunächst per partieller Differentiation die Orthogonalität. Es gilt für $k \geq l$

$$\begin{aligned} \frac{(2k!)(2l)!}{k!l!}(p_k, p_l) &= \Big(d^k(x^2-1)^k, d^l(x^2-1)^l\Big) \\ &= \underbrace{d^{k-1}(x^2-1)^k \cdot d^l(x^2-1)^l\Big|_{-1}^{1}}_{=0} - \Big(d^{k-1}(x^2-1)^k, d^{l+1}(x^2-1)^l\Big), \end{aligned}$$

da $d^s(x^2-1)^k$ für $s < k$ stets den Faktor $x^2 - 1$ enthält. Nach $l \leq k$-facher partieller Differentiation ergibt sich daher

$$\frac{(2k!)(2l)!}{k!l!}(p_k, p_l) = (-1)^l\Big(d^{k-l}(x^2-1)^k, d^{2l}(x^2-1)^l\Big) \tag{9.26}$$

Für $k = l$ folgern wir hieraus

$$\frac{(2k)!^2}{k!^2}\|p_k\|^2 = (-1)^k\Big((x^2-1)^k, 1\Big)(2k)! = (-1)^k(2k)!\int_{-1}^{1}(x^2-1)^k\,\mathrm{d}x, \tag{9.27}$$

also

$$\|p_k\|^2 = (-1)^k\frac{k!^2}{(2k)!}\int_{-1}^{1}(x^2-1)^k\,\mathrm{d}x. \tag{9.28}$$

Das Integral berechnet sich als

$$\int_{-1}^{1}(x^2-1)^k\,\mathrm{d}x = (-1)^k\frac{\Gamma(k+1)\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{2}+k\right)} = (-1)^k\frac{k!(k+1)!2^{2k+2}}{(2(k+1))!}.$$

Zusammen mit (9.28) folgt

$$\|p_k\|^2 = \frac{k!^4 2^{2k+1}}{(2k)!^2(2k+1)},$$

und somit die Darstellung (9.24).

Falls $k > l$ folgt aus (9.26) bei weiterer partieller Differentiation

$$\frac{(2k!)(2l)!}{k!l!}(p_k, p_l)$$
$$= \underbrace{(-1)^l d^{k-l-1}(x^2-1)^k \cdot d^{2l}(x^2-1)^l \Big|_{-1}^{1}}_{=0} - (-1)^l \Big(d^{k-l-1}(x^2-1)^k, \underbrace{d^{2l+1}(x^2-1)^l}_{=0} \Big)$$

die Orthogonalität.

(ii) Die Normierung an $x = 1$ ist klar für $k = 0$ sowie $k = 1$. Rekursiv folgt

$$\begin{aligned}
p_{k+1}(1) = 1 \cdot \frac{2^k k!^2}{(2k)!} - \frac{k^2}{4k^2-1}\frac{2^{k-1}(k-1)!^2}{(2(k-1))!} &= \frac{2^k k!^2}{(2k)!} - \frac{2^{k-1}k!^2}{(2k-1)(2k+1)(2(k-1))!} \\
&= \frac{2^k k!^2 (2k+1)(2k+2)}{(2(k+1))!} - \frac{2^{k-1}k!^2 2k(2k+2)}{(2(k+1))!} \\
&= \frac{2^{k+1}(k+1)!^2}{(2(k+1))!}\left(\frac{(2k+1)}{k+1} - \frac{k}{k+1}\right) = \frac{2^{k+1}(k+1)!^2}{(2(k+1))!}
\end{aligned}$$

(iii) Der führende Koeffizient ist eins, also

$$p_k(x) = x^k \pm \dots.$$

Mit der Normierung des führenden Koeffizienten sind die aus der Monombasis orthogonalisierten Polynome eindeutig bestimmt.

(iv) Es bleibt der Nachweis der 2-stufigen Rekursionsformel. Diese werden mit Hilfe eines allgemeinen Prinzips herleiten und den Beweis später abschließen. □

Einschub: 2-stufige Orthogonalisierung Es sei für das Folgende V ein allgemeiner, endlich- oder abzählbar unendlich dimensionaler Vektorraum, also z.B. der Raum der Polynome (bis zu einem Grad n). Weiter sei durch $A : V \to V$ eine Abbildung auf V gegeben. Wir definieren

Definition 9.70 (Krylow-Unterraum)**.** *Es sei $A : V \to V$ und $d \in V$. Dann bezeichnen wir mit*

$$K_l(d, A) := \text{span}\{d, Ad, \dots, A^{l-1}d\} \subset V,$$

den Krylow-Unterraum*.*

Am Beispiel der Polynome wählen wir z.B. $d = 1$, also das konstante Monom und die Abbildung $A : P_k \to P_{k+1}$ als

$$p(z) \mapsto zp(z).$$

Dann ist der Krylov-Raum $K_k(1, z)$ gerade der Polynomraum P_{k-1}. Krylov-Räume treten hauptsächlich beim Lösen linearer Gleichungssysteme $Ax = b$ auf. Im $V = \mathbb{R}^n$ ist dann für einen Vektor $d \in \mathbb{R}^n$ der Krylow-Raum gegeben als

$$K_l(d, A) = \{d, Ad, A^2d, \dots, A^{l-1}d\}.$$

Hier wird klar, dass die Räume für $l \to \infty$ nicht unbedingt immer größer werden können. Spätestens für $l = n$ gilt $K_{n+1}(d, A) \subset K_n(d, A)$.

Es gilt

Satz 9.71 (Zweistufige Orthogonalisierung)**.** *Es sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt $(\cdot,\cdot)$ und induzierter Norm $\|\cdot\|$. Es sei $A : V \to V$ so gegeben, dass gilt*

$$(Ax, y) = (x, Ay) \quad \forall x, y \in V. \tag{9.29}$$

Für ein $d \in V$ lässt sich eine Orthonormalisierung $\{q_1, \dots, q_l\}$ des Krylow-Raums $K_l(d, A)$ in folgendem zweistufigen Verfahren berechnen:

$$\begin{aligned}
&& q_1 &:= \frac{d}{\|d\|} \\
&& \tilde{q}_2 &:= Aq_1 - (Aq_1, q_1)q_1, \quad q_2 := \frac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|} \\
i = 3, \dots, l: && \tilde{q}_i &:= Aq_{i-1} - (Aq_{i-1}, q_{i-1})q_{i-1} - (Aq_{i-1}, q_{i-2})q_{i-2}, \quad q_l := \frac{\tilde{q}_l}{\|\tilde{q}_l\|}.
\end{aligned}$$

Beweis: Wir führen den Beweis durch Induktion. Hierzu sei

$$q_1 := \frac{d}{\|d\|}.$$

Angenommen, nun sei durch $q_1, \dots, q_l$ eine Orthonormalbasis des $K_l(d, A)$ gegeben. Wir betrachten zwei Fälle: *Fall 1:* Es gilt $K_{l+1}(d, A) \subset K_l(d, A)$, d.h. der Krylow-Raum wird nicht größer und das Verfahren bricht ab, da die Orthonormalbasis $\{q_1, \dots, q_l\}$ bereits gegeben ist.

Fall 2: Krylow-Raum $K_{l+1}(d, A)$ ist größer als $K_l(d, A)$.

(i) Wir zeigen zunächst durch ein Widerspruchsargument, dass $Aq_l \notin K_l(d, A)$ liegt. Denn angenommen es sei $Aq_l \in K_l(d, A)$. Dann existieren Koeffizienten $\alpha_1, \dots, \alpha_l \in \mathbb{R}$ mit

$$Aq_l = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i q_i \quad \Rightarrow \quad (Aq_l, q_j) = \alpha_j \quad j = 1, \dots, l,$$

da die $q_1, \dots, q_l$ eine Orthonormalbasis bilden. Mit (9.29) folgt

$$\alpha_l = (Aq_l, q_j) = (q_l, \underbrace{Aq_j}_{\in K_{j+1}(d,A)}) = 0 \text{ für } j = 1, \dots l-1,$$

und somit im Gegensatz zur Annahme

$$Aq_l = \alpha_l q_l \in K_l(d, A).$$

(ii) Wir orthogonalisieren $Aq_l \in K_{l+1}(d, A)$ bzgl. $q_1, \dots, q_l$ gemäß

$$\tilde{q}_{l+1} := Aq_l - \sum_{i=1}^{l} \beta_i q_i.$$

Dies ergibt

$$0 \overset{!}{=} (\tilde{q}_{l+1}, q_j) = (Aq_l, q_j) - \beta_j \quad j = 1, \dots, l,$$

wieder da die $q_1, \dots, q_l$ eine Orthonormalbasis bilden. Weiter gilt

$$\beta_j = (Aq_l, q_j) = (q_l, \underbrace{Aq_j}_{\in K_{j+1}(d,A)}) = 0 \text{ für } j = 1, \dots, l-2.$$

Hieraus lesen wir die Iterationsvorschrift ab:

$$\tilde{q}_2 = Aq_1 - (Aq_1, q_1)q_1,$$

sowie

$$\tilde{q}_{l+1} = Aq_l - (Aq_l, q_l)q_l - (Aq_l, q_{l-1})q_{l-1}$$

für $l > 1$. □

Im Folgenden werden wir dieses Resultat auf die Legendre-Polynome anwenden. Zunächst gilt:

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \big(tp_k(t), p_k(t)\big)p_k(x) - \big(tp_k(t), p_{k-1}(t)\big)p_{k-1}(x).$$

Anhand der Darstellung (9.23) folgt, dass p_k entweder eine gerade oder ungerade Funktion ist. Denn $(x^2-1)^k$ ist gerade und die k-te Ableitung ist gerade wenn k gerade ist, ansonsten ungerade. Damit ist p_k^2 eine gerade und xp_k^2 eine ungerade Funktion mit Mittelwert Null. Also gilt die 2-stufige Rekursion:

$$p_{k+1}(x) = xp_k(x) - \big(tp_k(t), p_{k-1}(t)\big)p_{k-1}(x).$$

Wir berechnen den Faktor $\gamma_k = \big(tp_k(t), p_{k-1}(t)\big)$ indirekt. Mit (9.24) gilt

$$\frac{2^{k+1}(k+1)!^2}{(2(k+1))!} = \frac{2^k k!^2}{(2k)!} - \gamma_k \frac{2^{k-1}(k-1)!^2}{(2(k-1))!},$$

also

$$\frac{4k^2(k+1)^2}{(2k-1)2k(2k+1)(2k+2)} = \frac{2k^2}{(2k-1)2k} - \gamma_k,$$

und schließlich

$$\gamma_k = \frac{k}{2k-1} - \frac{k(k+1)}{(2k-1)(2k+1)} = \frac{k^2}{4k^2-1}.$$

Hiermit ist der Beweis zu Satz 9.69 nun abgeschlossen.

Mit den Legendre-Polynomen existiert eine explizite Darstellung für die orthogonalen Polynome bezüglich des $L^2([-1,1])$-Skalarprodukts. Die ersten Legendre-Polynome lauten:

$$\begin{aligned}
L_0(x) &= 1, \\
L_1(x) &= x, & x_0 &= 0 \\
L_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2-1), & x_{0/1} &= \pm\sqrt{\frac{1}{3}}, \\
L_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3-3x), & x_0 &= 0,\ x_{1/2} = \pm\sqrt{\frac{3}{5}} \\
L_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3), & x_{0/1} &\approx \pm 0.861136,\ x_{2/3} \approx \pm 0.339981
\end{aligned}$$

Für die Nullstellen (also die Quadratur-Stützstellen) existiert keine geschlossene Formel. Im Fall $n > 3$ können die Nullstellen nur noch numerisch berechnet werden.

Die entsprechenden Quadraturgewichte können einfach über die Formel (9.16) berechnet werden

$$\alpha_k = \int_{-1}^{1} \prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}\,\mathrm{d}x.$$

In Tabelle 9.3 fassen wir die Stützstellen und Gewichte der ersten Gauß-Legendre Regeln zusammen.

