Einführung in die Numerik WS2018/19

Dozent: Prof. Dr. Andreas Fischer

3. Dezember 2018

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

Kapitel I

Interpolation

1. Grundlagen

Aufgabe:
Gegeben sind $n+1$ Datenpaare $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, alles reelle Zahlen und paarweise verschieden.
Gesucht ist eine Funktion $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, die die Interpolationsbedingungen

$$F(x_0) = f_0, \ \ldots, \ F(x_n) = f_n \tag{1}$$

genügt.

Definition (Stützstellen, Stützwerte)
Die x_0 bis x_n werden Stützstellen genannt.

Die f_0 bis f_n werden Stützwerte genannt.

Die oben gestellte Aufgabe wird zum Beispiel durch

$$F(x) = \begin{cases} 0 & x \notin \{x_0, \ldots, x_n\} \\ f_i & x = x_i \end{cases}$$

gelöst. Weitere Möglichkeiten sind: Polygonzug, Treppenfunktion, Polynom, ...

- In welcher Menge von Funktionen soll F liegen?
- Gibt es im gewählten Funktionenraum für beliebige Datenpaare eine Funktion F, die den Interpolationsbedingungen genügt (eine solche Funktion heißt Interpolierende)?
- Ist die Interpolierende in diesem Raum eindeutig bestimmt?
- Welche weiteren Eigenschaften besitzt die Interpolierende, zum Beispiel hinsichtlich ihrer Krümmung oder der Approximation einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $f_k = f(x_k)$ für $k = 0, \ldots, n$
- Wie sollte man die Stützstellen wählen, falls nicht vorgegeben?
- Wie lässt sich die Interpolierende effizient bestimmen, gegebenenfalls auch unter der Berücksichtigung, dass neue Datenpaare hinzukommen oder dass sich nur die Stützwerte ändern?

■ **Beispiel 1.1**

k	0	1	2	3	4	5
x_k in s	0	1	2	3	4	5
f_k in °C	80	85,8	86,4	93,6	98,3	99,1

Interpolation im

- Raum der stetigen stückweise affinen Funktionen
- Raum der Polynome höchstens 5. Grades
- Raum der Polynome höchstens 4. Grades (Interpolation im Allgemeinen nicht lösbar, Regression nötig)

2. Interpolation durch Polynome

Π_n bezeichne den Vektorraum der Polynome von Höchstgrad n mit der üblichen Addition und Skalarmultiplikation. Für jedes $p \in \Pi_n$ gibt es $a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R}$, sodass

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \tag{1}$$

und umgekehrt.

2.1. Existenz und Eindeutigkeit

Satz 2.1
Zu $n+1$ Datenpaaren $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen existiert genau ein Polynom $p \in \Pi_n$, dass die Interpolationsbedingung Gleichung (1) erfüllt.

Beweis.

- Existenz: Sei $j \in \{0, \dots, n\}$ und $L_j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

$$L_j(x) := \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} = \frac{(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x_j - x_0) \cdot \dots \cdot (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdot \dots \cdot (x_j - x_n)}$$

das Lagrange-Basispolynom vom Grad n. Offenbar gilt $L_j \in \Pi_n$ und

$$L_j(x_k) = \begin{cases} 1 & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases} = \delta_{jk} \tag{2}$$

Definiert man $p : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ durch

$$p(x) := \sum_{j=0}^{n} f_j \cdot L_j(x) \tag{3}$$

so ist $p \in \Pi_n$ und außerdem erfüllt p wegen Gleichung (2) die Interpolationsbedingung Gleichung (1)

- Eindeutigkeit: Angenommen es gibt Interpolierende $p, \tilde{p} \in \Pi_n$ mit $p \neq \tilde{p}$. Dann folgt $p - \tilde{p} \in \Pi_n$ und $(p - \tilde{p})(x_k) = p(x_k) - \tilde{p}(x_k) = 0$ für $k = 0, \dots, n$. Also hat $(p - \tilde{p})$ mindestens $n + 1$ Nullstellen, hat aber Grad n. Das heißt, dass $(p - \tilde{p})$ das Nullpolynom sein muss. □

Definition (Interpolationspolynom)
Das Polynom, dass die Interpolationsbedingung erfüllt, heißt Interpolationspolynom zu $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$.

▶ **Bemerkung 2.2**

- Die Darstellung Gleichung (3) heißt Lagrange-Form des Interpolationspolynoms.
- Um mittels Gleichung (3) einen Funktionswert $p(x)$ zu berechnen, werden $\mathcal{O}(n^2)$ Operationen genötigt; bei gleichabständigen Stützstellen kann man diesen Aufwand auf $\mathcal{O}(n)$ verringern. Ändern sich die Stützwerte, kann man durch Wiederverwendung von den $L_j(x)$ das $p(x)$ in $\mathcal{O}(n)$ Operationen berechnen.
- Man kann zeigen, dass L_0 bis L_n eine Basis von Π_n bilden.

2.2. Newton-Form des Interpolationspolynoms

$$p(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + c_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}) \tag{4}$$

mit Koeffizienten $c_0, \dots, c_n \in \mathbb{R}$. Die Berechnung des Koeffizienten c_j kann rekursiv durch Ausnutzen der Interpolationsbedingung Gleichung (1) erfolgen. Für c_0 erhält man

$$f_0 \overset{!}{=} p(x_0) = c_0$$

Seien c_0 bis c_{j-1} bereits ermittelt. Dann folgt:

$$f_j \overset{!}{=} p(x_j) = \underbrace{c_0 + \sum_{k=1}^{j-1} c_k(x_j - x_0)\dots(x_j - x_{k-1})}_{\text{bekannt}} + c_j \underbrace{(x_j - x_0)\dots(x_j - x_{j-1})}_{\text{bekannt}}$$

▶ **Bemerkung 2.3**

- Der Aufwand um die Koeffizienten $c_0, \dots, c_n$ zu ermitteln ist $\mathcal{O}(n^2)$. Kommt ein Datenpaar hinzu, kann man Gleichung (4) um einen Summanden erweitern und mit $\mathcal{O}(n)$ Operationen c_{n+1} bestimmen.
- Sind die Koeffizienten $c_0, \dots, c_n$ in Gleichung (4) bekannt, dann benötigt man zur Berechnung von $p(x)$ $\mathcal{O}(n)$ Operationen.
- Die Polynome $N_0, \dots, N_n : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

  $$N_0 = 1 \quad \text{und} \quad N_j = (x - x_0)\dots(x - x_{j-1})$$

  heißen NEWTON-Basispolynome und bilden eine Basis von Π_n.

Die Koeffizienten $c_0, \dots, c_n$ ergeben sich wegen Gleichung (1) auch als Lösung des folgenden linearen Gleichungssystems:

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 1 & (x_1 - x_0) & & & \\ 1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \dots & \prod_{i=0}^{n-1}(x_n - x_i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Die Systemmatrix dieses linearen Gleichungssystems ist eine reguläre untere Dreiecksmatrix.

Zu effizienten Berechnung eines Funktionswertes $p(x)$ nach Gleichung (4) mit gegebenen Koeffizienten

$c_0, \ldots, c_n$ kann man das HORNER-Schema anwenden. Überlegung für $n = 3$.

$$\begin{aligned} p(x) &= c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + c_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &= c_0 + (x - x_0)\Big[c_1 + (x - x_1)\left[c_2 + (x - x_2)c_3\right]\Big] \end{aligned}$$

Für beliebiges n liefert das den folgenden Algorithmus:

■ **Algorithmus 2.4 (Horner-Schema für Newton-Form)**
Input: n, x, c_0,..., c_n, x_0,..., x_n

```
1  p = c_n
2  do j = n-1, 0, -1
3   p = c_j + (x - x_j)p
4  end do
```

2.3. Interpolationsfehler

Definition (Maximum-Norm)
Die Norm

$$\|g\|_\infty := \max_{x \in [a,b]} |g(x)| \quad \text{für } g \in C[a,b]$$

definiert die Maximum-Norm in $C[a,b]$.

Satz 2.5
Sei $f \in C[a,b]$. Dann existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein Polynom p_ε mit $\|f - p_\varepsilon\| \leq \varepsilon$.

Also liegt die Menge aller Polynome (beliebig hohen Grades) direkt in $C[a,b]$.

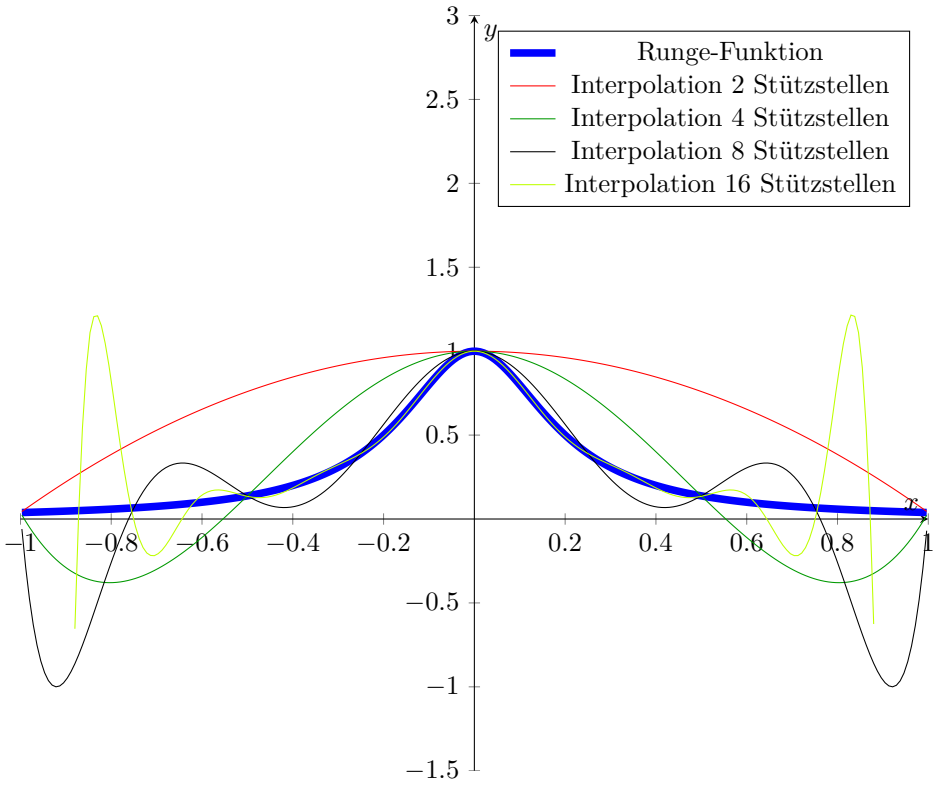
Definition 2.6 (Stützstellensystem)
Stützstellensystem : $a \leq x_0^{(n)} < \ldots < x_n^{(n)} \leq b$. Weiterhin bezeichne $p_n \in \Pi_n$ das zu den Datenpaaren $(x_k^{(n)}, f(x_k^{(n)}))$ gehörende eindeutig bestimmte Interpolationspolynom.