$n-1$	x_i	α_i	Ordnung
0	0	2	2
1	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1	4
2	0	$\frac{8}{9}$	
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$	6
3	± 0.8611363116	0.347854845	
	± 0.3399810436	0.652145154	8
4	0	0.568888889	
	± 0.9061798459	0.236926885	
	± 0.5384693101	0.478628670	10

Tabelle 9.3.: Einige Gauß-Legendre Quadratur-Regeln.

Gauß-Tschebyscheff Quadratur

Die Gauß'schen Quadraturformeln sind so konstruiert, dass Polynome bis zu einem bestimmten Grad exakt integriert werden können. Oft sind die zu integrierenden Funktionen überhaupt keine Polynome, z.B.

$$f(x) = \sqrt{1-x^2},$$

auf dem Intervall $[-1,1]$. Die Ableitungen dieser Funktion haben an den Intervallenden Singularitäten. Die einfache Gauß-Quadratur ist zur Approximation von $\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x$ nicht geeignet, da hohe Regularität vorausgesetzt wird.

Die Idee der Gauß-Quadratur kann verallgemeinert werden. Ziel ist die möglichst effiziente Quadratur von Funktionen, welche nach der Art

$$f(x) = \omega(x)p(x),$$

zusammengesetzt sind, wobei $p(x)$ ein Polynom ist und $\omega(x)$ eine *Gewichtsfunktion*. Mit Hilfe dieser Gewichtsfunktion definieren wir ein modifiziertes Skalarprodukt:

Satz 9.72 (Gewichtetes Skalarprodukt)**.** *Durch* $\omega \in L^\infty([-1,1])$ *sei eine positive*

$$\omega(x) > 0 \quad \textit{fast überall},$$

Gewichtsfunktion gegeben. Dann ist durch

$$(f,g)_\omega := \int_{-1}^{1} \omega(x)\, f(x)\, g(x)\, dx,$$

ein Skalarprodukt gegeben.

Beweis: Übung! □

Wir können nun die Konstruktion der Gauss-Legendre Formeln mit Hilfe des gewichteten Skalarprodukts durchführen. Angenommen, durch $p_{n+1}^\omega(x)$ sei ein entsprechendes orthogonales Polynom gegeben, d.h.

$$(p_{n+1}^\omega, q)_\omega = (\omega p_{n+1}^\omega, q) = 0 \quad \forall q \in P_n.$$

Satz 9.63 kann unmittelbar übertragen werden, d.h. p_{n+1}^ω hat $n+1$ paarweise verschiedene Nullstellen in $(-1,1)$. Laut Satz 9.60, welcher ebenfalls sofort übertragen werden kann bilden diese Nullstellen eine Gauß'sche Quadraturformel für Integrale der Art

$$\int_{-1}^{1} \omega(x) f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Wir können die gleiche Argumentation wie bei den Gauß-Legendre Formeln anwenden.

Die Gauß-Tschebyscheff Quadratur wählt als spezielles Gewicht die Funktion

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Diese Funktion legt ein starkes Gewicht auf die beiden Intervallenden. Es gilt:

Satz 9.73 (Tschebyscheff-Polynome)**.** *Die* Tschebyscheff-Polynome $T_n \in P_n$ *mit*

$$T_n(x) := \cos(n \arccos x), \quad -1 \le x \le 1,$$

sind die bezüglich des $(\cdot,\cdot)_\omega$ *Skalarprodukts orthogonalisierten Monome* $\{1, x, \dots\}$ *mit der Gewichtsfunktion*

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Die n paarweise verschiedenen Nullstellen des n-ten Tschebyscheff-Polynoms $T_n(x)$ sind gegeben durch

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right), \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Auf dem Intervall $\mathbb{R} \setminus [-1,1]$ *haben die Tschebyscheff-Polynome die Darstellung*

$$T_n(x) = \frac{1}{2}\Big[(x + \sqrt{x^2-1})^n + (x - \sqrt{x^1-1})^n\Big].$$

Beweis: *(i)* Wir müssen zunächst nachweisen, dass durch $T_n(x)$ überhaupt Polynome gegeben sind. Wir führen den Beweis induktiv durch Herleiten einer Iterationsformel für die T_n. Es gilt:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x,$$

also insbesondere $T_0 \in P_0$ und $T_1 \in P_1$. Aus dem Additionstheorem für die Kosinusfunktion

$$\cos((n+1)y) + \cos((n-1)y) = 2\cos(ny)\cos(y),$$

erhalten wir mit $y = \arccos x$ eine zweistufige Rekursionsformel:

$$T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2xT_n(x) \quad \Rightarrow \quad T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x).$$

Hieraus schließen wir induktiv $T_n \in P_n$ mit

$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \dots.$$

(ii) Wir weisen nun die Orthogonalität der Tschebyscheff-Polynome bzgl. des gewichteten Skalarprodukts auf $[-1,1]$ nach. Mit $x = \cos(t)$ gilt unter Ausnutzung der Orthogonalität trigonometrischer Polynome:

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \int_0^{\pi} \cos(nt)\,\cos(mt)\,dt = \begin{cases} \pi, & n = m = 0, \\ \frac{\pi}{2}, & n = m > 0, \\ 0, & n \ne m. \end{cases}$$

(iii) Die Nullstellen der Tschebyscheff-Polynome können unmittelbar aus der expliziten Darstellung berechnet werden.

(iv) Die zweite Darstellung der Tschebyscheff-Polynome kann ebenso auf die Iterationsformel zurückgeführt werden. □

Schließlich müssen noch die Gewichte der Gauß-Tschebyscheff-Formeln bestimmt werden:

Satz 9.74 (Gewichte der Gauß-Tschebyscheff-Quadraturformeln)**.** *Für die Gewichte α_k der Gauß-Tschebyscheff-Quadratur mit n Stützstellen gilt*

$$\alpha_k = \frac{\pi}{n}, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Beweis: Die Funktionen

$$\frac{T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}, \quad m = 0, \dots, n-1,$$

werden von den Tschebyscheff-Formel mit n Stützstellen exakt integriert. D.h., es gilt

$$\sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k T_m(x_k) = \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} \,\mathrm{d}x, \quad m = 0, \dots, n-1.$$

Mit Satz 9.73 folgt

$$\sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k \cos\Big(\frac{(2k+1)m}{2n}\pi\Big) = \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} \,\mathrm{d}x, \quad m = 0, \dots, n-1,$$

mit (Nachrechnen)

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} \,\mathrm{d}x = \begin{cases} \pi & m = 0, \\ 0 & m = 1, \dots, n-1 \end{cases}.$$

Aus diesen Gleichungen kann ein lineares Gleichungssystem in den $\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1}$ mit den Lösungen $\alpha_k = \pi/n$ hergeleitet werden. □

Damit haben wir alle Komponenten gesammelt, um die Gauß-Tschebyscheff Formel inklusive Restglied anzugeben:

Verfahren 9.75 (Gauß-Tschebyscheff-Formel)**.** *Die Gauß-Tschebyscheff-Formel vom Grad $2n$ mit Restglied lautet*

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, dx = \frac{\pi}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(\cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right)\right) + \frac{\pi}{2^{2n-1}(2n)!} f^{(2n)}(\xi)$$

mit $\xi \in [-1, 1]$.

Beweis: Die Quadraturformel folgt sofort aus Einsetzen der Stützstellen und Gewichte in die allgemeine Definition einer Quadraturformel. Die Restglieddarstellung folgt aus Satz 9.67. □

Die Gauß-Tschebyscheff Quadratur hat den Vorteil, dass Stützstellen und Gewichte unmittelbar explizit angegeben werden können. Sie sind natürlich auf den Spezialfall von Funktionen zugeschnitten, die am Rande des Integrationsbereiches Singularitäten haben.

Beispiel 9.76. *Wir verwenden die Gauss-Tschebyscheff-Quadratur zur Berechnung des Integrals (halber Kreisinhalt)*

$$I(f) = \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\,dx = \int_{-1}^{1} \omega(x)\underbrace{(1-x^2)}_{=:f(x)}\,dx,$$

mit dem Gauss-Tschebyscheff-Gewicht $\omega(x)$ *und* $(1-x^2) \in P_2$*. Da* $f \in P_2$ *wählen wir* $n = 2$ *im Verfahren 9.75 zur exakten Berechnung des Integrals. D.h.*

$$\int_{-1}^{1} \omega(x) f(x)\,dx \approx \frac{\pi}{2}\sum_{k=0}^{1} f\left(\cos\left(\frac{2k+1}{2\cdot 2}\pi\right)\right)$$

mit $\xi \in (-1,1)$ *und den Quadraturgewichten* $a_0 = a_1 = \frac{\pi}{2}$*. Wir erhalten*

$$\begin{aligned}
I(f) &= \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\,dx = \int_{-1}^{1} \omega(x)(1-x^2)\,dx \\
&= \frac{\pi}{2}\sum_{k=0}^{1}\left(1 - \left(\cos\left(\frac{2k+1}{4}\pi\right)\right)^2\right) \\
&= \frac{\pi}{2}\left(\left(1-\cos\left(\frac{1}{4}\pi\right)^2\right) + \left(1-\cos\left(\frac{3}{4}\pi\right)^2\right)\right) \\
&= \frac{\pi}{2}\left((1-0.5)+(1-0.5)\right) \\
&= \frac{\pi}{2},
\end{aligned}$$

d.h., das Integral wird exakt berechnet.

Bemerkung 9.77 (Normierung des Integrationsintervalls)**.** *Die Gauß-Quadratur mit Legendre-Polynomen und Tschebyscheff Polynomen ist lediglich auf dem Intervall* $[-1,1]$ *definiert. Allerdings bedeutet dies keine Einschränkung für den allgemeinen Fall* $[a,b]$*. Jedes endlich-dimensionale Intervall* $[a,b]$ *kann durch die Transformation*

$$x = 2\frac{t-a}{b-a} - 1, \quad t \in [a,b]$$

in $[-1,1]$ *überführt werden. Mit der Wahl* $x \in [-1,1]$ *wird dann die Integration in* $[-1,1]$ *durchgeführt, um anschließend durch die Rücktransformation*

$$t = \frac{(x+1)(b-a)}{2} + a, \quad x \in [-1,1]$$

die (berechneten) Werte für $t \in [a,b]$ *zu erhalten.*

Korollar 9.78 (Transformation des Integrationsintervalls)**.** *Mit den Voraussetzungen aus Bemerkung 9.77 gilt für das (exakte) Integral*

$$I(f) = \int_a^b f(t)\,dt = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left[\frac{(x+1)(b-a)}{2} + a\right] dx.$$

Die Quadraturformel zur Integration von $I(f)$ lautet dann

$$I^n(f) = \frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^{n} a_k f\left[\frac{(x_k+1)(b-a)}{2} + a\right].$$

9.6. Bestapproximation

Bisher haben wir uns im Wesentlichen mit der Interpolation beschäftigt. Die Approximation ist weiter gefasst: wir suchen eine einfache Funktion $p \in P$ (dabei ist der Funktionenraum P meist wieder der Raum der Polynome), welche die *beste Approximation* zu gegebener Funktion f oder zu gegebenen diskreten Daten $y_i \in \mathbb{R}$ darstellt. Der Begriff beste Approximation ist dabei weit gefasst. Wir verstehen unter ihm den minimalen Abstand von p zu f (oder zu den diskreten Daten) in einer Norm. Die allgemeine Approximationsaufgabe besteht nun im Auffinden von $p \in P$, so dass

$$\|f - p\| = \min_{q \in P} \|f - q\|.$$

Die Wahl der Norm $\|\cdot\|$ ist dabei zunächst beliebig. Es stellt sich jedoch heraus, dass die mathematische Approximationsaufgabe je nach betrachteter Norm einer sehr unterschiedliche Vorgehensweise bedarf. Eine spezielle Approximationsaufgabe haben wir bereits kennengelernt:

Bemerkung 9.79 (Lagrange-Interpolation als Approximation)**.** *Angenommen, in den $n+1$ paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_n$ soll für das Polynom $p_n \in P_n$ gelten $p(x_i) = f(x_i)$, dann definieren wir die Norm:*

$$|p|_n := \max_{i=0,\dots,n} |p(x_i)|.$$

Man kann zeigen, dass dies wirklich eine Norm auf dem Polynomraum P_n ist. Die Approximationsaufgabe: suche $p \in P_n$, so dass

$$|p - f|_n = \min_{q \in P_n} |q - f|_n,$$

ist gerade die Lagrange-Interpolationsaufgabe.

In diesem Abschnitt werden wir uns hingegen hauptsächlich mit der L^2-Norm

$$\|f\|_{L^2([a,b]} := \left(\int_a^b f(x)^2 \, \mathrm{d}x \right)^{\frac{1}{2}},$$

sowie mit der Maximumsnorm

$$\|f\|_\infty := \max_{x \in [a,b]} |f(x)|,$$

befassen. Die beste Approximation in der L^2-Norm taucht in der Analysis in Form der *Fourier-Entwicklung* in trigonometrischen Polynomen auf, Konvergenz wird hier bezüglich der L^2-Norm

$$\|f - f_n\|_{L^2([a,b])} \to 0 \quad (n \to \infty),$$

gezeigt. Die Approximation bezüglich der Maximumsnorm ist für die praktische Anwendung von großer Bedeutung: denn eine Approximation, die den Fehler gleichmäßig auf dem gesamten Intervall $[a,b]$ unter Kontrolle hält, schließt die typischen Oszillationen der Lagrange-Interpolation an den Intervallenden (siehe Beispiel 9.15) systematisch aus. Es zeigt sich allerdings, das gerade dieser für die Anwendung wichtige Approximationsbegriff mathematisch schwer zu greifen ist.

9.6.1. Gauss-Approximation: Beste Approximation in der L^2-Norm

Zunächst betrachten wir die beste Approximation einer Funktion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ mit Polynomen $p \in P$ bezüglich der L^2-Norm:

$$\|f - p\|_{L^2([a,b])} = \min_{\phi \in P} \|f - \phi\|_{L^2([a,b])}.$$

Die L^2-Norm kann mittels $\|f\|_{L^2} = (f,f)^{\frac{1}{2}}$ über das L^2-Skalarprodukt definiert werden. Vektorräume mit Skalarprodukt heißen *Prähilbertraum*. Speziell in reellen Vektorräumen spricht man von *euklidischen Räumen*, im Komplexen auch von *unitären Räumen*. Das Skalarprodukt dient zur Beschreibung von Orthogonalitätsbeziehungen. Für die Approximation bezüglich der L^2-Norm gilt die folgende Charakterisierung:

Satz 9.80 (Approximation und Orthogonalität). *Es sei $f \in C[a,b]$ und $S \subset C[a,b]$ ein endlich dimensionaler Unterraum. Es sei durch*

$$(f,g) := \int_a^b f(x)g(x)\,dx, \quad \|f\| = (f,f)^{\frac{1}{2}},$$

das L^2-Skalarprodukt mit zugehöriger Norm gegeben. Dann ist $p \in S$ beste Approximation zu $f \in C[a,b]$

$$\|f - p\| = \min_{\phi \in S} \|f - \phi\|,$$

genau dann, wenn der Fehler $f - p$ orthogonal auf dem Raum S steht:

$$(f - p, \phi) = 0 \quad \forall \phi \in S.$$

Beweis: *(i)* Wir zeigen zunächst, dass jede beste Approximation $p \in S$ die Orthogonalitätsbedingung erfüllt. Die quadratische Funktion

$$F_\phi(t) := \|f - p - t\phi\|^2 = (f - p - t\phi, f - p - t\phi), \quad t \in \mathbb{R}$$

hat für jedes fest gewählte $\phi \in S$ bei $t = 0$ ein Minimum. D.h., $t = 0$ muss stationärer Punkt sein:

$$\frac{d}{dt} F_\phi(t)\Big|_{t=0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} F_\phi(t) = -2(f - p - t\phi, \phi)$$

Aus $t = 0$ folgt die Orthogonalitätsbeziehung (für alle $\phi \in S$).

(ii) Umgekehrt gelte nun die Beziehung

$$(f-p,\phi)=0 \quad \forall \phi\in S,$$

für ein $p\in S$. Dann gilt für den Fehler für beliebige $\phi\in S$:

$$\|f-p\|^2=(f-p,f-p)=(f-p,f-\phi)+\underbrace{(f-p,\overbrace{\phi-p}^{\in S})}_{=0}\le \|f-p\|\,\|f-\phi\|,$$

und also die Minimalbedingung. □

Wir können die beste Approximation $p\in S$ durch eine Orthogonalitätsbeziehung beschreiben. Dieser Zusammenhang ist der Schlüssel zur Analyse der Gauss-Approximation und auch zur praktischen numerischen Realisierung. Wir können sofort den allgemeinen Satz beweisen:

Satz 9.81 (Allgemeine Gauß-Approximation)**.** *Es sei H ein Vektorraum mit Skalarprodukt $(\cdot,\cdot)$ und $S\subset H$ ein endlich-dimensionaler Teilraum. Dann existiert zu jedem $f\in H$ eine eindeutig bestimmte beste Approximation $p\in S$ in der induzierten Norm $\|\cdot\|$:*

$$\|f-p\|=\min_{\phi\in S}\|f-\phi\|.$$

Beweis: Für den Beweis nutzen wir die Charakterisierung der Bestapproximation mit Hilfe des Skalarprodukts aus Satz 9.80.

(i) Eindeutigkeit: Seien $p_1,p_2\in S$ zwei Bestapproximationen. Dann gilt notwendigerweise

$$(f-p_i,\phi)=0 \quad \Rightarrow \quad (p_1-p_2,\phi)=0 \quad \forall\phi\in S,$$

und also, für $\phi:=p_1-p_2$ folgt $\|p_1-p_2\|=0$, somit $p_1=p_2$.

(ii) Existenz: Der endlich-dimensionale Teilraum $S\subset H$ besitzt eine Basis $\{\phi_1,\dots,\phi_n\}$ mit $n:=\dim(S)$. Die beste Approximation $p\in S$ stellen wir als Linearkombination in dieser Basis dar:

$$p=\sum_{k=1}^n \alpha_k\phi_k,$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten $\alpha_k\in\mathbb{R}$. Dieser Ansatz für p wird in die Orthogonalitätsbedingung eingesetzt:

$$(f-p,\phi_l)=(f-\sum_{k=1}^n\alpha_k\phi_k,\phi_l)=(f,\phi_l)-\sum_{k=1}^n\alpha_k(\phi_k,\phi_l)=0 \quad k=1,\dots,n.$$

Dies entspricht dem linearen Gleichungssystem

$$Ax=b,$$

mit Koeffizientenmatrix $A = (a_{kl})_{kl=1}^n$, rechter Seite $b = (b_l)_{l=1}^n$ und Lösung $x = (\alpha_k)_{k=1}^n$:

$$a_{lk} = (\phi_k, \phi_l), \quad b_l = (f, \phi_l).$$

Die Matrix A ist die *Gram'sche Matrix* zur Basis $\phi_1, \dots, \phi_n$ und stets regulär. Damit ist das Gleichungssystem stets eindeutig lösbar. □

Der Beweis liefert sofort ein Konstruktionsprinzip zur Bestimmung der Bestapproximation $p \in S$. Wir stellen zu gegebener Basis $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ das lineare $n \times n$ Gleichungssystem auf:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}\alpha_j = b_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

mit $a_{ij} = (\psi_i, \psi_j)$ und berechnen den Ergebnisvektor $x = (\alpha_j)_j$. Die gesuchte Bestapproximation $p \in S$ ist dann in der Basisdarstellung gegeben als

$$p = \sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i.$$

Zur numerischen Realisierung muss zunächst das lineare Gleichungssystem aufgestellt werden, d.h. insbesondere müssen die Einträge der Systemmatrix (numerisch) integriert werden. Schließlich ist das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ zu lösen. Angenommen, wir starten die Konstruktion mit der Monombasis $\{1, x, \dots, x^n\}$ auf dem Intervall $[0, 1]$. Dann ist die durch

$$a_{ij} = \int_0^1 x^i \, x^j \, \mathrm{d}x,$$

gegebene Matrix die sogenannte *Hilbert-Matrix*

$$H_n = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \ddots & & \frac{1}{n+2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \ddots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \frac{1}{n+3} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}.$$

Das Lösen eines Gleichungssystems mit der Hilbert-Matrix ist äußerst schlecht konditioniert. Schon für $n = 4$ liegt die Fehlerverstärkung der Hilbert-Matrix bei 15 000. Diese Matrix muss also unbedingt vermieden werden. Der direkte Weg zum Erstellen der Bestapproximation ist somit nicht numerisch stabil.

Auch wenn die Wahl der Basisvektoren $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ keinen Einfluss auf das Ergebnis hat, so bestimmt sie doch wesentlich den Aufwand bei der Realisierung. Angenommen, die Basis sei ein Orthonormalsystem, d.h. es gelte $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$ für alle $i, j = 1, \dots, n$. Dann gilt für die Systemmatrix

$$a_{ij} = (\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad A = I.$$

Die Systemmatrix ist die Einheitsmatrix und die gesuchten Koeffizienten lassen sich sofort ablesen

$$\alpha_i = (f, \phi_i),$$

womit die Bestapproximation durch die Relation

$$p = \sum_{i=1}^{n} (f, \phi_i)\phi_i,$$

trivial gegeben ist. Für dieses vereinfachte Vorgehen benötigen wir zunächst eine Orthonormalbasis von $S \subset H$. Die Orthonormalisierung kann mit Hilfe des bereits diskutieren Gram-Schmidt-Algorithmus durchgeführt werden. Bei Verwendung der Monombasis des $S = P_n$ führt dieser Algorithmus auf die bereits bekannten Legendre-Polynome aus Satz 9.69.

Die Legendre-Polynome erlauben eine einfache Anwendung der Gauss-Approximation:

Korollar 9.82 (Gauss-Approximation mit Polynomen)**.** *Es sei $f \in C[-1,1]$. Die Bestapproximation $p \in P_n$ bezüglich der L^2-Norm im Raum der Polynome von Grad n eindeutig bestimmt durch:*

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{\|L_i\|^2_{L^2[-1,1]}} (L_i, f) L_i(x),$$

mit den Legendre-Polynomen

$$L_i(x) := \frac{1}{2^i i!} \frac{d^i}{dx^i} (x^2 - 1)^i.$$

Die Normierung mit $\|L_n\|^{-2}$ ist notwendig, da die Legendre-Polynome bezüglich der L^2-Norm nicht normiert sind, vergleiche Satz 9.69.

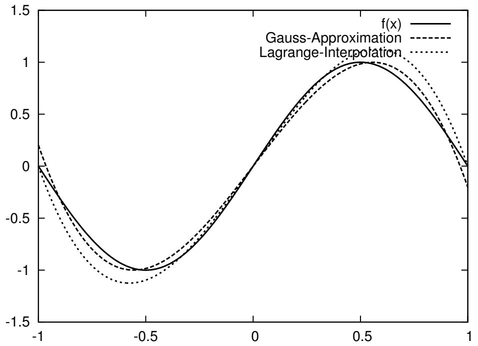
Die Eigenschaft von $p \in P_n$ die beste Approximation zu f im Raum der Polynome zu sein, bedeutet auch, dass p bezüglich der L^2-Norm eine bessere Approximation ist als jede Lagrange-Interpolation zu beliebiger Wahl von Stützstellen $x_0, \dots, x_n$ in $[-1,1]$. Hieraus können wir auf triviale Weise eine einfache Fehlerabschätzung herleiten. Dazu sei $f \in C^{n+1}([a,b])$ und $p \in P_n$ die Bestapproximation. Es gilt

$$\|f - p\|_{L^2[a,b]} \leq \|f - i_h f\|_{L^2[a,b]} \quad \forall i_h f,$$

wobei $i_h f$ eine beliebige Interpolation zu f in $n+1$ Stützstellen ist. Mit der (punktweisen) Fehlerabschätzung der Interpolation, Satz 9.11 folgt:

$$\|f - p\|_{L^2([a,b])} \leq \frac{\|f^{n+1}\|_\infty}{(n+1)!} \min_{x_0,\dots,x_n \in [a,b]} \left(\int_{-1}^{1} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)^2 \, \mathrm{d}x \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{9.30}$$

Das Minimum des zweiten Ausdrucks ist nicht einfach zu bestimmen, es können alle Stützstellen im Intervall frei variiert werden. Wir werden aber später auf diesen Punkt zurückkommen und diese Lücke schließen.