Satz 2.7 (Satz von Faber 1914)
Zu jedem Stützstellensystem gibt es $f \in C[a,b]$, sodass (p_n) nicht gleichmäßig gegen f konvergiert.
$\|p_n - f\|_\infty \to 0$ bedeutet, dass (p_n) gleichmäßig gegen f konvergiert.

Nach einem Resultat von ERDÖS/VERTESI (1980) gilt sogar, dass $(p_n(x))$ fast überall divergiert.

■ **Beispiel 2.8 (Runge)**
$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$
äquidistante Stützstellen $x_0, \ldots, x_n$, $p \in \Pi_n$ als Interpolationspolynom

Stützstellen	**interpoliertes Polynom**
2	$1 - \frac{25x^2}{26}$
4	$3,31565x^4 - 4,27719x^2 + 1$
8	$53,6893x^8 - 102,815x^6 + 61,3672x^4 - 13,203x^2 + 1$
16	$15403,1x^{16} - 49713,5x^{14} + 63743,8x^{12} - 41870x^{10} + 15206x^8 - 3100,35x^6 + 351,984x^4 - 22,7759x^2 + 1$



Anmerkung

Wer mit Mathematica selber diese Polynome berechnen will, muss folgende Befehle benutzen:

- Funktion definieren: `f[x_]:=1/(1+25x^2)`
- Interpolationspolynome ausrechnen: `Expand[InterpolatingPolynomial[Table[{i,f[i]},{i,-1,-1,Schrittweite}],{x}]]`
- plotten: `Plot[f[x],InterpolatingPolynomial[Table[{i,f[i]},{i,-1,-1,Schrittweite}],{x}],{x,-1,1}]`

Satz 2.9
Sei $f \in C^{n+1}[a,b]$ und gelte $a \leq x_0 < ... < x_n \leq b$. Mit $p_n \in \Pi_n$ werde das zu den Datenpaaren $(x_0, f(x_0)), ..., (x_n, f(x_n))$ gehörende Interpolationspolynom bezeichnet. Dann existiert zu jedem $x \in [a,b]$ eine Zahl $\xi \in (a,b)$, so dass

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!} w(x) \quad \text{für alle } x \in [a,b]$$
$$\text{wobei } w(x) = (x - x_0) \cdot ... \cdot (x - x_n)$$

Beweis. Für $x = x_k$ mit $k = 0, ..., n$ ist nicht zu zeigen, da p_n die Interpolationsbedingung erfüllt. Sei nun $x \in [a,b]$ fest gewählt mit $x \notin \{x_0, ..., x_n\}$. Weiter seien

$$K = \frac{f(x) - p_n(x)}{w(x)} \quad \text{und} \quad F : \begin{cases} [a,b] \to \mathbb{R} \\ t \mapsto f(t) - p_n(t) - Kw(t) \end{cases}$$

Man stellt unter Beachtung der Interpolationsbedingung fest, dass $F(x_0) = F(x_1) = ... = F(x_n) = 0$ und $F(x) = 0$. Also besitzt F mindestens $n+2$ paarweise verschiedene Nullstellen in $[a,b]$. Da $F \in C^{n+1}[a,b]$ erhält man durch $n+1$-fache Anwendung des Satzes von Rolle, dass $F^{(n+1)}$ mindestens eine Nullstelle $\xi(x)$ in (a,b) besitzt. Also folgt

$$0 = F^{(n+1)}(\xi(x)) = f^{(n+1)}(\xi(x)) - \underbrace{p_n^{(n+1)}(\xi(x))}_{=0} - K \underbrace{w^{(n+1)}(\xi(x))}_{\text{Konstante}}$$

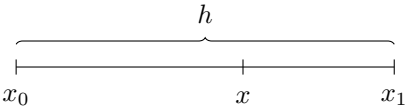
Da $w^{(n+1)} = (n+1)!$, erhält man

$$K = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}$$

Da $x \in [a,b]$ beliebig gewählt war, ist die Behauptung bewiesen. □

■ **Beispiel 2.10**
Sei $f \in C^2[a,b]$ mit $\|f\|_\infty \leq M$. Weiter sei $a = x_0 < x_1 = x_0 + h = b$. Mit Satz 2.9 folgt:

$$\begin{aligned} |f(x) - p_2(x)| &= \left| \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - x_0)(x - x_1) \right| \\ &\leq \frac{1}{2} M \cdot \lambda(x) h \cdot (1 - \lambda(x)) h \\ &\leq \frac{1}{2} M \cdot h^2 \underbrace{\lambda(x)(1 - \lambda(x))}_{\leq 1/4} \\ &\leq \frac{1}{8} M \cdot h^2 \end{aligned}$$



$\Rightarrow x = x_0 + \lambda \cdot (x_1 - x_0) = \lambda x_1 + (1 - \lambda) x_0$

3. Interpolation durch Polynomsplines

3.1. Polynomsplines

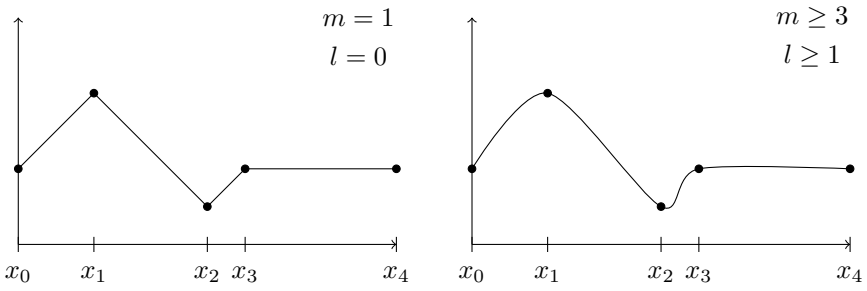
Zur Abkürzung bezeichne Δ eine Zerlegung des Intervall $[a, b]$ durch die Stützstellen $a =: x_0 < ... < x_n := b$.

Definition 3.1 (Polynomspline)
Ein Polynomspline vom Grad $m \in \mathbb{N}$ und Glattheit $l \in \mathbb{N}$ zur Zerlegung Δ ist eine Funktion $s \in C^l[a, b]$ mit

$$s_k := s|_{[x_k, x_{k+1}]} \in \Pi_n \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$

Dabei bezeichnet $s|_{[x_k, x_{k+1}]}$ die Einschränkung von s auf das Intervall $[x_k, x_{k+1}]$. Die Menge aller Splines wird mit $\mathcal{S}_m^l(\Delta)$ bezeichnet.

Folglich ist ein Polynomspline $s \in \mathcal{S}_m^l(\Delta)$ auf jedem der Teilintervall $[x_k, x_{k+1}]$ ein Polynom vom Höchstgrad m. Außerdem ist $s \in \mathcal{S}_m^l(\Delta)$ in allen Punkten $x \in [a, b]$ (also auch in den Stützstellen) l-mal stetig differenzierbar. $\mathcal{S}_m^l(\Delta)$ ist mit der üblichen Addition und Multiplikation ein Vektorraum. Speziell ist $\mathcal{S}_1^0(\Delta)$ die Menge aller stetigen stückweise affin linearen Funktionen.



3.2. Interpolation durch kubische Polynomsplines

Gegeben sei eine Zerlegung Δ und die Stützwerte $f_0, ..., f_n$. Gesucht ist eine Funktion $s \in \mathcal{S}_3^l(\Delta)$ mit $l = 1, 2$ derart, dass

$$s(x_k) = f_k \quad \text{für } k = 0, ..., n \tag{1}$$

Jede derartige Funktion heißt kubischer Interpolationspline .

Konstruktion eines solchen Splines:

$$h_k := x_{k-1} - x_k \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$
$$m_k := s'(x_k) \quad \text{für } k = 0, ..., n-1$$

Wegen $l \in \{1, 2\}$ ist s zunächst stetig differenzierbar. Wegen $s_k = s|_{[x_k, x_{k+1}]}$ für $k = 0, ..., n-1$ und $m = 3$ kann man folgenden Ansatz für s_k benutzen:

$$s_k(x) = a_k(x - x_k)^3 + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k) + d_k \tag{2}$$

Aus den Interpolationsbedingungen Gleichung (1) und der stetigen Differenzierbarkeit aller Funktionen in $s \in \mathcal{S}_m^l(\Delta)$ für $l \geq 1$ ergeben sich folgende Forderungen an s_k, $k = 0, ..., n-1$:

$$\begin{aligned} s_k(x_k) &= f_k \quad \text{und} \quad s_k(x_{k+1}) = f_{k+1} \\ s_k'(x_k) &= m_k \quad \text{und} \quad s_k'(x_{k+1}) = m_{k+1} \end{aligned} \tag{3}$$

Diese liefern:

$$\begin{aligned} d_k &= s_k(x_k) = f_k \\ c_k &= s_k'(x_k) = m_k \end{aligned} \tag{4}$$

und damit:

$$\begin{aligned} s_k(x_{k+1}) &= a_k h_k^3 + b_k h_k^2 + m_k h_k + f_k = f_{k+1} \\ s_k'(x_{k+1}) &= 3a_k h_k^2 + 2b_k h_k + m_k = m_{k+1} \end{aligned}$$

Damit ergeben sich a_k und b_k als eindeutige Lösung für das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} h_k^3 & h_k^2 \\ 3h_k^2 & 2h_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{k+1} - f_k - m_k f_k \\ m_{k+1} - m_k \end{pmatrix} \tag{5}$$

Die Determinante ist $-h_k^4 \neq 0$.

Satz 3.2
Sei eine Zerlegung Δ des Intervalls $[a, b]$ gegeben. Dann gibt es für beliebig gewählte reelle Zahlen $f_0, ..., f_n$ und $m_0, ..., m_n$ einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^1(\Delta)$, der den Interpolationsbedingungen

$$s'(x_0) = m_0, ..., s'(x_n) = m_n$$

genügt. Außerdem gilt: $s|_{[x_k, x_{k+1}]} = s_k$ für k=0,...,n-1 mit s_k entsprechend Gleichung (2), wobei sich a_k, b_k, c_k, d_k aus Gleichung (4) und Gleichung (5) ergeben.

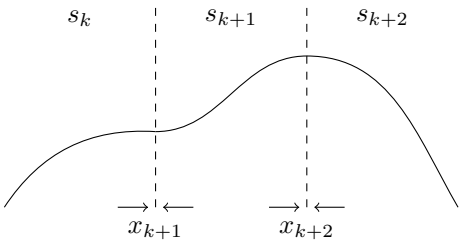
Für die Wahl der m_k gibt es verschiedene Möglichkeiten, zum Beispiel:

- Falls Ableitungswerte der zu interpolierenden Funktion f bekannt sind, kann man $m_k = f'(x_k)$ setzen.
- Man wählt $m_0, ..., m_n$ so, dass s zweimal stetig differenzierbar ist, das heißt $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$ statt $s \in \mathcal{S}_3^1(\Delta)$ gilt.