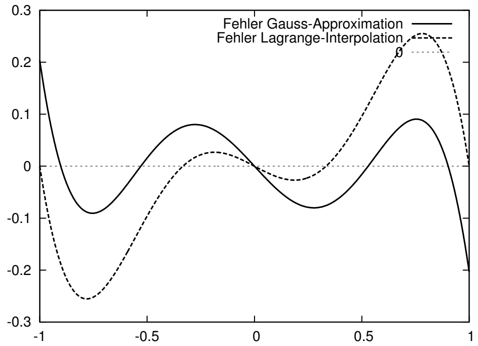


Abbildung 9.8.: Gauss-Approximation sowie Lagrange-Interpolation (jeweils kubisch) der Funktion $f(x) = \sin(\pi x)$. Rechts: Fehler der Approximationen.

Beispiel 9.83 (Gauss-Approximation vs. Lagrange-Interpolation)**.** *Wir approximieren die Funktion $f(x) = \sin(\pi x)$ auf dem Intervall $I = [-1, 1]$ mit Polynomen vom Grad drei. Zunächst erstellen wir in den äquidistant verteilten vier Stützstellen*

$$x_i = -1 + \frac{2i}{3}, \quad i = 0, \dots, 3$$

das zugehörige Lagrangesche Interpolationspolynom. Aufgrund von $f(x_0) = f(x_3) = 0$ gilt:

$$\begin{aligned} p_L(x) &= \sin(x_1) L_1^{(3)}(x) + \sin(x_2) L_2^{(3)}(x) \\ &= \frac{27\sqrt{3}}{16}(x - x^3). \end{aligned}$$

Als zweite Approximation bestimmen wir die Gauß-Approximation in der L^2-Norm. Hierzu verwenden wir die Darstellung über die normierten Legendre-Polynome $\tilde{L}_n(x)$ auf $[-1, 1]$. Es gilt:

$$\int_{-1}^{1} \tilde{L}_0(x)\, f(x)\, dx = 0, \quad \int_{-1}^{1} \tilde{L}_2(x)\, f(x)\, dx = 0,$$

sowie

$$\int_{-1}^{1} \tilde{L}_1(x)\, f(x)\, dx = \frac{\sqrt{6}}{\pi}, \quad \int_{-1}^{1} \tilde{L}_3(x)\, f(x)\, dx = \frac{\sqrt{14}(\pi^2 - 15)}{\pi^3}.$$

Hieraus erhalten wir die Gauß-Approximation

$$\begin{aligned} p_G(x) &= \frac{\sqrt{6}}{\pi} \tilde{L}_1(x) + \frac{\sqrt{14}(\pi^2 - 15)}{\pi^3} \tilde{L}_3(x) \\ &= \frac{5x(7\pi^2 x^2 - 105 x^2 - 3\pi^2 + 63)}{2\pi^3}. \end{aligned}$$

Für die beiden Approximationen gilt:

$$\|f - p_L\|_{L^2([-1,1])} \approx 0.2, \quad \|f - p_G\|_{L^2([-1,1])} \approx 0.1,$$

d.h., die Gauß-Approximation liefert in der L^2-Norm ein doppelt so gutes Ergebnis. In Abbildung 9.8 zeigen wir beide Approximationen, die Funktion $f(x)$ sowie die Fehler $f(x)-p_l(x)$ sowie $f(x)-p_g(x)$. Hier sehen wir zunächst, dass die Lagrange-Interpolation an den Stützstellen die Interpolationsbedingung, also $f(x_i) = p_L(x_i) = 0$ erfüllt, wo hingegen die Gauss-Approximation gerade am Rand einen großen Fehler aufweist. Der maximale Fehler im Intervall ist hingegen bei der Gauß-Approximation etwas geringer.

Diskrete Gauß-Approximation

Abschließend betrachten wir nun die Bestapproximation diskreter Messwerte $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$. Wir definieren auf der Punktmenge die Norm

$$|y|_2 = \left(\sum_{i=1}^m y_i^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Es sei S ein endlich dimensionaler Funktionenraum, z.B. der Raum der Polynome P_n. Wir suchen die beste Approximation $p \in S$ bezüglich der Punkt-Norm:

$$|p-y|_2 = \left(\sum_{i=1}^m |p(x_i) - y_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}. = \min_{\phi\in S} |\phi - y|_2.$$

Im Fall $m > n$ können wir keine Gleichheit in den Punkten x_i fordern. D.h., $\phi(x)$ ist keine Interpolation. Ein Beispiel ist die Bestimmung der linearen Ausgleichsgerade $p_1(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$ zu vielen (tausend?) Messwerten. Die euklidische Vektornorm ist aus dem euklidischen Skalarprodukt abgeleitet:

$$|x|_2 = (x, x)_2^{\frac{1}{2}},$$

daher kann die bisher entwickelte Theorie unmittelbar angewendet werden. Schlüssel zur Bestimmung der Bestapproximation ist wieder gemäß Satz 9.80 die Charakterisierung über die Orthogonalität:

$$|p-y|_2 = \min_{\phi\in S} |\phi - y|_2 \quad \Leftrightarrow \quad (p-y, \phi)_2 = 0 \quad \forall \phi \in \mathbb{R}^n.$$

Alle Eigenschaften der kontinuierlichen Gauß-Approximation übertragen sich und wir können gleich den Existenzsatz formulieren:

Satz 9.84 (Diskrete Gauß-Approximation). *Es seien durch (x_i, y_i) für $i = 1, \dots, m$ diskrete Datenwerte gegeben. Weiter sei S ein endlich dimensionaler Funktionenraum mit Basis $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$. Die diskrete Gauß-Approximation $p \in S$*

$$|p-y|_2 := \left(\sum_{i=1}^m |p(x_i) - y_i|^2\right)^{\frac{1}{2}} = \min_{\phi\in S} |\phi - y|_2,$$

ist eindeutig bestimmt.

Beweis: über die Basisdarstellung ist S äquivalent zum euklidischen Raum $\mathbb{R}^n$. Eindeutigkeit und Existenz folgen nun in $\mathbb{R}^n$ wie im Beweis zu Satz 9.81. □

Die Konstruktion der diskreten Gauß-Approximation folgt wieder über die Basisdarstellung

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \phi_i(x)$$

aus der beschreibenden Orthogonalitätsbeziehung:

$$(p - y, \phi_k)_2 = \sum_{i=1}^{m} (p(x_i) - y_i)\phi_k(x_i) = 0, \quad k = 1, \dots, n$$

Setzen wir für p die Basisdarstellung ein, so erhalten wir das Gleichungssystem:

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \underbrace{\sum_{i=1}^{m} \phi_j(x_i)\phi_k(x_i)}_{=(\phi_j,\phi_k)_2} = \underbrace{\sum_{i=1}^{m} y_i \phi_k(x_i)}_{=(y,\phi_k)_2}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Der gesuchte Koeffizientenvektor $\alpha = (\alpha_k)_{k=1}^n$ ist gegeben als Lösung des Gleichungssystems:

$$\begin{pmatrix} (\phi_0, \phi_0)_2 & (\phi_0, \phi_1)_2 & \cdots & (\phi_0, \phi_n)_2 \\ (\phi_1, \phi_0)_2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\phi_n, \phi_0)_2 & \cdots & \cdots & (\phi_n, \phi_n)_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (y, \phi_0)_2 \\ (y, \phi_1)_2 \\ \vdots \\ (y, \phi_n)_2. \end{pmatrix}$$

Aus der allgemeinen Darstellung kann eine spezielle und häufig genutzte Approximation abgeleitet werden: die Gauß'sche Ausgleichsrechnung:

Beispiel 9.85 (Lineare Ausgleichsrechnung)**.** *Wir suchen die lineare Approximation* $p(x) \in P_1$

$$p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x,$$

zu gegebenen Messwerten. Es seien $\phi_0(x) \equiv 1, \phi_1(x) = x$ *dann ergibt sich das folgende lineare Gleichungssystem:*

$$\begin{pmatrix} (\phi_0, \phi_0)_2 & (\phi_0, \phi_1)_2 \\ (\phi_1, \phi_0)_2 & (\phi_1, \phi_1)_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (y, \phi_0)_2 \\ (y, \phi_1)_2, \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i. \end{pmatrix}$$

Dieses System ist regulär, falls $m \geq 2$ *und es mindestens zwei Stützwerte* $x_i \neq x_j$ *gibt.*

Verallgemeinerung der Gauß-Approximation Die diskrete Gauß-Approximation sowie die Approximation von Funktionen lassen sich durch die Verwendung von gewichteten Skalarprodukten und entsprechenden gewichteten induzierten Normen vereinfachen.

Die Verwendung eines Gewichtes dient dazu, die Approximationsgenauigkeit der Gauß-Approximierenden an den Intervallenden zu verbessern. Für jedes integrable und positive $\omega(x) > 0$ ist durch

$$(f,g)_\omega := \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x,$$

wieder ein Skalarprodukt mit entsprechender Norm

$$\|f\|_\omega = (f,f)_\omega^{\frac{1}{2}},$$

gegeben. Wird die Gewichtsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ auf dem Intervall $(-1,1)$ verwendet, so legt die Bestapproximation ein größeres Gewicht auf die Intervallenden. Die hieraus abgeleiteten orthonormalen Polynome sind die bereits diskutierten Tschebyscheff-Polynome.

Auch die diskrete Gauß-Approximation lässt sich dies bezüglich verallgemeinern. Hierzu sei durch $\omega \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor mit $\omega_i > 0$ gegeben. Dann ist für $x, y \in \mathbb{R}^n$ durch

$$(x,y)_\omega = \sum_{i=1}^n x_i y_i \omega_i, \quad |x|_\omega = (x,x)_\omega^{\frac{1}{2}},$$

ein gewichtetes Skalarprodukt mit entsprechender Norm gegeben. Gerade für die diskrete Approximation spielen die Gewichte eine große Rolle in der Anwendung: Angenommen für die Stützstellen und Stützwerte sind Abschätzungen für den Messfehler bekannt. Dann können Stützwerte mit kleinerem Messfehler stärker gewichtet werden.

Sämtliche Sätze zur Gauß-Approximation wurden für beliebige von Skalarprodukten induzierte Normen bewiesen. Daher übertragen sich alle Eigenschaften auch auf die gewichteten Normen.

9.6.2. Tschebyscheff-Approximation

Wählen wir anstelle der $L^2[a,b]$-Norm die Maximumsnorm

$$\|f\|_\infty := \min_{[a,b]} |f(x)|,$$

so kann die Bestapproximationsaufgabe nicht entsprechend der Gauss-Approximation angegangen werden. Es fehlt der Zusammenhang der Maximumsnorm zu einem Skalarprodukt und somit der Bezug zur Orthogonalität und eine Charakterisierung der Bestapproximation mit Hilfe einer Variationsgleichung.