3.3. Interpolation mit kubischen C^2-Splines

Damit ein kubischer Interpolationsspline s zu $\mathcal{S}_3^2(\Delta)$ gehört, muss neben den Forderungen in Gleichung (3) die Stetigkeit von s'' an den Stützstellen $x_1, ..., x_{n-1}$ gewährleistet sein. Also hat man zusätzliche Bedingungen

$$s_k''(x_{k+1}) = s_{k+1}''(x_{k+1}) \quad \text{für } k = 0, ..., n-2$$



Mit Gleichung (2) ergibt sich $s''(x) = 6a_k(x - x_0) + 2b_k$ für $x \in [x_k, x_{k+1}]$ und damit $s_k''(x_{k+1}) = 6a_k h_k + 2b_k$ und $s_{k+1}''(x_{k+1}) = 2b_{k+1}$, also

$$3a_k h_k + b_k = b_{k+1} \quad \text{für } k = 0, ..., n-2 \tag{6}$$

Aus Gleichung (5) folgt

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{-2}{h_k^3}(f_{k+1} - f_k) + \frac{1}{h_k^2}(m_k + m_{k+1}) \\ b_k &= \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) - \frac{1}{h_k}(2m_k + m_{k+1}) \end{aligned}$$

für $k = 0, ..., n-1$. Wegen Gleichung (6) erhält man für $k = 0, ..., n-2$

$$\begin{aligned} &\frac{-6}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3}{h_k}(m_k + m_{k+1}) + \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) - \frac{1}{h_k}(2m_k + m_{k+1}) \\ &= \frac{-6}{h_{k+1}^2}(f_{k+2} - f_{k+1}) - \frac{1}{h_{k+1}}(2m_{k+1} + m_{k+2}) \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} &\frac{1}{h_k}(m_k + 2m_{k+1}) + \frac{1}{h_{k+1}}(2m_{k+1} + m_{k+2}) = \frac{3}{h_k^2}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3}{h_{k+1}^2}(f_{k+2} - f_{k+1}) \\ \text{bzw.} \quad &h_{k+1}m_k + 2(h_{k+1} + h_k)m_{k+1} + h_k m_{k+2} = \frac{3h_{k+1}}{h_k}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3h_k}{h_{k+1}}(f_{k+2} - f_{k+1}) \end{aligned}$$

Also müssen die $n+1$ Zahlen $m_0, ..., m_n$ den $n-1$ Gleichungen des linearen Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \lambda_0 & 2 & \mu_0 & & & \\ & \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \\ \vdots \\ r_{n-2} \end{pmatrix}$$

genügen, wobei λ_k, μ_k, r_k durch

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{h_{k+1}}{h_k + h_{k+1}} \\ \mu_k &= \frac{h_k}{h_k + h_{k+1}} \\ r_k &= \frac{3h_{k+1}}{h_k(h_k + h_{k+1})}(f_{k+1} - f_k) + \frac{3h_k}{h_{k+1}(h_k + h_{k+1})}(f_{k+2} - f_{k+1}) \end{aligned}$$

für $k = 0, ..., n-2$ gegeben sind. Die Systemmatrix und die erweiterte Systemmatrix haben den Rang $n-1$. Somit ist das Gleichungssystem lösbar, besitzt aber keine eindeutige Lösung. Um solche zu erhalten, kann man zusätzliche Bedingungen stellen, etwa

(a) **natürliche Randbedingungen:**

$$s''(x_0) = s''(x_n) = 0 \tag{7}$$

Diese sind gleichbedeutend mit

$$s_0''(x_0) = 6a_0(x - x_0) + 2b_0 = 0 \quad \text{und} \quad s_{n-1}''(x_n) = 6a_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + 2b_{n-1} = 0$$

Also folgt

$$b_0 = 0 \quad \text{und} \quad 3a_{n-1}h_{n-1} + b_{n-1} = 0$$

Nutzt man noch die Darstellung für b_0 sowie für a_{n-1} und b_{n-1}, so folgt

$$2m_0 + m_1 = \frac{3}{h_0}(f_1 - f_0) \quad \text{und} \quad m_{n-1} + 2m_n = \frac{3}{h_{n-1}}(f_n - f_{n-1})$$

Fügt man beide Gleichungen geeignet zum obigen System hinzu, erhält man ein lineares Gleichungssystem mit einer regulären trigonales Systemmatrix. Dieses kann in $\mathcal{O}(n)$ Operationen gelöst werden.

(b) **Vollständige Randbedingungen:** Sind $f'(a)$ und $f'(b)$ bekannt, dann können die zusätzlichen Bedingungen

$$s'(x_0) = f'(a) \quad \text{und} \quad s'(x_n) = f'(b) \tag{8}$$

mittels $m_0 = f'(a)$ und $m_n = f'(b)$ geeignet in das Gleichungssystem eingefügt werden, so dass man analog zu Fall (a) eine trigonale reguläre Systemmatrix erhält.

(c) **Periodische Spline-Interpolation:** Falls

$$f'(a) = f'(b) \tag{9}$$

und $f''(a) = f''(b)$ gilt, dann sind

$$s'(x_0) = s'(x_n) \quad \text{und} \quad s''(x_0) = s''(x_n) \tag{10}$$

sinnvolle Randbedingungen, woraus sich zwei zusätzliche lineare Gleichungen zur Ergänzung des Gleichungssystems ableiten lassen.

(d) (nicht in der Vorlesung) **Not-in-knot Bedingung:** Es soll zusätzlich

$$s_0'''(x_1) = s_1'''(x_1) \quad \text{und} \quad s_{n-2}'''(x_{n-1}) = s_{n-1}'''(x_{n-1})$$

gelten, das heißt s ist auf $[x_0, x_2]$ und auf $[x_{n-2}, x_n]$ ein Polynom dritten Grades. Man erhält daraus die Forderungen $a_0 = a_1$ und $a_{n-2} = a_{n-1}$, woraus sich zusätzliche Gleichungen in den

Variablen m_0, m_1, m_2 und m_{n-2}, m_{n-1}, m_n ergeben.

3.4. Eine Minimaleigenschaft kubischer C^2-Interpolationssplines

Durch

$$\langle f, g\rangle := \int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x \quad \text{bzw.} \quad \|g\|_2 := \sqrt{\int_a^b g(x)^2\mathrm{d}x} \quad \text{für } f, g \in L^2[a,b]$$

ist ein Skalarprodukt bzw. eine Norm in $L^2[a,b]$ definiert.

Satz 3.3
Seien $f \in C^2[a,b]$, Δ eine Zerlegung von $[a,b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (9)) erfüllt, gilt:

$$\|s''\|_2^2 = \|f''\|_2^2 - \|f'' - s''\|_2^2 \leq \|f''\|_2^2$$

Beweis. Durch Nachrechnen sieht man

$$\int_a^b (f''(x))^2\mathrm{d}x - \int_a^b (f''(x) - s''(x))^2\mathrm{d}x = \int_a^b (s''(x))^2\mathrm{d}x + 2\int_a^b \left[f''(x) - s''(x)\right] s''(x)\mathrm{d}x$$

Es wird nun $J := \int_a^b \left[f''(x) - s''(x)\right] s''(x)\mathrm{d}x = 0$ gezeigt. Mit Hilfe partieller Integration folgt

$$J = \left[f'(x) - s'(x)\right] s''(x)|_a^b - \int_a^b \left[f'(x) - s'(x)\right] s'''(x)\mathrm{d}x$$

wobei s''' auf jedem Teilintervall $[x_k, x_{k+1}]$ konstant ist. Dies ergibt wegen Gleichung (1)

$$\begin{aligned}\int_a^b \left[f'(x) - s'(x)\right] s'''(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1} s'''\left(x_k + \frac{h_k}{2}\right) \int_{x_k}^{x_{x+1}} f'(x) - s'(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} s'''\left(x_k + \frac{h_k}{2}\right) \left(\left[f(x_{k+1}) - s(x_{k+1})\right] - \left[f(x_k) - s(x_k)\right]\right) \\ &= 0\end{aligned}$$

und damit

$$J = \left[f'(x) - s'(x)\right] s''(x)|_a^b = \left[f'(b) - s'(b)\right] s''(b) - \left[f'(a) - s'(a)\right] s''(a)$$

Nutzt man nun noch Gleichung (7), Gleichung (8) bzw. Gleichung (9) mit Gleichung (10), so folgt $J = 0$. □

Anmerkung

- Gleichung (7): natürliche Randbedingungen: $s''(a) = s''(b) = 0$
- Gleichung (8): vollständige Randbedingungen: $s(a') = f'(a)$, $s'(b) = f'(b)$
- Gleichung (9) und Gleichung (10): periodische Randbedingungen: $s'(a) = s'(b)$, $s''(a) = s'(b)$, $f'(a) = f'(b)$

3.5. Interpolationsfehler bei kubischer C^2-Interpolation

Anmerkung
Die CAUCHY-SCHWARZ-Ungleichung hat folgende Form:

$$|\langle f, g\rangle| \leq \|f\|_2 \cdot \|g\|_2$$

Satz 3.4
Seien $f \in C^2[a,b]$, Δ eine Zerlegung von $[a,b]$ und $f_k := f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Für einen Interpolationsspline $s \in \mathcal{S}_3^2(\Delta)$, der die natürlichen, vollständigen oder periodischen Randbedingungen (bei letzteren gelte Gleichung (9)) erfüllt, gilt:

$$\|f - s\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^{3/2} \|f''\|_2$$

wobei $h := \max\{h_0, ..., h_{n-1}\}$.

Beweis. Die Funktion $r := f - s$ hat wegen Gleichung (1) die $n+1$ Nullstellen $x_0, ..., x_n$. Der maximale Abstand benachbarter Nullstellen ist h. Nach dem Satz von Rolle besitzt r' mindestens n Nullstellen. Der Abstand zweier Nullstellen von r' ist durch $2h$ nach oben beschränkt. Sei $z \in [a,b]$ so gewählt, dass $|r'(z)| = \|r'\|_\infty$. Dann gilt $|z - z^0| \leq h$ für die z am nächsten liegende Nullstelle z^0 von r'. O.B.d.A. sei $z^0 \leq z$. Mit der CAUCHY-SCHARZ-Ungleichung folgt:

$$\begin{aligned}
\|r'\|_\infty^2 &= |r'(z) - \underbrace{r'(z^0)}_{z^0 \text{ NST}}|^2 \\
&\overset{*}{=} \left| \int_{z^0}^{z} r''(x) \cdot 1 \mathrm{d}x \right|^2 \\
&\underset{\text{UG}}{\overset{\text{CS}}{\leq}} \int_{z^0}^{z} r''(x)^2 \mathrm{d}x \cdot \underbrace{\int_{z^0}^{z} 1^2 \mathrm{d}x}_{= z - z^0 \leq h} \\
&\leq h \|r''\|_2^2
\end{aligned} \tag{11}$$

$*$: Anwendung des Hauptsatzes der Integralrechnung

Sei nun $y \in [a,b]$ so gewählt, dass $|r(y)| = \|r\|_\infty$. Dann gilt $|y - y_0| \leq h/2$ für die y am nächsten liegende Nullstelle y^0 von r. O.B.d.A. sei $y^0 \leq y$. Mit Gleichung (11) ergibt sich

$$\|r\|_\infty = |r(y) - r(y^0)| = \left| \int_{y^0}^{y} r'(x) \mathrm{d}x \right| \leq \max |r'(x)| \cdot \int_{y^0}^{y} \mathrm{d}x \leq \frac{1}{2} \|r'\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^{3/2} \|r''\|_2$$

Mit Satz 3.3 hat man $\|r''\|_2 \leq \|f\|_2$ und damit die Behauptung. □

▶ **Bemerkung 3.5**
Besitzt f eine höhere Glattheit, so kann die obige Fehlerschranke bezüglich der h-Potenz verbessert werden. Es lassen sich ferner Abschätzungen für $\|f' - s'\|_\infty$ und $\|f'' - s''\|_\infty$ herleiten.