Definition 9.86 (Tschebyscheff-Approximation)**.** *Es sei $f \in C[a,b]$ und $S \subset C[a,b]$ ein endlich dimensionaler Teilraum. Die Funktion $p \in S$ mit*

$$\|f-p\|_\infty \le \|f-g\|_\infty \quad \forall g \in S,$$

heißt Tschebyscheff-Approximation *zu f.*

Beispiel 9.87 (Bestapproximation in der Maximumsnorm)**.** *Wir betrachten $f(x) = \cos(\pi x)$ auf $I = [0,1]$. Wir suchen zunächst die Bestapproximation mit der konstanten Funktion $p(x) \equiv c$:*

$$\min_{c\in\mathbb{R}} \|f - c\|_\infty.$$

Da

$$-1 = \min_I |f(x)| < \max_I |f(x)| = 1,$$

muss auch $-1 \leq c \leq 1$ gelten. Für diese Wahl erhalten wir

$$\|f - c\|_\infty = \max\{1 - c, 1 + c\},$$

und die optimale Lösung für $c = 0$.

Im Falle der linearen Bestapproximation $p(x) = c + \alpha x$ ist diese Aufgabe bereits schwer zu lösen.

Die Existenz der Tschebyscheff-Approximation kann nicht mit Hilfe einer Orthogonalitätsbeziehung gezeigt werden. Wir können jedoch ein ganz allgemeines Approximationsresultat verwenden:

Satz 9.88 (Existenz der Tschebyscheff-Approximation)**.** *Es sei E ein Vektorraum mit Norm $\|\cdot\|$ und $S \subset E$ ein endlich dimensionaler Teilraum. Dann existiert zu jedem $f \in E$ eine Bestapproximation $p \in S$ mit*

$$\|f - p\| = \min_{q\in S} \|f - q\|.$$

Beweis: Wir zeigen zunächst, dass eine Bestapproximation in der Menge

$$S_f := \{\phi \in S,\ \|\phi\| \leq 2\|f\|\}$$

liegen muss. Diese Menge ist nicht leer, natürlich liegt z.B. $f \in S_f$.

Angenommen $g \in S$ mit $\|g\| > 2\|f\|$. Dann folgt mit der umgekehrten Dreiecksungleichung

$$\|g - f\| \geq \|g\| - \|f\| > \|f\| = \|f - 0\| \geq \inf_{q\in S} \|f - q\|,$$

d.h., $g \in S$ ist keine Bestapproximation. Die Teilmenge $S_f \subset S$ ist abgeschlossen, endlich dimensional, kompakt. Auf S_f ist die Funktion

$$F(\phi) := \|f - \phi\|,$$

stetig und nimmt als stetige Funktion auf in der kompakten Menge S_f ein Minimum $p \in S_f$ an. Dieses Minimum ist die Bestapproximation. □

Zur Charakterisierung der Bestapproximation benötigen wir nun ein überprüfbares Kriterium. Viele der folgenden Sätze lassen sich auf allgemeine Vektorräume E und endlich dimensionale Teilräume S übertragen. Wir gehen jedoch davon aus, dass $E = C[a,b]$ der

Raum der stetigen Funktionen ist und $S = P_n$ der Raum der Polynome vom Grad bis n. Angenommen, $p \in P_n$ sei eine Bestapproximation zu $f \in C[a, b]$. Dann definieren wir

$$e(x) = f(x) - p(x), \quad \mathbf{e} := \max_{[a,b]} |e(x)|,$$

und die Menge aller Punkte $x \in [a, b]$, in denen die Fehlerfunktion maximal wird.

$$E(f, p) := \{x \in [a, b] : \ |e(x)| = \mathbf{e}\}.$$

Es gilt

Satz 9.89 (Satz von Kolmogoroff)**.** *Die Funktion $p \in P_n$ ist genau dann Bestapproximation zu $f \in C[a, b]$, falls*

$$\forall q \in P_n : \quad \min \big\{ (f(x) - p(x))q(x) : \ \forall x \in E(f, p) \big\} \leq 0.$$

Beweis: *(i)* Angenommen, p sei Bestapproximation und das Kolmogoroff-Kriterium gilt nicht. Dann existiert ein $q \in P_n$ und ein $\epsilon > 0$, so dass für $e(x) := f(x) - p(x)$ gilt

$$\forall x \in E(f, p) : \ e(x)q(x) > 2\epsilon.$$

Die Menge $E(f, p)$ ist kompakt. Daher existiert eine offene Menge U mit $E(f, p) \subset U$ und

$$\forall x \in U : \ (f(x) - p(x))q(x) > \epsilon.$$

Wir definieren $M := \|q\|_\infty$ und $p_1 := p + \lambda q$. Für $\lambda > 0$ folgt dann für $x \in U$

$$\begin{aligned}(f(x) - p_1(x))^2 = \big(e(x) - \lambda q(x)\big)^2 &= e(x)^2 - 2\lambda e(x)q(x) + \lambda^2 q(x)^2 \\ &< \mathbf{e}^2 - 2\lambda\epsilon + \lambda^2 M^2.\end{aligned}$$

Für alle

$$0 < \lambda < \frac{\epsilon}{M^2}$$

gilt

$$(f(x) - p_1(x))^2 < \mathbf{e}^2 - \lambda\epsilon.$$

Es existiert also eine Funktion p_1 die in der Umgebung U eine bessere Approximation zu f ist als p. Wir betrachten jetzt $x \in [a, b] \setminus U$. Diese Menge ist kompakt (U ist offen). Also existiert ein $\delta >< 0$ mit

$$|e(x)| < \mathbf{e} - \delta \quad \forall x \in [a, b] \setminus U,$$

den die Maxima werde ja gerade innerhalb der offenen Umgebung U angenommen. Für

$$\lambda < \frac{\delta}{2M}$$

gilt dann

$$|f(x) - p_1(x)| \leq |f(x) - p(x)| + \lambda |q(x)| \leq \mathbf{e} - \delta + \frac{\delta}{2M} M = \mathbf{e} - \frac{\delta}{2}.$$

Die Funktion p_1 ist also auf ganz $[a, b]$ eine bessere Approximation zu f. Dies ist ein Widerspruch, das Kolmogoroff-Kriterium muss demnach gelten.

(ii) Jetzt nehmen wir an, dass das Kolmogoroff-Kriterium für p gilt. Es sei $p_1 \in P_n$ beliebig und $q := p_1 - p$. Es existiert also mindestens ein $t \in E(f, p)$ mit

$$e(t)q(t) \leq 0.$$

Hieraus folgt

$$(f(t) - p_1(t))^2 = (e(t) - q(t))^2 = e(t)^2 - 2e(t)q(t) + q(t)^2 \quad \geq e(t)^2 = \mathbf{e}^2,$$

d.h.

$$\|f - p_1\|_\infty \geq \|f - p\|_\infty \quad \forall p_1 \in P_n,$$

d.h., p ist die Bestapproximation. $\square$

Die Eindeutigkeit einer Bestapproximation kann für die Polynomräume kann nun mit diesem Kriterium nachgewiesen werden:

Satz 9.90 (Haar'scher Eindeutigkeitssatz)**.** *Es sei $f \in C[a, b] \setminus P_n$ und P_n der Raum der Polynome bis zum Grad n und $p \in P_n$ die Bestapproximation zu f. Dann besitzt die Menge $E(f, p)$ mindestens $n + 2$ Punkte und die Bestapproximation ist eindeutig bestimmt.*

Beweis: *(i)* Angenommen, die Menge $E(f, p)$ habe nur $n + 1$ Punkte $x_0, x_1, \dots, x_{n+1} \in [a, b]$. Zu diesen $n + 1$ paarweise verschiedenen Punkten existiert die eindeutige Lagrange-Interpolation $q \in P_n$ mit

$$q(x_j) = e(x_j) = f(x_j) - p(x_j), \ j = 0, \dots, n.$$

Wir überprüfen das Kolmogoroff-Kriterium (das für die Bestapproximation ja gelten müsste)

$$e(x_j)q(x_j) = e(x_j)^2 = \mathbf{e}^2 > 0.$$

Das Kriterium ist nicht erfüllt, d.h. p kann keine Bestapproximation, d.h. es existieren mindestens $n + 2$ Punkte in $E(f, p)$.

(ii) Angenommen, p_1, p_2 seien zwei Bestapproximationen zu $f \in C[a, b]$. Dann gilt:

$$\|f - \frac{1}{2}(p_1 + p_2)\|_\infty \leq \frac{1}{2}\|f - p_1\|_\infty + \frac{1}{2}\|f - p_2\|_\infty,$$

d.h., $p := (p_1 + p_2)/2$ ist auch Bestapproximation. Nach Teil *(i)* existieren mindestens $n+2$ Punkte $x_0, \dots, x_{n+1} \in E(f, p)$ mit

$$|f(x_j) - p(x_j)| = \mathbf{e}, \quad j = 0, \dots, n + 1,$$

also

$$\left|\frac{1}{2}(f(x_j) - p_1(x_j)) + \frac{1}{2}(f(x_j) - p_2(x_j))\right| = \mathbf{e}, \quad j = 0, \dots, n + 1.$$

Gleichzeitig gilt für die beiden Polynome p_1, p_2

$$|f(x_j) - p_i(x_j)| \leq \mathbf{e}, \quad i = 1, 2, \quad j = 0, \dots, n+1.$$

Hieraus folgt:

$$f(x_j) - p_1(x_j) = f(x_j) - p_2(x_j) \quad \Rightarrow \quad p_1(x_j) = p_2(x_j),$$

d.h. die beiden Polynome $p_i \in P_n$ stimmen in $n+2$ Stellen überein, sind also identisch. Die Bestapproximation ist somit eindeutig. □

Zur konkreten Bestimmung der Bestapproximation und zu ihrer weiteren Charakterisierung zitieren wir nun noch die folgende Verschärfung des Kolmogoroff-Kriteriums:

Satz 9.91 (Tschebyscheffscher Alternantensatz)**.** *Es sei $f \in C[a, b]$ und $p \in P_n$ die Bestapproximation zu f. Genau dann existiert eine Sequenz aus $n+2$ Stellen $x_0, \dots, x_m \in E(f, p)$, die sogenannte* Alternante*, so dass für den Fehler $e(x) = f(x) - p(x)$ gilt*

$$|e(x_i)| = \|e\|_\infty, \quad e(x_i) = -e(x_{i+1}), \quad i = 0, \dots, n+1,$$

die Extrema werden also mit wechselndem Vorzeichen angenommen.

Beweis: Der Haar'sche Eindeutigkeitssatz besagt bereits, dass die Menge $E(f, p)$ mindestens $n+2$ paarweise verschiedene Punkte besitzt, an denen gilt:

$$|e(x_j)| = \mathbf{e}, \ j = 0, \dots, n+1.$$

Weiter gilt das Kriterium von Kolmogoroff in diesen $n+2$ Punkten. Wir müssen nun noch zeigen, dass das Vorzeichen von $e(x_j)$ von Punkt zu Punkt wechselt. Angenommen, es gäbe nur n Vorzeichenwechsel, d.h. z.B.

$$\begin{aligned} e(x_j) &= (-1)^j \mathbf{e} & j &= 0, \dots, i, \\ e(x_i) = e(x_{i+1}) &= (-1)^i \mathbf{e} \\ e(x_j) &= (-1)^{j+1} \mathbf{e} & j &= i+2, \dots, n+1. \end{aligned}$$

Wir versuchen dies zum Widerspruch zu bringen, indem wir eine Funktion $q_\alpha \in P_n$ konstruieren, die das Kriterium von Kolmogoroff nicht erfüllt. Dazu wählen wir das eindeutig bestimmte Polynom $q_\alpha \in P_n$ mit

$$\begin{aligned} q_\alpha(x_j) &= e(x_j) & j &= 0, \dots, i-1 \\ q_\alpha(x_i) &= \alpha e(x_i) & j &= i \\ q_\alpha(x_j) &= e(x_j) & j &= i+2, \dots, n+1, \end{aligned}$$

mit einem beliebigen $\alpha > 0$. Dies sind $n+1$ Bedingungen für die $n+1$ Unbekannten des Polynomraums P_n, damit ist q_α eindeutig bestimmt. Der Punkte x_{i+1} wird ausgelassen. Nun seien $L_j^{(n)}$ für $j = 0, \dots, n$ die Lagrange-Polynome zu den $n+1$ Punkten

$$x_0, x_1, \dots, x_i, x_{i+2}, \dots, x_{n+1}.$$

Dann schreibt sich q als

$$q_\alpha(x) = \sum_{j=0}^{i-1} e(x_j) L_j^{(n)}(x) + \alpha e(x_i) L_i^{(n)}(x) + \sum_{j=i+2}^{n+1} e(x_j) L_{j-1}^{(n)}(x). \tag{9.31}$$

Hiermit gilt:

$$e(x_j) q_\alpha(x_j) = \begin{cases} \mathbf{e}^2 & j = 0, \dots, i-1 \\ \alpha \mathbf{e}^2 & j = i, \\ ? & j = i+1, \\ \mathbf{e}^2 & j = i+2, \dots, n+1. \end{cases}$$

Wir müssen die Stelle x_{i+1} betrachten. Hier gilt mit der Darstellung (9.31)

$$q_\alpha(x_{i+1}) = \tilde{q}_\alpha(x_{i+1}) + \alpha e(x_j) L_i^{(n)}(x_{i+1}),$$

wobei $\tilde{q}$ sich entsprechend (9.31) ergibt. Das Lagrange-Basispolynom $L_i^{(n)}(x)$ kann zwischen x_i und x_{i+2} keinen Vorzeichenwechsel haben. Ansonsten hätte es $n+1$ Nullstellen und wäre selbst das Nullpolynom. Daher gilt

$$e(x_{i+1}) q(x_{i+1}) = e(x_{i+1}) \tilde{q}(x_{i+1}) + \alpha \underbrace{e(x_{i+1}) e(x_i)}_{=\mathbf{e}^2 > 0} \underbrace{L_i^{(n)}(x_{i+1})}_{>0}.$$

Für α groß genug folgt:

$$e(x_{i+1}) q_\alpha(x_{i+1}) > 0$$

im Widerspruch zum Satz von Kolmogoroff. Es muss somit eine Alternante existieren. $\square$

Ist eine Alternante $\{x_0, \dots, x_{n+1}\}$ bekannt, so kann hieraus die Bestapproximation

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i x^i,$$

bestimmt werden. Für diese gilt

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i x_k^i + (-1)^k \alpha_{n+1} = f(x_k), \quad k = 0, \dots, n+1, \tag{9.32}$$

wobei der Koeffizienten α_{n+1} gerade den maximalen Fehler angibt

$$|\alpha_{n+1}| = \|f - p_n\| = \mathbf{e}$$

Durch (9.32) ist ein System von $n+2$ linearen Gleichungen in den $n+2$ Unbekannten $\alpha_0, \dots, \alpha_{n+1}$ gegeben.

Der Remez-Algorithmus Der *Remez-Algorithmus* baut auf dieser Idee auf. Falls eine Alternante $x_0, \dots, x_{n+1}$ bekannt ist, so können mit Hilfe von (9.32) die Koeffizienten $\alpha_0, \dots, \alpha_n$ der Bestapproximation

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i x^i$$

bestimmt werden. Der Remez-Algorithmus versucht, die Alternante iterativ zu ermitteln.

Im Folgenden skizzieren wir das Vorgehen.

- Zunächst muss eine erste Schätzung für die Alternante $x_0^{(0)}, \dots, x_{n+1}^{(0)}$. Als Möglichkeiten bieten sich gleichverteilte Stützstellen im Intervall, oder die Nullstellen des entsprechenden Tschebyscheff-Polynoms an.
- Wir gehen nun davon aus, dass eine Schätzung $A^{(l)} := \{x_0^{(l)}, \dots, x_{n+1}^{(l)}\}$ für die Alternante vorliegt. Der Übergang $l \mapsto l+1$ besteht aus diesen Schritte:
  1. Mit Hilfe von $A^{(l)}$ wird das lineare Gleichungssystem (9.32) gelöst. Die Lösung $\alpha_0^{(l)}, \dots, \alpha_{n+1}^{(l)}$ bestimmt das Polynom
  $$p^{(l)}(x) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^{(l)} x^j.$$
  2. Man bestimme die Fehlerfunktion
  $$e^{(l)}(x) = f(x) - p^{(l)}(x).$$
  und die Menge der Extremstellen $y_0^{(l)}, \dots, y_m^{(l)}$ von $e^{(l)}$.
  3. Falls $n+2$ dieser Extremstellen die Alternanteneigenschafft approximativ erfüllen, so bricht die Iteration ab. Die Alternanteneigenschaft ist erfüllt, falls
  $$\frac{\left| |e^{(l)}(y_i)| - \|e^{(l)}\|_\infty \right|}{\|e^{(l)}\|_\infty} < tol, \quad e^{(l)}(y_i) \cdot e^{(l)}(y_{i+1}) < 0.$$
  4. Falls keine Alternante vorliegt, so wird aus der Menge der Extremstellen $y_0^{(l)}, \dots, y_m^{(l)}$ sowie der Menge der bisherigen Punkte $x_0^{(l)}, \dots, x_{n+1}^{(l)}$ eine neue Schätzung gewonnen.

     Dabei wird der neue Punkt $x_j^{(l+1)}$ als eine der Extremstellen $y_k^{(l)}$ gewählt, die möglichst nahe an $x_j^{(l)}$ liegt und die Vorzeichenbedingung
  $$e^{(l)}(x_j^{(l+1)}) \cdot e^{(l)}(x_{j-1}^{(l+1)})$$
     erfüllt. Falls dies nicht möglich ist, so werden die alten Punkte $x_j^{(l)}$ weiter verwendet.

Wir starten mit einer ersten Schätzung $x_0^{(0)},\dots,x_{n+1}^{(0)}$, z.B. den Nullstellen des Tschebyscheff-Polynoms T_{n+1}. Hierzu werden die Koeffizienten $\alpha_0^{(0)},\dots,\alpha_{n+1}^{(0)}$ sowie das Polynom $p^{(0)}$ bestimmt. Angenommen, die Fehlerfunktion

$$e^{(0)}(x) := f(x) - p^{(0)}(x),$$

hat die Alternanten-Eigenschaft, so bricht die Iteration ab. Ansonsten wird die Menge der Extremwerte $E(f,p^{(0)})$ von $e^{(0)}$ bestimmt. Ansonsten werden die Punkte in $E(f,p^{(0)})$ verwendet, um die Alternante zu verbessern. Punkte $x_i^{(0)}$ werden durch lokale Maxima, bzw. Minima aus $E(f,p^{(0)})$ ersetzt.

Optimale Lagrange-Interpolation Abschließend wollen wir die Tschebyscheff-Approximation verwenden, um für eine Funktion $f\in C^{n+1}[a,b]$ die optimale Lagrange-Interpolation, also eine optimale Wahl der Stützstellen zu erstellen. Es gilt laut Satz 9.11 für die allgemeine Lagrange-Interpolation zu den paarweise verschiedenen Stützstellen $x_0,\dots,x_n$ die Abschätzung

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i),$$

mit einem Zwischenwert ξ. Ziel ist nun die Bestimmung der Stützstellen $x_0,\dots,x_n$, so dass

$$\|L\|_{\infty,[a,b]} \to \min, \quad L(x) = \prod_{i=0}^{n}(x-x_i).$$

Diese Stützstellenwahl ist dann die optimale für allgemeine Funktionen $f\in C^{n+1}[a,b]$ und geht nicht auf die spezielle Funktion ein. Diese Aufgabe kann als Bestapproximationsaufgabe beschrieben werden. Es gilt

$$L(x) = x^{n+1} - g(x),$$

mit einem Polynom $g\in P_n$. Gesucht ist also die Bestapproximation $g\in P_n$ zur Funktion $f(x)=x^{n+1}$ im Intervall $I=[a,b]$. Aus Satz 9.91 wissen wir, dass die Fehlerfunktion $e(x)=f(x)-g(x)$ mindestens $n+1$ Nullstellen hat (zwischen den $n+2$ Extremstellen).

Satz 9.92 (Optimale Stützstellen der Lagrange-Interpolation)**.** *Auf dem Intervall* $[-1,1]$ *ist die Tschebyscheff-Approximation* $g \in P_n$ *zu* $f(x) = x^{n+1}$ *gegeben durch*

$$g(x) = x^{n+1} - 2^{-n} T_{n+1}(x),$$

mit dem Tschebyscheff-Polynom (siehe Satz 9.73)

$$T_{n+1}(x) = \cos\left((n+1)\arccos(x)\right).$$

Die Nullstellen von $T_{n+1}(x)$

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi(2k+1)}{2(n+1)}\right), \quad k = 0, \dots, n,$$

sind die gesuchten optimalen Stützstellen *der Lagrange-Interpolation auf* $[-1,1]$. *Auf dem allgemeinen Intervall* $[a,b]$ *sind die optimalen Stützstellen gegeben durch*

$$y_k = a + \frac{b-a}{2}(1 + x_k).$$

Beweis: Die Nullstellen der Tschebyscheff-Polynome wurden bereits in Satz 9.73 bestimmt. Mit Hilfe der rekursiven Beziehung (ebenso aus diesem Satz)

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

folgt

$$T_{n+1}(x) = 2^n x^{n+1} + q(x),$$

mit einem $q \in P_n$. Andererseits ist T_{n+1} gegeben als Vielfaches der Linearfaktoren

$$2^{-n} T_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) = L(x).$$

Hieraus folgt

$$\max_{[-1,1]} |L(x)| = \max_{[-1,1]} \prod_{k=0}^{n} |x - x_k| = 2^{-n} \max_{[-1,1]} |T_{n+1}(x)| = 2^{-n}.$$

Die Funktion $T_{n+1}(x)$ nimmt im Intervall $[-1,1]$ genau $n+2$ mal die Extremwerte ± 1 an. Diese $n+2$ Extremstellen bilden eine Alternante für die eindeutige Bestapproximation zu $f(x) = x^{n+1}$

$$g(x) = x^{n+1} - 2^{-n} T_{n+1}(x) \in P_n.$$

Es bleibt zu zeigen, dass diese Bestapproximation wirklich das Produkt $|L(x)|$ in $[-1,1]$ minimiert:

$$\begin{aligned}
\max_{[-1,1]} |L(x)| &= 2^{-n} \max_{[-1,1]} \max |T_{n+1}(x)| \\
&= \max_{[-1,1]} \left| x^{n+1} - (x^{n+1} - 2^{-n} T_{n+1}(x)) \right| = \max_{[-1,1]} \left| x^{n+1} - g(x) \right| \\
&\leq \min_{p \in P_n} \max_{[-1,1]} \left| x^{n+1} - p(x) \right| \\
&\leq \min_{-1 \leq y_0 < \cdots < y_n \leq 1} \max_{[-1,1]} \left| \prod_{k=0}^{n} (x - y_k) \right|,
\end{aligned}$$

d.h. die Stützstellenwahl ist wirklich optimal. □

9.7. Trigonometrische Interpolation

Bisher haben wir uns ausschließlich mit der Interpolation in Polynomräume befasst. In diesem Abschnitt betrachten wir die Interpolation mit trigonometrischen Polynomen, also Funktionen der Art

$$t_n(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^{m} \left\{ a_k \cos\left(\frac{2\pi k x}{\omega}\right) + b_k \sin\left(\frac{2\pi k x}{\omega}\right) \right\},$$

wobei $n = 2m$ und $a_k, b_k \in \mathbb{R}$ die reellen Koeffizienten sind. Für diese *trigonometrischen Polynome* gilt

$$t_n(x) = t_n(x + \omega),$$

d.h. $\omega > 0$ ist die Periode der Funktion $t_n(x)$. Die trigonometrische Interpolation eignet sich somit zur Interpolation von periodischen Funktionen oder Daten. Die aus der Analysis bekannte Fourier-Analyse ist keine Interpolation, sondern kann als Bestapproximation (siehe Abschnitt 9.6) im Raum der trigonometrischen Funktionen betrachtet werden. Im Folgenden betrachten wir ohne Einschränkung die Periode $\omega = 2\pi$, so dass sich die Trigonometrischen Basispolynome vereinfacht schreiben lassen als

$$t_n(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{j=1}^{m} \left\{ a_j \cos(jx) + b_j \sin(jx) \right\}. \tag{9.33}$$