Kapitel II

numerische Integration (Quadratur)

1. Integration von Interpolationspolynomen

Für eine Funktion $f \in C[a,b]$ ist eine Näherung für den Wert des bestimmten Integrals

$$J(f) := \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

gesucht. Seien $a \leq x_0 < ... < x_n \leq b$ Stützstellen und $f_k = f(x_k)$ für $k = 0, ..., n$. Weiter bezeichne $p_n \in \Pi_n$ das zugehörige Interpolationspolynom. Dann kann man

$$Q_n(f) := J(p_n) = \int_a^b p_n(x)\mathrm{d}x$$

als Näherung für $J(f)$ verwenden. Mit der LAGRANGE-Form des Interpolationspolynoms sieht man, dass

$$Q_n(f) = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f_k \cdot L_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} f_k \cdot \int_a^b L_k(x)\mathrm{d}x$$

das heißt die Quadraturformel $Q_n(f)$ ist die gewichtete Summe von Funktionswerten der Funktion f mit den Gewichten $\int_a^b L_k(x)\mathrm{d}x$.

2. Newton-Cotes-Formeln

Falls die Stützstellen gleichabständig sind mit $x_0 = a$ und $x_n = b$, das heißt

$$x_{k+1} = x_k + h \quad \text{für } k = 0, ..., n-1 \tag{1}$$

mit der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ gilt, so nennt man $Q_n(f)$ geschlossene Newton-Cotes-Formel . Ist $a < x_0$ und $x_n < b$ und gilt Gleichung (1) mit $h = \frac{b-a}{n+2}$, so bezeichnet man $Q_n(f)$ als offene Newton-Cotes-Formel . Im Folgenden wollen wir uns auf den Fall geschlossener Newton-Cotes-Formeln beschränken.

3. spezielle Newton-Cotes-Formeln

Für $n = 1$ erhält man die Trapezformel mit $x_0 = a$, $x_1 = b$ und $h = b - a$ wie folgt:

$$Q_1(f) = f_0 \int_a^b L_0(x)\mathrm{d}x + f_1 \int_a^b L_1(x)\mathrm{d}x$$

Mit

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{b - x}{h} \quad \text{und} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - a}{h}$$

$$\int_a^b L_0(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{h}\int_a^b (b - x)\mathrm{d}x = \frac{1}{h}\left(bx - \frac{1}{2}x^2\right)\Big|_a^b = \frac{1}{h}\left(\frac{b^2}{2} - ab + \frac{a^2}{2}\right) = \frac{h}{2}$$

$$\int_a^b L_1(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}$$

folgt

$$Q_1(f) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1)$$

Für Polynomgrad $n = 2$ erhält man auf ähnliche Weise die SIMPSON-Formel (auch KEPLER'sche Fassregel genannt):

$$Q_2(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

Für Polynomgrade bis $n = 6$ findet man weitere Formeln in der Literatur. Formeln nur $n > 6$ werden aus numerischen Gründen nicht verwendet. Es können dann negative Gewichte auftreten.

Satz 3.1

(a) Sei $f \in C^2[a, b]$. Dann gilt:

$$|Q_1(f) - J(f)| \leq \frac{1}{12}h^3\|f''\|_\infty$$

(b) Sei $f \in C^4[a, b]$. Dann gilt:

$$|Q_2(f) - J(f)| \leq \frac{1}{12}h^5\|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis. (a) Für die Trapezformel erhält man mit Satz 2.9

$$|Q_1(f) - J(f)| = \left|\int_a^b f(x) - p_1(x)\mathrm{d}x\right| \leq \frac{\|f''\|_\infty}{2!}\int_a^b |(x - a)(x - b)|\mathrm{d}x$$

Mit $y := x - \frac{a+b}{2}$ ergibt sich:

$$x - a = y + \frac{b-a}{2} = y + \frac{h}{2} \quad \text{und} \quad x - b = y + \frac{a-b}{2} = y - \frac{h}{2}$$

$$\int_a^b |(x-a)(x-b)|\mathrm{d}x = -\int_{-h/2}^{h/2} \left(y + \frac{h}{2}\right)\left(y - \frac{h}{2}\right)\mathrm{d}y = -\left(\frac{1}{3}y^3 - \frac{1}{4}h^2 y\right)\Big|_{-h/2}^{h/2} = \frac{1}{6}h^3$$

(b) Zur Analyse des Quadraturfehlers der SIMPSON-Formel untersuchen wir zunächst

$$W := \int_a^b (x-a)(x-x_1)(x-b)\mathrm{d}x$$
$$\bar{W} := \int_a^b |(x-a)(x-x_1)(x-b)|\mathrm{d}x$$

Mit der Substitution $y := x - x_1$ folgen $x - a = y + h$, $x - x_1 = y$ und $x - b = y - h$, also

$$W = \int_a^b (y+h)y(y-h)\mathrm{d}y = 0 \tag{1}$$

da die zu integrierende Funktion $y \mapsto (y+h)y(y-h)$ ungerade ist. Weiter erhält man

$$\overline{W} = \int_{-h}^{h} |(y+h)y(y-h)|\mathrm{d}y = -2\int_0^h (y^2 - h^2)y\mathrm{d}y = \frac{1}{2}h^4 \tag{2}$$

Wegen Satz 2.9 haben wir

$$f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi(x))}{3!}w(x) = \frac{1}{6}f'''(x_1)w(x) + \frac{1}{6}(f'''(\xi(x)) - f'''(x))w(x)$$

für alle $x \in [a,b]$. Insbesondere ist daher $x \mapsto f'''(\xi(x))$ eine Funktion aus $C^4[a,b]$. Durch Integration folgt mit Gleichung (1):

$$\begin{aligned}\left|\int_a^b f(x) - p_2(x)\mathrm{d}x\right| &= \frac{1}{6}\left|f'''(x_1)\int_a^b w(x)\mathrm{d}x + \int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1))w(x)\mathrm{d}x\right| \\ &= \frac{1}{6}\left|\int_a^b (f'''(\xi(x)) - f'''(x_1))w(x)\mathrm{d}x\right| \\ &\le \max_{x\in[a,b]}\left\{\left|f'''(x) - f'''(x_1)\right| \cdot \int_a^b |w(x)|\mathrm{d}x\right\}\end{aligned} \tag{3}$$

Da $f \in C^[a,b]$ erhält man mit dem Mittelwertsatz

$$|f'''(x) - f'''(x_1)| = |f^{(4)}(\zeta(x))| \cdot |x - x_1| \le h\|f^{(4)}\|_\infty$$

mit $\zeta \in (a,b)$. Deshalb und wegen Gleichung (2) folgt aus Gleichung (3) weiter

$$|Q_2(f) - J(f)| = \left|\int_a^b f(x) - p_2(x)\mathrm{d}x\right| \le \frac{1}{12}h^5\|f^{(4)}\|_\infty \qquad \square$$

▶ **Bemerkung 3.2**

Durch verfeinerte Abschätzungen kann man in Satz 3.1 b)

$$|Q_2(f) - J(f)| \leq \frac{1}{90} h^5 \|f^{(4)}\|_\infty \tag{4}$$

erreichen. Auch für Quadraturformeln $Q_n(f)$ mit $n > 2$ lassen sich entsprechende Ergebnisse für den Quadraturfehler herleiten, insbesondere hat der Quadraturfehler für $n = 3$ mit $f \in C^4[a, b]$ die Ordnung h^5 und für $n = 4$ mit $f \in C^6[a, b]$ die Ordnung h^7.

4. Zusammengesetzte Newton-Cotes-Formeln

Um den Quadraturfehler weiter zu reduzieren, bietet es sich unter Berücksichtigung der Abschätzung des Quadraturfehlers in Satz 3.1 an, das Intervall $[a, b]$ in r Teilintervalle zu zerlegen und auf jedem der Teilintervalle dieselbe Quadraturformel (niedriger Ordnung) anzuwenden. Dazu wird das Intervall $[a, b]$ in $l = rn$ Elementarintervalle gleicher Länge zerlegt, wobei n die Ordnung des auf jedem Teilintervall zu verwendenden Interpolationspolynoms ist. Mit $f_0, ..., f_l$ werden die Funktionswerte an den Stellen $x_k = a + kh$ für $k = 0, ..., l$ bezeichnet, wobei $h = \frac{b-a}{l}$ die Länge des Elementarintervalls ist. Die zusammengesetzte Trapezformel ist dann gegeben durch:

$$T_h(f) = \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + ... + 2f_{l-1} + f_l)$$

die zusammengesetzte SIMPSON-Formel durch

$$S_h(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + ... + 2f_{l-2} + 4f_{l-1} + f_l)$$

Satz 4.1

(a) Für $f \in C^2[a, b]$ gilt

$$|T_h(f) - J(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_\infty$$

(b) Für $f \in C^4[a, b]$ gilt

$$|S_h(f) - J(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

Beweis. Wendet man Satz 3.1 auf die SIMPSON-Formel (unter Beachtung von Gleichung (4)) für $[x_k, x_{k+2}]$ anstelle von $[a, b]$ an, so folgt

$$|S_h(f) - J(f)| = \left| S_h(f) - \sum_{k=0}^{r-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x)\mathrm{d}x \right| \leq \frac{1}{90} r h^5 \|f^{(4)}\|_\infty \leq \frac{b-a}{2 \cdot 90} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

und damit Behauptung b). Behauptung a) zeigt man auf ähnliche Weise. □

5. Gauss'sche Quadraturformeln

Wir gehen zunächst vom Interpolationsfehler (vgl. Satz 2.9)

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} w_n(x) \quad \text{für } x \in [a,b]$$

mit $w_n(x) = (x-x_0)...(x-x_n)$ aus. Bezogen auf das ganze Intervall $[a,b]$, kann man etwa $\|f-p_n\|_\infty$ oder $\|f-p_n\|_2$ als Maß für diesen Fehler verwenden. Da man über $f^{(n+1)}$ nicht verfügt, wird anstelle dessen $\|w_n\|_\infty$ oder $\|w_n\|_2$ untersucht. Dieses Fehlermaß ist offenbar nur von der Lage der Stützstellen $x_0, ..., x_n \in [a,b]$ abhängig. Zur Vereinfachung beschränkt man sich zunächst auf das Intervall $[-1,1]$. Die Aufgabe, die Funktion

$$F_\infty : \begin{cases} \mathbb{R}^{n+1} & \to \mathbb{R} \\ F_\infty(x_0,...,x_n) & \mapsto \max\limits_{x\in[-1,1]} |(x-x_0)...(x-x_n)| \end{cases}$$

unter der Bedingung $(x_0,...,x_n) \in [-1,1]^{n+1}$ zu minimieren, hat als Lösung die Nullstellen des sogenannten TSCHEBYSCHOW-Polynoms T_{n+1} der Ordnung $n+1$. Die Funktion

$$F_2 : \begin{cases} \mathbb{R}^{n+1} & \to \mathbb{R} \\ F_2(x_0,...,x_n) & \mapsto \int_{-1}^{1} (x-x_0)^2...(x-x_n)^2 \mathrm{d}x \end{cases}$$

wird unter der Bedingung $(x_0,...,x_n) \in [-1,1]^{n+1}$ durch die Nullstellen des sogenannten LEGENDRE-Polynoms P_{n+1} minimiert. Die LEGENDRE-Polynome können rekursiv wie folgt definiert werden:

$$\begin{aligned} P_0(t) &= 1 \\ P_1(t) &= t \\ &\vdots \\ (k+1)P_{k+1}(t) &= (2k+1)tP_k(t) - kP_{k-1}(t) \end{aligned}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ und $k = 1, 2, ...$ Für $n = 1$ erhält man zum Beispiel $P_2(t) = t^2 - \frac{1}{3}$ mit den Nullstellen $x_{1/2} = \pm\frac{\sqrt{3}}{3}$. Das Interpolationspolynom zu diesem Stützstellen und den Stützwerten $f_0 = f(x_0)$ sowie $f_1 = f(x_1)$ lautet dann (in der LAGRANGE-Form)

$$q_1(x) = f_0 \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + f_1 \frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

Wegen

$$\int_{-1}^{1} \frac{x-x_1}{x_0-x_1} \mathrm{d}x = -\frac{\sqrt{3}}{2} \int_{-1}^{1} \left(x - \frac{\sqrt{3}}{3}\right) \mathrm{d}x = 1$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \mathrm{d}x = 1$$

hat man die Gauss-Legendre-Quadraturformel für das Integral $\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x$ für $n = 1$:

$$f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

Man kann zeigen, dass die Gauss-Legendre-Quadraturformel mit $n+1$ Stützstellen (also den Nullstellen von P_{n+1}) Polynome bis zum Grad $2n+1$ exakt integriert. Bei den geschlossenen Newton-Cotes-Formeln ist dies nur bis Grad n (falls n ungerade) bzw. bis zum Grad $n+1$ (falls n gerade) möglich (vgl. Übungsaufgabe). Spezielle Modifikationen der Gauss-Legendre-Quadratur beziehen einen Randpunkt (Gauss-Radau) oder beide Randpunkte (Gauss-Lobatto) des Integrals mit ein.

Falls über $[a, b]$ zu integrieren ist, führt eine Variablentransformation auf ein Integral über $[-1, 1]$ zum Ziel. Mit

$$y = \frac{2}{b-a}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)$$

ergibt sich $x = \frac{b-a}{2}y + \frac{a+b}{2}$, $\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\mathrm{d}y$ und

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}y + \frac{a+b}{2}\right)\mathrm{d}y$$

Kapitel III

direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme

1. Gauss'scher Algorithmus für quadratische Systeme

1.1. Grundform des Gauss'schen Algorithmus

■ **Beispiel 1.1**

$$\begin{aligned} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 &= 10 \quad E_1 \\ x_1 + 3x_2 + 6x_3 &= 25 \quad E_2 \\ -x_1 + 2x_2 + x_3 &= 6 \quad E_3 \end{aligned}$$

E_1 behalten $\to E_1'$, $E_2 - \frac{1}{2}E_1 \to E_2'$, $E_3 + \frac{1}{2}E_1 \to E_3'$

$$\begin{aligned} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 &= 10 \quad E_1' \\ 4x_2 + 4x_3 &= 20 \quad E_2' \\ x_2 + 3x_3 &= 11 \quad E_3' \end{aligned}$$

E_1' behalten $\to E_1''$, E_2' behalten $\to E_2''$, $E_3' - \frac{1}{4}E_2' \to E_3''$

$$\begin{aligned} 2x_1 - 2x_2 + 4x_3 &= 10 \quad E_1'' \\ 4x_2 + 4x_3 &= 20 \quad E_2'' \\ 2x_3 &= 6 \quad E_3'' \end{aligned}$$

$\Rightarrow x_3 = 3$, $x_2 = 2$, $x_1 = 1$

Alle drei Systeme sind äquivalent, das heißt ihre Lösungsmengen sind gleich. Das letzte System wird Dreieckssystem oder System in Zeilenstufenform oder gestaffeltes System genannt.

Gegeben seien $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b = (b_i) \in \mathbb{R}^n$. Gesucht ist, falls vorhanden, eine Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & \ldots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \vdots & & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & \ldots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

bzw. in Matrix-Schreibweise: $Ax = b$.

Prinzipielles Vorgehen

1. Vorwärtselimination (unter Voraussetzung der Durchführbarkeit): Schrittweise Transformation der erweiterten Koeffizientenmatrix

$$(A, b) = (A^{(1)}, b^{(1)}) \to (A^{(2)}, b^{(2)}) \to ... \to (A^{(n)}, b^{(n)}) = (U, z)$$

wobei U eine obere Dreiecksmatrix ist. Der Eliminationsschritt $(A^{(k)}, b^{(k)}) \to (A^{(k+1)}, b^{(k+1)})$ für $k = 1, ..., n-1$ verwendet die Eliminationsfaktoren

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

um die i-te Zeile der neuen Matrix aus der alten Matrix zu bestimmen

neue Zeile i = alte Zeile i	für $i = 1, ..., k$
neue Zeile i = alte Zeile $i - l_{ik} \cdot$ neue Zeile k	für $i = k+1, ..., n$

2. Rücksubstitution (unter Voraussetzung der Durchführbarkeit): Lösung des Gleichungssystems $Ux = z$ nach x für gegebenes U, z

■ **Algorithmus 1.2 (Vorwärtselimination)**
Input: n, A, b

```
1  do k= 1, n-1
2   do i = k+1, n
3    l_ik = a_ik / a_kk
4    b_i = b_i - l_ik b_k
5    do j = k+1, n
6     a_ij = a_ij - l_ik a_kj
7    end do
8   end do
9  end do
```

Output: (U, z) und l_{ik} für $i > k$. U steht in der oberen Hälfte von A mit Hauptdiagonale, b enthält z, die Zahlen l_{ik} lassen sich in der unteren Hälfte von A abspeichern.

■ **Algorithmus 1.3 (Rücksubstitution)**
Input: n, U, z

```
1  do i = n, 1, -1
2   s = 0
3   do j = i+1, n
4    s = s + u_ij x_j
```

```
5    end do
6  end do
```

Output: x

Der Aufwand bei uneingeschränkter Durchführbarkeit von Algorithmus 1.2 ist $\sim \frac{2}{3}n^3$ und Algorithmus 1.3 ist $\sim n^2$

Durchführbarkeit

Der Algorithmus 1.2 ist genau dann durchführbar, wenn $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ für alle $k = 1, ..., n-1$ gilt. Gilt auch $a_{nn}^{(n)} \neq 0$, so folgt $u_{ii} \neq 0$ für $i = 1, ..., n$ und damit die Durchführbarkeit von Algorithmus 1.3.

Definition 1.4 (streng diagonaldominant)
Eine Matrix $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt streng diagonaldominant , wenn

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \quad \text{für alle } i = 0, ..., n$$

Lemma 1.5
Ist die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ streng diagonaldominant, so sind Algorithmus 1.2 und Algorithmus 1.3 durchführbar

Beweis (nicht in der Vorlesung). Die Matrix $A^{(1)}$ sei streng diagonaldominant. Weiter seien die Matrizen $A^{(k)}$ für ein $k \in \{1, ..., n-1\}$ durch Vorwärtselimination erzeugt und streng diagonaldominant. Dies zieht $|a_{kk}^{(k)}| > 0$ nach sich, so dass die Erzeugung von $A^{(k+1)}$ durch Vorwärtselimination wohldefiniert ist. Es wird nun gezeigt, dass $A^{(k+1)}$ wieder streng diagonaldominant ist. Da $A^{(1)} = A$ als streng diagonaldominant vorausgesetzt wurde, folgt dann die Durchführbarkeit der gesamten Vorwärtselimination durch vollständige Induktion. Sei $i > k$ eine Zeile der Matrix $A^{(k+1)}$. Dann hat man

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}^{(k+1)}| \sum_{\substack{j=k+1 \\ j\neq i}} |a_{ij}^{(k+1)}| &= \sum_{\substack{j=k+1 \\ j\neq i}}^{n} \left| a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{kj}^{(k)} a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
&\leq \sum_{\substack{j=k+1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}^{(k)}| + \left| \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \sum_{\substack{j=k+1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{kj}^{(k)}| \\
&< |a_{ii}^{(k)}| - |a_{ik}^{(k)}| + \left| \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \left(|a_{kk}^{(k)}| - |a_{ki}^{(k)}| \right) \\
&= |a_{ii}^{(k)}| - \left| \frac{a_{ik}^{(k)} a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
&\leq \left| a_{ii}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right| \\
&= |a_{ii}^{(k+1)}|
\end{aligned}$$

Falls $i \leq k$, so ändert sich $A^{(k+1)}$ gegenüber $A^{(k)}$ bezüglich der Zeile i nicht. Also ist $A^{(k+1)}$ streng diagonaldominant und man schließt auf die Durchführbarkeit der Vorwärtselimination für $k = 1, ..., n-1$ und insbesondere auf $|a_{ii}^{(n)}| > 0$ für $i = 1, ..., n$. DIe Matrix $A^{(n)}$ enthält die Matrix U im oberen Dreieck, deren Diagonalelemente

sind gerade $a_{11}^{(n)}, ..., a_{nn}^{(n)}$, also ist auch die Rücksubstitution wohldefiniert. □

1.2. Pivotisierung

Die Regularität der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist zwar äquivalent zur Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems $Ax = b$, für jeden beliebigen Vektor $b \in \mathbb{R}^n$, jedoch sichert die Regularität nicht die Durchführbarkeit der Grundform des GAUSS'schen Algorithmus. Um die Durchführbarkeit bei regulärem A zu erzwingen, kann man eine Spaltenpivotisierung der Matrix durchführen. Dabei werden in jedem Durchlauf der Vorwärtselimination auf bestimmte Weise Zeilen der Matrix (A, b) vertauscht:

- Bestimme $p = p(k) \in \{k, ..., n\}$, sodass $|a_{pk}^{(k)} = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$.
  k-te Spalte von $A^{(k)}$ heißt Pivotspalte , $a_{pk}^{(k)}$ heißt Pivotelement , die Regularität von A sichert dann $a_{pk}^{(k)} \neq 0$
- Vertausche die Zeilen p und k in der Matrix $(A^{(k)}, b^{(k)})$.
  praktisch: Zeilentausch nicht ausführen, sondern einen Permutationsvektor mitführen.
  formal: Beschreibung der Zeilen- und Spaltenvertauschungen durch Permutationsmatrizen. Dazu sei $\pi : \{1, ..., n\} \to \{1, ..., n\}$ eine Permutation und e_i bezeichne den i-ten kanonischen Einheitsvektor. Dann heißt $P_\pi = (e_{\pi(1)}, ..., e_{\pi(n)})$ Permutationsmatrix .