Im Folgenden untersuchen wir Interpolationsaufgabe

$$t_n(x_k) = y_k, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Dabei betrachten wir äquidistant verteilte Stützstellen im Invervall $[0, 2\pi]$. Im Rahmen der trigonometrischen Interpolation wird sich dies als das typische Szenario erweisen:

$$x_k = \frac{2\pi k}{n+1}, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Bei trigonometrischen Funktionen ist Betrachtung komplexer Zahlen oft einfacher. Wir definieren für Koeffizienten $c_0, \dots, c_n \in \mathbb{C}$ die 2π-periodische Funktion

$$t_n^*(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k e^{\mathrm{i}kx},$$

mit der komplexen Einheit $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$. Es gilt

Satz 9.93 (Komplexe trigonometrische Interpolation)**.** *Es seien $x_0, \dots, x_n \in [0, \pi)$ die $n+1$ paarweise verschiedenen äquidistanten Stützstellen und $y_0, \dots, y_n \in \mathbb{C}$ Stützwerte. Dann ist das trigonometrische Interpolationspolynom*

$$t_n^*(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n$$

eindeutig bestimmt. Die Koeffizienten bestimmen sich als

$$c_k = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^{n} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k}.$$

Beweis: *(i)* Wir definieren

$$w := e^{\mathrm{i}x}, \quad w_k := e^{\mathrm{i}x_k}.$$

Dann schreibt sich das Polynom t_n^* als

$$t_n^*(x) = \sum_{k=0}^{n} c_j w^j,$$

und die Interpolationsaufgabe als

$$t_n^*(x_k) = y_k, \quad k = 0, \dots, n.$$

Das Interpolationspolynom ist dann im Sinne der Lagrange-Interpolation eindeutig bestimmt.

(ii) Zur Berechnung der Koeffizienten beobachten wir, dass die w_k gerade die $n+1$-ten Einheitswurzeln sind, denn:

$$w_k^{n+1} = \exp(2\pi \mathrm{i}k) = 1 \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Weiter gilt:

$$w_k^j = \exp\left(\frac{2\pi \mathrm{i}jk}{n+1}\right) = w_j^k.$$

Dann ist

$$\sum_{j=0}^{n} y_j w_k^{-j} = \sum_{j=0}^{n} t_n^*(x_j) w_k^{-j} = \sum_{j,l=0}^{n} c_l w_j^l w_k^{-j} = \sum_{l=0}^{n} c_l \sum_{j=0}^{n} w_j^{l-k} = \sum_{l=0}^{n} c_l \sum_{j=0}^{n} w_{l-k}^j. \tag{9.34}$$

Für eine $n+1$-te Einheitswurzel gilt:

$$0 = w^{n+1} - 1 = (w-1)(w^n + w^{n-1} + \cdots + 1),$$

also

$$\sum_{j=0}^{n} w_j^{l-k} = \begin{cases} 0 & l \neq k \\ n+1 & l = k \end{cases},$$

da $w_0 = 1$. Dann folgt mit (9.34) die Darstellung

$$\sum_{j=0}^{n} y_j w_k^{-j} = (n+1)c_k \quad \Leftrightarrow \quad c_k = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j w_k^{-j}.$$

□

Aufgrund der periodischen Struktur der Basispolynome und der äquidistanten Verteilung der Stützstellen gilt

$$c_{n+1-k} = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j e^{-\mathrm{i}jx_{n+1-k}} = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j e^{-\frac{2\mathrm{i}\pi j(n+1-k)}{n+1}} = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j e^{\frac{2\mathrm{i}\pi jk}{n+1}} =: c_{-k} \tag{9.35}$$

Der Bezug zwischen den komplexen Polynomen $t_n^*(x)$ und einer gesuchten reellen trigonometrischen Interpolation $t_n(x)$ gelingt auf Basis der Eulerschen Formel

$$e^{\mathrm{i}x} = \cos(x) + \mathrm{i}\sin(x).$$

Satz 9.94 (Reelle trigonometrische Interpolation)**.** *Für $n \in \mathbb{N}$ gibt es zu gegebenen reellen Zahlen $y_0, \dots, y_n$ genau ein trigonometrisches Polynom der Form*

$$t_n(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{m}\Big(a_k\cos(kx) + b_k\sin(kx)\Big) + \frac{\theta}{2}a_{m+1}\cos\left((m+1)x\right),$$

mit $t_n(x_j) = y_j$ für $j = 0, \dots, n$ und

$$m = \begin{cases} \frac{n}{2} & n \text{ gerade} \\ \frac{n-1}{2} & n \text{ gerade} \end{cases}, \quad \theta = \begin{cases} 0 & n \text{ gerade} \\ 1 & n \text{ gerade} \end{cases}.$$

Die reellen Koeffizienten bestimmen sich als

$$a_k = \frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j\cos(jx_k), \quad b_k = \frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j\sin(jx_k).$$

Beweis: *(i)* Es sei t_n^* das nach Satz 9.93 bestimmte komplexe Interpolationspolynom mit

$$t_n^*(x_j) = y_j, \quad j = 0, \dots, n.$$

Wir definieren mit Hilfe von (9.35) die Koeffizienten

$$a_k := c_k + c_{-k}, \quad b_k = \mathrm{i}(c_k - c_{-k}), \quad k = 1, \ldots, m, \quad a_{m+1} := 2c_{m+1}.$$

Die Koeffizienten sind reell, denn

$$\begin{aligned} c_k \pm c_{-k} &= \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^{n} y_j \left(\left(\cos(jx_k) - \mathrm{i}\sin(jx_k) \right) \pm \left(\cos(jx_k) + \mathrm{i}\sin(jx_k) \right) \right) \\ \Rightarrow \quad a_k &= \frac{2}{n+1} \sum_{j=0}^{n} y_j \cos(jx_k), \\ b_k &= \frac{2}{n+1} \sum_{j=0}^{n} y_j \sin(jx_k). \end{aligned}$$

Für $n = 2m+1$ ungerade ist

$$m + 1 = \frac{n+1}{2} = (n+1) - \frac{n+1}{2} = (n+1) - (m+1),$$

also $a_{m+1} = c_{m+1} + c_{-(m+1)} \in \mathbb{R}$. Wir definieren das Polynom

$$t_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{m} \left(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx) \right) + \frac{\theta}{2} a_{m+1} \cos\left((m+1)x \right).$$

(ii) Wir zeigen nun, dass

$$t_n(x_j) = t_n^*(x_j), \quad j = 0, \ldots, n.$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} t_n(x_j) &= c_0 + \sum_{k=1}^{m} \Big((c_k + c_{-k}) \cos(kx_j) + \mathrm{i}(c_k - c_{-k}) \sin(kx_j) \Big) + \theta c_{m+1} \cos\left((m+1)x_j \right) \\ &= c_0 + \sum_{k=1}^{m} \Big(c_k \left(\cos(kx_j) + \mathrm{i}\sin(kx_j) \right) + c_{-k} \left(\cos(kx_j) - \mathrm{i}\sin(kx_j) \right) \Big) \\ &\qquad + \theta c_{m+1} \big(\cos((m+1)x_j) + \underbrace{\mathrm{i}\sin((m+1)x_j)}_{=0 \text{ für } n=2m+1 \text{ungerade}} \big) \\ &= c_0 + \sum_{k=1}^{m} \Big(c_k e^{\mathrm{i}kx_j} + c_{-k} e^{-\mathrm{i}kx_j} \Big) + \theta c_{m+1} e^{\mathrm{i}(m+1)x_j}, \end{aligned}$$

da $\cos(x) = \cos(-x)$ sowie $-\sin(x) = \sin(-x)$. Wir konnten im Fall $n = 2m+1$ ungerade den Term

$$\sin\left((m+1)x_j \right) = \sin\left(\frac{n+1}{2} \frac{2\pi j}{n+1} \right) = \sin(\pi j) = 0, \quad j = 0, \ldots, n.$$

einschieben. Mit Hilfe von (9.35), also $c_{-k} = c_{n+1-k}$ und

$$e^{-\mathrm{i}kx_j} = e^{\mathrm{i}\frac{2\pi kj}{n+1}} = e^{\mathrm{i}\frac{2\pi(n+1-k)j}{n+1}} = e^{\mathrm{i}(n+1-k)x_j},$$

folgt

$$t_n(x_j) = \sum_{k=0}^{n} c_k e^{\mathrm{i}kx_j} y_j = 0,$$

d.h., die Interpolationsbedingung ist in allen Punkten erfüllt.

(iii) Es bleibt, die Eindeutigkeit dieser Interpolation zu zeigen. Hier können wir wie üblich vorgehen: zur Bestimmung der $n+1$ Koeffizienten $a_0, \dots, a_{m+1}$ und $b_1, \dots, b_m$ sind $n+1$ Bedingungen $t_n(x_j) = y_j$ zu erfüllen. Wir haben gezeigt, dass dieses Gleichungssystem für beliebige Werte $y_0, \dots, y_n$ lösbar ist. Die zugehörige $n+1 \times n+1$-Matrix hat somit vollen Rang, ist regulär. Die Interpolation ist somit eindeutig bestimmt. □

Die trigonometrische Interpolation eignet sich zur Approximation periodischer Funktionen. Oft sind Funktionen nicht periodisch oder liegen überhaupt nur auf einem Intervall $[a, b]$ vor. In diesem Fall kann die Funktion zunächst auf das Intervall $[0, \pi]$ transformiert und dann periodisch fortgesetzt werden

$$\bar{f}(x) = \begin{cases} f(x) & x \in [0, 2\pi] \\ f(x - 2j\pi) & x \in (2\pi j, 2\pi(j+1)) \end{cases}$$

Im Fall $f(x) \neq f(2\pi)$ hat die periodisch fortgesetzte Funktion an den Punkten $2\pi j$ Unstetigkeitsstellen. Hier definieren wir

$$f(2\pi j) = \frac{1}{2}(f(0) + f(2\pi)).$$

Diese Mittelwertbildung ist durch die Fourier-Entwicklung von Funktionen motiviert. Diese konvergiert an Unstetigkeitsstellen gerade gegen den Mittelwert der beidseitigen Grenzwerte.