Satz 1.6
Ist die Matrix A regulär, so ist der GAUSS'sche Algorithmus mit Spaltenpivotisierung (bei exakter Arithmetik) durchführbar.

Weitere Pivotisierungstechniken sind insbesondere die Zeilenpivotisierung (in Analogie zur Spaltenpivotisierung) und die vollständige Pivotisierung .

1.3. LU-Faktorisierung

Der k-te Schritt von Algorithmus 1.2 (ohne Pivotisierung) lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} A^{(k+1)} &= L_k A^{(k)} \\ b^{k+1} &= L_k b^{(k)} \end{aligned} \tag{1}$$

mit der Gauss'schen Eliminationsmatrix

$$L_k = \begin{pmatrix} & & & k & & \\ 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & -l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & -l_{n,k} & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ k\text{-te Zeile} \\ \\ \\ \end{matrix}$$

Satz 1.7
Es gelten

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & l_{n,k} & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_1^{-1} \cdot \ldots \cdot L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \ldots & 1 \end{pmatrix} = L$$

Beweis. (a) Zunächst erkennt man, dass $L_k = \mathbb{1} - l_k e_k^T$, wobei $\mathbb{1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Einheitsmatrix und $e_k \in \mathbb{R}^n$ den k-ten kanonischen Einheitsvektor bezeichnen. Damit erhält man

$$\begin{aligned} L_k(\mathbb{1} + l_k e_k^T) &= (\mathbb{1} - l_k e_k^T)(\mathbb{1} + l_k e_k^T) \\ &= \mathbb{1} - l_k e_k^T + l_k e_k^T - l_k e_k^T l_k e_k^T \\ &\overset{(*)}{=} \mathbb{1} \end{aligned}$$

$(*)$ $l_k e_k^T = 0$, da l_k erst an der $k+1$-ten Stelle einen Wert hat, aber e_k nur an der k-ten Stelle eine 1 hat

(b) Es wird durch vollständige Induktion gezeigt, dass

$$L_1^{-1} \cdot \ldots \cdot L_{n-1}^{-1} = \mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k} l_i e_i^T \tag{2}$$

für $k = 1, \ldots, n-1$ gilt. Daraus ergibt sich unmittelbar die zweite Aussage des Satzes. Für $k = 1$ folgt Gleichung (2) direkt aus Teil (a). Sei nun Gleichung (2) für ein $k < n-1$ erfüllt. Dann folgt mit $e_i^T l_{k+1} = 0$ für $i < k$, dass

$$\begin{aligned} L_1^{-1} \cdot \ldots \cdot L_{k+1}^{-1} &= \left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k} l_i e_i^T \right) L_{k+1}^{-1} \\ &= \left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k} l_i e_i^T \right) \left(\mathbb{1} + l_{k+1} e_{k+1}^T \right) \\ &= \mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k} l_i e_i^T + l_{k+1} e_{k+1}^T + \sum_{i=1}^{k} l_i e_i^T l_{k+1} e_{k+1}^T \\ &= \mathbb{1} + \sum_{i=1}^{k+1} l_i e_i^T \end{aligned}$$

□

Aus $A^{(k+1)} = L_k A^{(k)}$ nach Gleichung (1) folgt

$$A = A^{(1)} = L_1^{-1} A^{(2)} = \ldots = L_1^{-1} \cdot \ldots \cdot L_{n-1}^{-1} A^{(n)} = L \cdot U$$

und analog $b = Lz$.

Satz 1.8
Seien $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ gegeben. Falls Algorithmus 1.2 ohne Pivotisierung durchführbar ist, dann gilt $A = LU$ mit der oberen Dreiecksmatrix $U = A^{(n)}$ und der unteren Dreiecksmatrix $L = (l_{ik})$ mit

$$l_{ik} = \begin{cases} 0 & i < k \\ 1 & i = k \\ l_{ik} & i > k \end{cases}$$

■ **Algorithmus 1.9 (LU-Version der Grundform des Gauss'schen Algorithmus)**
Input: A, b

```
1 compute L,U
2 solve Lz=b
3 solve Ux=z
```

Output: x, L, U

Der Aufwand an Rechenoperationen bei uneingeschränkter Durchführbarkeit: $\frac{2}{3}n^3 + 2n^2$.

Ein Vorteil der LU-Version besteht darin, dass man mit einer ermittelten LU-Faktorisierung von A das Gleichungssystem $Ax = b$ für mehrere rechte Seiten b mit dem Aufwand von je $2n^2$ lösen kann.

Satz 1.10
Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär. Dann gibt es eine durch Zeilenvertauschungen aus A hervorgegangene Matrix $\tilde{A}$, für die Algorithmus 1.2 ohne Pivotisierung durchführbar ist und $\tilde{A} = \tilde{L}\tilde{U}$.

Beweis. Nach Satz 1.6 ist der GAUSS'sche Algorithmus mit Spaltenpivotisierung durchführbar. Wendet man die dabei vorkommenden Zeilenvertauschungen vor Beginn von Algorithmus 1.2 auf A an, entsteht die Matrix $\tilde{A}$. Für $A = \tilde{A}$ liefert Satz 1.8 die Darstellung $\tilde{A} = \tilde{L}\tilde{U}$. Die Regularität von U folgt aus der Regularität von A mit dem Determinantenmultiplikationssatz. □

1.4. Gauss'scher Algorithmus für trigonale Systeme

Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ trigonal, das heißt

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \tag{3}$$

Die Speicherung kann mittels geeigneter Vektoren, etwa

$$\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)^T \quad \beta = (\beta_1, ..., \beta_{n-1}, 0)^T \quad \gamma = (0, \gamma_2, ..., \gamma_n)^T \tag{4}$$

erfolgen. Angenommen Algorithmus 1.2 ist ohne Pivotisierung durchführbar. Dann gibt es eine LU-Faktorisierung von A. Aus der Trigonalität von A und aus $A = LU$ ergibt sich die folgende Gestalt für L und U

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad U = \begin{pmatrix} d_1 & \beta_1 & & & \\ & d_2 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & d_n \end{pmatrix} \tag{5}$$

mit $d_1 = \alpha_1$ und $l_k = \frac{\gamma_k}{d_{k-1}}$, $d_k = \alpha_k - l_k\beta_k$ für $k = 2, ..., n$.

■ **Algorithmus 1.11 (LU-Faktorisierung einer trigonalen Matrix ohne Pivotisierung)**
Input: α, β, γ entsprechend Gleichung (3) und Gleichung (4)

```
1  d_1 = α_1
2  do k = 2, n
```

```
3    l_k = γ_k / d_{k-1}
4    d_k = α_k - l_k β_k
5  end do
```

Output: $l = (0, l_2, ..., l_n)^T$, $d = (d_1, ..., d_n)^T$ für Gleichung (5)

▶ **Bemerkung 1.12**

Der Aufwand für Algorithmus 1.11 beträgt etwa $3n$ Operationen. Auch das Lösen der Dreiecksysteme $Lz = b$ und $Ux = z$ ist billig (je etwa $2n^2$). Bei Spaltenpivotisierung kommt in U im Allgemeinen eine zweite Nebendiagonale hinzu. Die dargestellte Verfahrensweise lässt sich auf Systeme mit Bandmatrizen erweitern, die mehr als je eine untere bzw. obere Nebendiagonale besitzen.

2. Cholesky-Faktorisierung für symmetrische positiv definite Matrizen

Definition 2.1 (positiv definit)
Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt positiv definit , wenn

$$x^T Ax > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$$

Bekannt sind folgende Zusammenhänge:

- Falls A symmetrisch ist, besitzt A nur reelle Eigenwerte.
- Sei A symmetrisch. Dann ist A genau dann positiv definit, wenn alle Eigenwerte von A positiv sind.
- Eine Matrix A ist genau dann positiv definit, wenn ihr symmetrischer Anteil $\frac{1}{2}(A + A^T)$ positiv definit ist.

2.1. Existenz der Cholesky-Faktorisierung

Satz 2.2
Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch und positiv definit. Dann existiert genau eine untere Dreiecksmatrix $L = (l_{ik})$ mit $l_{kk} > 0$, sodass

$$A = LL^T$$

Beweis. Mittels vollständiger Induktion. Für $n = 1$ gilt $A = (a_{11})$ mit $a_{11} > 0$ (wegen positiver Definitheit). Also gilt die Behauptung genau für $L = (l_{11})$ mit $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$. Sei nun die Behauptung für $n-1$ erfüllt. Die Matrix A kann man wegen ihrer Symmetrie mit geeigneten $A_{n-1} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$, $a \in \mathbb{R}^{n-1}$ und $a_{nn} \in \mathbb{R}$ schreiben als

$$A = \begin{pmatrix} A_{n-1} & a \\ a^T & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{1}$$

Aus der positiven Definitheit von A folgt

$$0 < \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = x^T A_{n-1} x \tag{2}$$

das heißt A_{n-1} ist positiv definit. Nach Induktionsvoraussetzung gibt es genau eine untere Dreiecksmatrix $L_{n-1} = (l_{ij}^{(n-1)})$ mit $l_{kk}^{(n-1)} > 0$ für $k = 1, ..., n-1$. Um A als Produkt der Form $L_n L_n^T$ mit einer unteren Dreiecksmatrix $L_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit ausschließlich positiven Hauptdiagonalelementen darzustellen, ist der Ansatz

$$L_n = \begin{pmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^T & l_{nn} \end{pmatrix}$$

mit freien Parametern $c \in \mathbb{R}^{n-1}$ und $l_{nn} > 0$ die einzige Möglichkeit. Der Ansatz liefert

$$L_n L_n^T = \begin{pmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^T & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{n-1}^T & c \\ 0 & l_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{n-1}L_{n-1}^T & L_{n-1}c \\ c^T L_{n-1}^T & c^T c + l_{nn}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{n-1} & a \\ a^T & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Also müssen c und l_{nn} den Bedingungen $L_{n-1}c = a$ und $c^T c + l_{nn}^2 = a_{nn}$ genügen. Da L_{n-1} regulär ist, folgt

$$c = L_{n-1}^{-1} a \tag{3}$$

so dass c eindeutig bestimmt ist. Es wird nun gezeigt, dass $a_{nn} - c^T c > 0$ ist und damit $l_{nn}^2 > 0$ folgt. Somit ist dann l_{nn} in L_n durch die Bedingung $l_{nn} > 0$ eindeutig festgelegt auf $l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - c^T c}$. Da A positiv definit ist und die Darstellung Gleichung (1) mit $A_{n-1} = L_{n-1}L_{n-1}^T$ nach Induktionsvoraussetzung angenommen werden kann, folgt

$$0 < (x^T, y) A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x^T L_{n-1} L_{n-1}^T x + 2y a^T x + y^2 a_{nn}$$

für alle $(x, y) \in \mathbb{R}^{n-1} \times \mathbb{R}$ mit $(x^T, y) \neq 0$. Setzt man speziell $(x, y) = (\hat{x}, \hat{y})$ mit

$$\hat{x} = (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a \quad \text{und} \quad \hat{y} = -1$$

so folgt mit Gleichung (3) das Gewünschte.

$$0 < a^T (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a - 2a^T (L_{n-1}^T)^{-1} L_{n-1}^{-1} a + a_{nn} = -c^T c + a_{nn} \qquad \square$$

2.2. Berechnung des Cholesky-Faktors

Sei A wieder symmetrisch und positiv definit. Aus $A = LL^T$ folgt durch elementweises Vergleichen beider Matrizen

$$a_{ik} = (LL^T)_{ik} = \sum_{j=1}^{l} l_{ij} (L^T)_{ij} = \sum_{j=1}^{k} l_{ij} l_{kj}$$

Dies sind $\frac{n(n+1)}{2}$ Gleichungen für $\frac{n(n+1)}{2}$ Unbekannte l_{ik}, da A symmetrisch ist. Diese Gleichungen lassen sich durch spaltenweise Bestimmung der l_{ik} in L wie folgt lösen.

■ **Algorithmus 2.3 (Cholesky-Faktorisierung)**
Input: n, A symmetrisch und positiv definit

```
1  do k = 1, n
2   l_kk = sqrt(a_kk - sum_{j=1}^{k-1} l_kj^2)
3   do i = k+1, n
4    l_ik = (a_ik - sum_{j=1}^{k-1} l_ij l_kj) / l_kk
5   end do
6  end do
```

Output: l_{ik} für $1 \leq k \leq i \leq n$

▶ **Bemerkung 2.4**

Der Aufwand von Algorithmus 2.3 beträgt etwa $\frac{n^3}{3}$ Operationen. Der Algorithmus ist genau dann durchführbar, wenn A symmetrisch und positiv definit ist. Andernfalls entsteht im Verlauf des Verfahrens ein nicht-positiver Wert unter der Wurzel. Um das Ziehen der Quadratwurzel zu vermeiden, kann man anstelle von $A = LL^T$ die Umformung

$$A = LL^T = LD^{-1}D^2D^{-1}L^T$$

mit $D = \text{diag}(l_{11}, ..., l_{nn})$ verwenden. Dann ist $\tilde{L} = LD^{-1}$ genau eine untere Dreiecksmatrix mit $l_{kk} = 1$ für $k = 1, ..., n$ und $\tilde{D} = D^2$ eine Diagonalmatrix mit $\tilde{D} = \text{diag}(l_{11}^2, ..., l_{nn}^2)$, sodass die sogenannte LDL-Faktorisierung $A = LL^T = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T$ folgt.

■ **Algorithmus 2.5 (Wurzelfreie Cholesky-Faktorisierung)**

Input: n, A symmetrisch und positiv definit

```
1  do k = 1, n
2   d_kk~ = a_kk − Σ_{j=1}^{k−1} l_kj~^2 d_jj~
3   do i = k+1, n
4    l_ik~ = ( a_ik − Σ_{j=1}^{k−1} d_jj~ l_ij~ l_kj~ ) / d_kk~
5   end do
6  end do
```

Output: $\widetilde{l_{ik}}$, $\widetilde{d_{kk}}$ für $1 \leq k \leq i \leq n$

Der Aufwand beträgt etwa $\frac{n^3}{3}$. Hat man die Faktorisierung $A = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T$ bestimmt, so ist auch die LU-Faktorisierung von A bekannt: $A = \tilde{L}U$ mit $U = \tilde{D}\tilde{L}^T$.

3. Lineare Quadratmittelprobleme

Das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ besitzt genau dann eine Lösung, wenn $\operatorname{rang}(A) = \operatorname{rang}((A, b))$. Falls $m > n$, so heißt das Gleichungssystem überbestimmt . Im Allgemeinen gilt dann $\operatorname{rang}(A) \leq n < \operatorname{rang}((A, b))$, so dass das Gleichungssystem keine Lösung besitzt. Der Fall der Nichtlösbarkeit kann auch für $m \leq n$ eintreten, falls $\operatorname{rang}(A) < m$. Anstelle des Systems $Ax = b$ betrachtet man folgende Ersatzaufgabe :

$$\|Ax - b\|_2 \to \min \tag{1}$$

die als lineares Quadraturmittelproblem bezeichnet wird. Kurz schreibt man dafür auch $Ax \cong b$.

Satz 3.1
Seien $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Da ist das lineare Quadraturmittelproblem Gleichung (1) lösbar.

Beweis. Die restringierte Optimierungsaufgabe

$$f(y) = \|y - b\|_2 \to \min \quad \text{mit } y \in L = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\} \tag{2}$$

ist offenbar genau dann lösbar, wenn Gleichung (1) eine Lösung besitzt. Wegen $f(0) = \|b\|_2$ und $0 \in L$ hat

$$f(y) \to \min \quad \text{mit } y \in L,\ \|y - b\|_2 \leq \|b\|_2 \tag{3}$$

dieselbe Lösungsmenge wie Gleichung (2). Der zulässige Bereich $\{x \in L \mid \|y - b\|_2 \leq \|b\|_2\}$ dieser Optimierungsaufgabe ist nicht-leer, abgeschlossen und beschränkt. Da zudem $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ stetig ist, besitzt Gleichung (3) nach dem Satz von Weierstrass eine Lösung. Also sind auch Gleichung (2) und Gleichung (1) lösbar. □

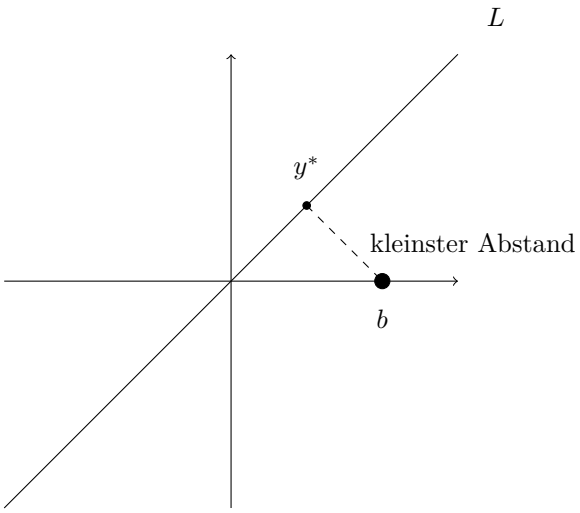
■ **Beispiel 3.2**
Seien

$$A = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dann ist der lineare Teilraum L gegeben durch $L = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x \,\middle|\, x \in \mathbb{R} \right\}$. Anschaulich ergibt sich, dass eine Lösung $y^* \in L$ von Gleichung (2) der Bedingung $(y^* - b) \perp L$ genügen muss. Daraus folgt

$$\left(\begin{pmatrix} y_1^* \\ y_2^* \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x = 0 \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} y_1^* \\ y_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Einzige Lösung von Gleichung (2) ist damit $y^* = (1, 1)^T$. Somit ist $x^* = 1$ die einzige Lösung von Gleichung (1).



3.1. Die Gauss'schen Normalgleichungen

Satz 3.3
Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Dann gilt:

(a) Jede Lösung des linearen Quadraturmittelproblems Gleichung (1) löst die GAUSS'schen Normalgleichungen

$$A^T A x = A^T b \tag{4}$$

und umgekehrt.

(b) Falls $\operatorname{rang}(A) = n$ (dies impliziert $m \geq n$), so ist $A^T A$ positiv definit und Gleichung (1) besitzt genau eine Lösung, nämlich $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$.

(c) Falls $\operatorname{rang}(A) < n$, so ist $A^T A$ positiv semidefinit und singulär und Gleichung (1) besitzt unendlich viele Lösungen.

Beweis. (a) Die Zielfunktion $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ der zu Gleichung (1) äquivalenten Aufgabe

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \to \min \tag{5}$$

lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{1}{2}(Ax - b)^T (Ax - b) \\ &= \frac{1}{2}(x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b) \end{aligned}$$

Die notwendige Optimalitätsbedingung für Gleichung (5) lautet $\nabla \varphi(x) = 0$, das heißt

$$A^T A x = A^T b$$

Also ist jede Lösung von Gleichung (1) auch eine Lösung der GAUSS'schen Normalgleichungen Gleichung (4). Da φ eine konvexe Funktion ist (wegen $\nabla^2 \varphi(x) = A^T A$ positiv semidefinit), ist Gleichung (4) zugleich eine hinreichende Optimalitätsbedingung, das heißt jede Lösung von Gleichung (4) löst Glei-

chung (1).

(b) Sei $\operatorname{rang}(A) = n$. Dann hat A vollen Spaltenrang und $Ax \neq 0$ für alle $x \neq 0$. Folglich gilt $x^T A^T Ax = (x^T A^T)(Ax) = \|Ax\|_2^2 > 0$ für alle $x \neq 0$. Also ist A positiv definit und damit regulär. Somit sind die GAUSS'schen Normalgleichungen Gleichung (4) eindeutig lösbar, ihre Lösung ist $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$. Wegen Teil (a) ist dies auch die einzige Lösung von Gleichung (1).

(c) Sei $\operatorname{rang}(A) > n$. Dann gibt es $\hat{x} \neq 0$ mit $A\hat{x} = 0$. Folglich ist einerseits A positiv semidefinit (denn $x^T A^T Ax = \|Ax\|_2^2 \geq 0$) aber andererseits $A^T A\hat{x} = 0$ und $A^T A$ daher singulär. Da nach Satz 3.1 das lineare Quadraturmittelproblem Gleichung (1) eine Lösung besitzt, muss nach Teil (a) auch Gleichung (4) lösbar sein. Aufgrund der Singularität von $A^T A$ hat Gleichung (4) unendlich viele Lösungen. □

Sei x^* eine Lösung von Gleichung (1). Dann gilt wegen Satz 3.3

$$0 = A^T Ax^* - A^T b = A^T(Ax^* - b)$$

Dies ist äquivalent zu folgenden Aussagen

- $0 = x^T A^T (Ax^* - b)$
- $(Ax^* - b) \perp Ax$
- $(Ax^* - b) \perp L$

■ **Algorithmus 3.4 (Prinzip des Normalgleichungsverfahrens)**
Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\operatorname{rang}(A) = n$, $b \in \mathbb{R}^m$

```
1 G = transpose(A) * A
2 c = transpose(A) * b
3 compute L ! als Cholesky-Faktor von G
4 solve Lz=c
5 solve transpose(L)x = z
```

Output: x, L

▶ **Bemerkung 3.5**
Der Aufwand beträgt etwa mn^2 Operationen zur Berechnung der unteren Hälfte von G, $\frac{n^3}{3}$ für die CHOLESKY-Faktorisierung sowie je n^2 für die Lösung der Dreieckssysteme. Offenbar ist der Aufwand für kleine n günstig. Nachteilig bezüglich numerischer Fehler kann sich beim Normalgleichungsverfahren die schlechte Kondition (siehe später) der Matrix $A^T A$ auswirken. Abhilfe schaffen geeignete Nachiterationen oder andere Verfahren (HOUSEHOLDER, SVD) zur Lösung des linearen Quadraturmittelproblems.