Wir gehen nun davon aus, dass eine stetige Funktion $f \in C[0, \pi]$ mit $f(0) = f(\pi) = 0$ vorliegt. Diese kann einfach auf zwei Arten fortgesetet werden. Die *gerade Fortsetzung* ist definiert als

$$\bar{f}(x) = \begin{cases} f(x) & x \in [0, \pi] \\ f(2\pi - x) & x \in [\pi, 2\pi] \\ 2\pi - \text{periodisch} & \text{sonst,} \end{cases} \tag{9.36}$$

die *ungerade Fortsetzung* als

$$\bar{f}(x) = \begin{cases} f(x) & x \in [0, \pi] \\ -f(2\pi - x) & x \in [\pi, 2\pi] \\ 2\pi - \text{periodisch} & \text{sonst.} \end{cases} \tag{9.37}$$

Für diese beiden ergeben sich Spezialfälle bei der Berechnung der Koeffizienten a_k und b_k:

Satz 9.95 (Kosinus- und Sinustransformation). *Es sei $f \in C[0,\pi]$ eine Funktion mit $f(0) = f(\pi) = 0$. Für die trigonometrischen Interpolation der gerade Fortsetzung*

$$x_k = \frac{2\pi k}{n+1}, \quad y_k = \begin{cases} f(x_k) & k = 0,\dots,m, \\ f(2\pi - x_k) & k = m+1,\dots,n \end{cases}$$

gilt

$$c(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{m+1} a_k \cos(kx), \quad a_k = \frac{2}{m+1}\sum_{j=0}^{m} f(x_j)\cos(jx_k).$$

Für die trigonometrische Interpolation der ungeraden Fortsetzung

$$x_k = \frac{2\pi k}{n+1}, \quad y_k = \begin{cases} f(x_k) & k = 0,\dots,m, \\ -f(2\pi - x_k) & k = m+1,\dots,n \end{cases}$$

gilt

$$s(x) = \sum_{k=1}^{m} b_k \sin(kx), \quad a_k = \frac{2}{m+1}\sum_{j=0}^{m} f(x_j)\sin(jx_k).$$

Beweis: Wir betrachten zunächst die komplexen Koeffizienten. Im Fall der geraden Fortsetzung gilt mit $y_k = y_{n+1-k}$:

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k} = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_{n+1-j} e^{-\mathrm{i}jx_k} \\ &= \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} y_j e^{-\mathrm{i}(n+1-j)x_k} = c_{n+1-k} = c_{-k}. \end{aligned}$$

Also folgt

$$b_k = \mathrm{i}(c_k - c_{-k}) = 0,$$

sowie

$$\begin{aligned} a_k = c_k + c_{-k} = 2c_k &= \frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{m} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k} + \frac{2}{n+1}\sum_{j=m+1}^{n} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k} \\ &= \frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{m} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k} + \frac{2}{n+1}\sum_{j=1}^{m} \underbrace{y_{n+1-j}}_{=y_j} e^{-\mathrm{i}(n+1-j)x_k} \\ &= \frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{m} y_j e^{-\mathrm{i}jx_k} + \frac{2}{n+1}\sum_{j=1}^{m} y_j e^{\mathrm{i}jx_k}, \end{aligned}$$

da

$$e^{-\mathrm{i}(n+1-j)x_k} = e^{-\mathrm{i}2\pi\left(1-\frac{j}{n+1}\right)k} = e^{-\mathrm{i}2\pi k}e^{\mathrm{i}jx_k} = e^{\mathrm{i}jx_k} \qquad (e^{-\mathrm{i}2\pi k} = 1).$$

Hiermit folgt (bei Berücksichtigung von $y_0 = y_{m+1} = 0$

$$a_k = \frac{4}{n+1}\sum_{j=1}^{m} y_j \frac{e^{\mathrm{i}jx_k} + e^{-\mathrm{i}jx_k}}{2} = \frac{2}{m+1}\sum_{j=1}^{m} y_j \cos(jx_k).$$

Im Fall der Sinustransformation kann entsprechend vorgegangenwerden. □

9.7.1. Schnelle Fourier-Transformation (FFT)

Die Transformation von Stützwerten $y_0, \ldots, y_n$ zu Koeffizienten heißt *diskrete Fouriertransformation*, bzw. im Falle einer geraden oder ungerade Fortsetzung *diskrete Sinustransformation* und *diskrete Kosinustransformation*. Dieser Prozess ist umkehrbar, d.h. es existieren bijektive Abbildungen

$$\{y_0, \ldots, y_n\} \quad \leftrightarrow \quad \{a_0, \ldots, a_{m+1}, b_1, \ldots, b_m\},$$

sowie

$$\{y_0, \ldots, y_m\} \quad \leftrightarrow \quad \begin{cases} \{a_0, \ldots, a_{m+1}\} & \text{gerade Fortsetzung} \\ \{b_1, \ldots, b_m\} & \text{ungerade Fortsetzung.} \end{cases}$$

Die Basispolynome $\cos(kx)$ sowie $\sin(kx)$ können als die wesentlichen Schwingungen der periodischen Funktion $f(x)$ betrachtet werden. Die Koeffizienten a_k, b_k geben die jeweilige Dominanz der Frequenzen an. Die diskrete Fourier-Transformation dient einerseits zur Analyse von Daten. Aus Messdaten können z.B. die dominanten Schwingungen von mechanischen Strukturen ermittelt werden. Auf der anderen Seite ist die Fourier-Transformation die Grundlage für viele Kompressionsverfahren.

Das *jpeg*-Format für Bilder baut z.B. auf der Kosinus-Transformation auf. Ein Feld aus Grauwerten wird zunächst in Blöcke der Größe 8×8 zerlegt. In jedem dieser Blöcke wird eine Kosinus-Transformation erstellt. Im Anschluss werden einige der Koeffizienten (je nach Kompressionsgrad) auf Null gesetzt. Hierbei werden nicht einfach betragsmäßig kleine Werte abgeschnitten, stattdessen wird berücksichtigt, welche Unterschiede vom Auge wie gut wahrgenommen werden. Die Rücktransformation der reduzierten Koeffizienten ergibt das komprimierte Bild. Auch das *mp3*-Format zur Audiokomprimierung basiert auf einer Art Fouriertransformation des Signals. Je nach Frequenz und Amplitude werden Koeffizienten reduziert.

Im Folgenden beschreiben wir mit der *Fast Fourier Transformation (FFT)* einen sehr schnellen Algorithmus zur Berechnung der Koeffizienten a_k und b_k. Wir wählen hierzu die komplexe Schreibweise, so dann zunächst die komplexen Werte

$$c_k = \sum_{j=0}^{n} \bar{y}_j w^{jk}, \quad k = 0, \ldots, n, \tag{9.38}$$

mit den Abkürzungen

$$\bar{y}_j := \frac{1}{n+1} y_j, \quad w := e^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{n+1}},$$

zu berechnen sind. Aus diesen bestimmen sich a_k und b_k als

$$a_k = c_k + c_{-k}, \quad b_k = \mathrm{i}(c_k - c_{-k}). \tag{9.39}$$

Die Berechnung der $n+1$ Werte c_k mit dem Horner-Schema würde $n^2 + O(n)$ Operationen benötigen. Eine effizientere Methode kann durch eine hierarchische Aufteilung der Summen erreicht werden. Für das Folgende sei $n+1=2^p$ für $p \in \mathbb{N}$. Dann ist

$$\begin{aligned} c_k &= \sum_{j=0}^{2^p} \bar{y}_j w^{jk} \\ &= \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \Big(\bar{y}_{2j} (w^2)^{jk} + \bar{y}_{2j+1} (w^2)^{jk} w^k \Big) \\ &= \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j} (w^2)^{jk} + \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j+1} (w^2)^{jk} w^k \end{aligned} \tag{9.40}$$

Nun sei $k_1 \in \{0, 1, \ldots, 2^{p-1}-1\}$ der ganzzahlige Rest bei Division von k durch 2^{p-1}, also

$$k \equiv k_1 \bmod 2^{p-1}.$$

Wegen $w^{n+1} = w^{2^p} = 1$ folgt für ein $\lambda \in \mathbb{N}$

$$(w^2)^{jk} = (w^2)^{\lambda 2^{p-1} j} (w^2)^{jk_1} = (w^{2^p})^j (w^2)^{jk_1} = (w^2)^{jk_1}.$$

Hiermit lässt sich (9.40) schreiben als

$$c_k = \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j} (w^2)^{jk_1} + w^k \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j+1} (w^2)^{jk_1},$$

oder aber

$$c_k = \tilde{c}_{k_1} + w^k \bar{c}_{k_1}, \quad k = 0, \ldots, 2^p - 1, \quad k \equiv k_1 \mathrm{mod}\, 2^{p-1},$$

wobei

$$\tilde{c}_{k_1} = \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j} (w^2)^{jk_1}, \quad \bar{c}_{k_1} = \sum_{j=0}^{2^{p-1}-1} \bar{y}_{2j+1} (w^2)^{jk_1}, \quad k_1 = 0, \ldots, 2^{p-1}-1.$$

Zur Berechnung der $n+1=2^p$ Größen $c_0, \ldots, c_n$ genügt es also, die zweimal 2^{p-1} Größen $\tilde{c}_0, \ldots, \tilde{c}_{2^{p-1}-1}$ und $\bar{c}_0, \ldots, \bar{c}_{2^{p-1}-1}$ zu berechnen. Die $n+1=2^p$-dimensionale Fourier-Transformation wurde durch zwei Fourier-Transformationen der Dimension 2^{p-1} ersetzt. Würden wir diese Koeffizienten jeweils mit dem Horner-Schema bestimmen, so hätten wir bereits den Aufwand auf die Hälfte reduziert, da die quadratische Laufzeit nun weniger zum Tragen kommt:

$$2 \cdot \left(\frac{n}{2}\right)^2 = \frac{n^2}{2}.$$

Der FFT-Algorithmus basiert nun auf rekursiver Anwendung dieser Technik. Die 2 Fourier-Transformationen der Dimension 2^{p-1} werden durch 4 Transformationen der Dimension 2^{p-2} ersetzt. Schließlich ergeben sich 2^p Fourier-Transformationen der trivialen Dimension 1. Diese können ohne weiteren Rechenaufwand durch Zuweisung der Funktionswerte $\bar{y}_j$ "gelöst" werden. Es gilt:

Satz 9.96 (Schnelle Fourier-Transformation). *Im Fall $n+1=2^p$ berechnet die* Schnelle Fourier-Transformation *die $n+1$ Koeffizienten $c_0,\dots,c_n$ mit*

$$2(n+1)\log_2(n+1)$$

komplexen Operationen.

Beweis: Angenommen, durch r_p sei der Aufwand gegeben, die $n+1=2^p$ Komponenten zu berechnen. Sind $\tilde c_{k_1},\bar c_{k_1}$ bekannt, so sind hierfür die Potenzen w^k und die Summen zu berechnen:

$$c_k = \tilde c_{k_1} + w^k \bar c_{k_1},\quad k=0,\dots,n$$

Hierzu sind $(n+1)+(n-1)=2n\le 2\cdot 2^p$ komplexe Operationen notwendig. Iterativ ergibt sich also

$$r_p \le 2\cdot r_{p-1} + 2\cdot 2^p,\quad p=1,2,\dots.$$

Wir zeigen per Induktion $r_p\le 2p\cdot 2^p$. Wir starten mit $r_0=0$. Dann ist

$$r_p \le 2\cdot r_{p-1}+2\cdot 2^p = 2\cdot(2(p-1)\cdot 2^{p-1})+2\cdot 2^p = 2p\cdot 2^p = 2(n+1)\log_2(n+1).$$

$\square$

Bei der praktischen Durchführung der schnellen Fourier-Transformation startet man mit den 2^p atomaren Koeffizienten, welche gerade durch die stützwerte y_j gegeben sind. Im anschluss werden die rekursiven Formeln

$$c_k = \tilde c_{k_1} + \bar c_{k_1},\quad k=0,\dots,2^p-1,\ k\equiv k_1 \bmod 2^{p-1},$$

durchgeführt. Bei $n+1=1\,024$ benötigt die Schnelle Fourier-Transformation 20 480 komplexe Operationen. Auf der Basis des Horner-Schemas würden 1 000 000 komplexe Operationen benötigt. Die schnelle Fourier-Transformation ist eines der wenigen Verfahren, welche zur Lösung der Aufgabe - falls sie anwendbar ist - ausschließlich Vorteile mit sich bringt. Dies ist selten. Die meisten “fortgeschrittenen” numerischen Methoden bringen gewisse Nachteile mit sich, z.B. höhere Anforderungen an die Regularität (bei der Gauss-Approximation) oder geringere Robustheit (bei der Newton-Iteration bei schlechten Startwerten). Als ein weiteres Verfahren dieser Art stellt sich das Mehrgitterverfahren zur Lösung dünn besetzter Gleichungssysteme heraus. Kann es angewendet werden, so wird eine feste Fehlerreduktion in linearem Aufwand $O(n)$ erreicht.

Index