3.2. Orthonormalisierungsverfahren nach Householder

Ziel ist zunächst die Beschreibung eines Verfahrens zur sogenannten QR-Faktorisierung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, das heißt es sollen Matrizen $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ bestimmt werden, so dass

$$A = QR$$

gilt, wobei Q eine orthogonale Matrix ($Q^{-1} = Q^T$) und R eine verallgemeinerte obere Dreiecksmatrix der Form

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{falls } m \geq n)$$
$$R = (R_1, R_2) \quad (\text{falls } m < n)$$

mit einer oberen Dreiecksmatrix $R_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ bzw. einer oberen Dreiecksmatrix $R_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$ und einer Matrix $R_2 \in \mathbb{R}^{m\times(n-m)}$ ist. Später wird die QR-Zerlegung zur Lösung von Quadraturmittelproblemen (für den Fall $\text{rang}(A) = n$) eingesetzt.

Satz 3.6
Sei $w \in \mathbb{R}^m$ gegeben mit $w^T w = 1$. Dann ist die HOUSEHOLDER-Matrix

$$H = \mathbb{1} - 2ww^T$$

symmetrisch und orthogonal, das heißt es gilt $H = H^T = H^{-1}$.

Beweis. Offenbar gilt $H^T = \mathbb{1} - 2ww^T = H$. Weiter erhält man

$$H^T H = (\mathbb{1} - 2ww^T)(\mathbb{1} - 2ww^T) = \mathbb{1} - 4ww^T + 4w(w^T w)w^T = 1 \qquad \square$$

Die Wirkung einer HOUSEHOLDER-Matrix H auf einen Vektor $a \in \mathbb{R}^m$ (bei Multiplikation mit diesem Vektor) lässt sich wie folgt veranschaulichen. Zunächst hat man

$$Ha = (\mathbb{1} - 2ww^T)a = a - 2ww^T a = a - (2w^T a)w$$

Wegen $(a - w^T aw)^T w = a^T w - w^T a = 0$ (beachte $w^T w = 1$) liegt $a - w^T aw$ auf der Ebene $\mathcal{E} = \{y \in \mathbb{R}^m \mid y^T w = 0\}$ und Ha liegt bezüglich dieser Ebene (als Spiegelebene) spiegelbildlich zu a.

Satz 3.7
Es seien $a \in \mathbb{R}^m$ mit $a \notin \text{span}(e_1)$ und

$$w = \frac{a + pe_1}{\|a + pe_1\|_2} \quad \text{mit } p \in \{\|a\|_2, -\|a\|_2\}$$

gegeben. Dann gilt

$$Ha = -pe$$

Beweis. Wegen $a \notin \text{span}(e_1)$ folgt $a + pe_1 \neq 0$. Also ist w wohldefiniert mit $w^T w = 1$ und man erhält

$$Ha = (\mathbb{1} - 2ww^T)a = a - (2w^T a)w = a - 2\frac{a^T(a + pe_1)}{\|a + pe_1\|}\frac{a + pe_1}{\|a + pe_1\|_2} \tag{6}$$

Da $p \in \{\|a\|_2, -\|a\|_2\}$, gilt

$$\|a + pe_1\|_2^2 = a^T a + 2pa^T e_1 + p^2 = 2a^T(a + pe_1)$$

Deshalb liefert Gleichung (6) $Ha = a - (a + pe_1) = -pe_1$. □

Satz 3.7 wird für die schrittweise HOUSEHOLDER-Transformation einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ in eine verallgemeinerte obere Dreiecksmatrix ausgenutzt. Dazu sei $A^{(1)} = A$ eine Matrix von Rang n. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit gelte $m > n$. Weiter sei $A^{(k)}$ für ein $k \in \{1, ..., n+1\}$ in der Form

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^k & \dots & a_{1k}^{(k)} & \dots & a_{1n}^{(k)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{mk}^{(k)} & \dots & a_{mn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

gegeben. Der Vektor $a^k = (0, ..., 0a_{kk}^{(k)}, ..., a_{mk}^{(k)}) \in \mathbb{R}^m$ übernimmt die Rolle von a. Er soll durch Multiplikation mit $H_k \in \mathbb{R}^{m\times m}$ auf $p_k e_k$ transformiert werden, wobei

$$\begin{aligned} H_k &= \mathbb{1} - 2w_k w_k^T \\ w_k &= \frac{a^k + p_k e_k}{\|a^k + p_k e_k\|_2} \\ p_k &\in \{\|a^k\|_2, -\|a^k\|_2\} \end{aligned}$$

Zur Vermeidung von Stellenauslöschung in $a^k + p_k e_k$ wird man

$$p_k = \begin{cases} \|a_k\|_2 & \text{falls } a_{kk}^{(k)} \geq 0 \\ -\|a_k\|_2 & \text{falls } a_{kk}^{(k)} < 0 \end{cases}$$

wählen. Die Operation $A^{(k)} \mapsto H_k A^{(k)}$ lässt die ersten $k-1$ Zeilen und Spalten der Matrix $A^{(k)}$ unverändert und es gilt:

$$H_k A^{(k)} = A^{(k+1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(k)} & \dots & a_{1,k-1}^{(k)} & a_{1k}^{(k+1)} & a_{1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{1n}^{(k+1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k-1,k-1}^{(k)} & a_{k-1,k}^{(k+1)} & a_{k-1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k-1,n}^{(k+1)} \\ & & & a_{kk}^{(k+1)} & a_{k,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{kn}^{(k+1)} \\ & & & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ & & & & a_{m,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{mn}^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

speziell mit $a_{kk}^{(k+1)} = -p_k$. Dabei garantiert die Bedingung $\operatorname{rang}\left(A^{(k)}\right) = n$ dasselbe für den Rang von $A^{(k+1)}$. Die Hintereinanderausführung von HOUSEHOLDER-TRANSFORMATIONEN liefert

$$R = A^{(n+1)} = H_n H_{n-1} \dots H_1 A \tag{7}$$

Dabei ist R eine verallgemeinerte obere Dreiecksmatrix. Wegen Satz 3.6 existiert

$$Q = (H_n \dots H_1)^{-1} \tag{8}$$

und es gilt

$$\begin{aligned} Q &= H_1^{-1} \dots H_n^{-1} = H_1 \dots H_n \\ Q^T Q &= (H_n^T \dots H_1^T)(H_1 \dots H_n) = \mathbb{1} \end{aligned}$$

das heißt Q ist orthogonal. Wegen Gleichung (7) und Gleichung (8) folgt schließlich noch $A = QR$.

Satz 3.8
Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n = \text{rang}(A)$ gegeben. Dann gibt es eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine verallgemeinerte Dreiecksmatrix

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ \mathbb{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

mit einer regulären oberen Dreiecksmatrix $R_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass $A = QR$.

Satz 3.9
Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n = \text{rang}(A)$ und $b \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Weiter seien Matrizen Q und R bzw. R_1 aus der QR-Zerlegung von A bekannt und Vektoren $y_1 \in \mathbb{R}^n$ und $y_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$ so gegeben , dass

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = Q^T b$$

gilt. Dann ist das lineare Quadraturmittelproblem Gleichung (1) äquivalent zum linearen Gleichungssystem

$$R_1 x = y_1$$

Beweis. Wegen $A = QR$ und $QQ^T = \mathbb{1}$ gilt

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|QRx - QQ^T b\|_2^2 = \|Q(Rx - Q^T b)\|_2^2$$

Da $\|Qz\|_2^2 = z^T Q^T Q z = z^T z = \|z\|_2^2$ für beliebige $z \in \mathbb{R}^m$ ist, folgt

$$\|Ax - b\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1 x \\ \mathbb{0} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \|R_1 x - y_1\|_2^2 + \|y_2\|_2^2$$

Also nimmt $\|Ax - b\|_2^2$ sein Minimum genau dann an, wenn x das lineare Gleichungssystem $R_1 x = y_1$ löst. □

3.3. Anwendung in der Ausgleichsrechnung

Gegeben seien Messpunkte $(t_i, y_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ für $i = 1, ..., m$ mit $t_i \neq t_j$ für $i \neq j$. Weiter seien sogenannte Basisfunktionen $\varphi_j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und die Funktion $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ durch

$$f(t, x) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t) \quad \text{für } (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$$

gegeben. Gesucht ist ein Parametervektor $x^* = (x_1, ..., x_n)^T$, so dass

$$f(t_i, x^*) \approx y_i \quad \text{für } i = 1, ..., m$$

Eine Möglichkeit ein solches x^* zu bestimmen ist die Lösung des Optimierungsproblems (Ausgleichsproblems)

$$\sum_{i=1}^{m} (y_i - f(t_i, x))^2 \to \min \tag{9}$$

Mit

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(t) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \dots & \varphi_n(t_m) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

gilt $r(x) = \|ax - b\|_2^2$, man beachte $y_i - f(t_i, x) = y_i - \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t_i) = y_i - A_i x$, wobei A_i die i-te Zeile von A bezeichnet. Also ist Gleichung (9) ein lineares Quadraturmittelproblem.

■ **Beispiel 3.10 (Ausgleichsgerade)**
Seien $m = 3$ und $n = 2$. Es seien $(t_1, y_1) = (0, 1)$, $(t_2, y_2) = (3, 8)$, $(t_3, y_3) = (4, 10)$ und $\varphi_1(t) = 1$, $\varphi_2(t) = t$ für $t \in \mathbb{R}$. Dann ist $f(t, x) = x_1 + tx_2$,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 3 \\ 1 & \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 8 \\ 10 \end{pmatrix}$$

und das Ausgleichsproblem Gleichung (9) hat die Lösung $x^* = (1.0385..., 2.2692...)^T$.

4. Kondition linearer Gleichungssysteme

Seien $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$ mit $b \neq 0$ gegeben. Es stellt sich die Frage, wie sich die Fehler in A bzw. b auf die Lösung $x = A^{-1}b$ des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ auswirken. Dazu seien $\Delta A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ bzw. $\Delta b \in \mathbb{R}^n$ Störungen kleiner Norm, insbesondere soll $A + \Delta A$ noch regulär sein. Weiter sei

$$\Delta x = (A + \Delta A)^{-1}(b + \Delta b) - A^{-1}b$$

der absolute Fehler zwischen den Lösungen des gestörten und des ungestörten Gleichungssystems in Abhängigkeit von den Fehlern ΔA und Δb der Eingangsdaten A und b. Es wird nun eine obere Schranke für de relativen Fehler

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}$$

in Abhängigkeit von den relativen Fehlern der Eingangsdaten $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$ und $\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$ gesucht.

4.1. Normen

Satz 4.1
Sei $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to [0,\infty)$ eine Vektornorm. Dann ist durch

$$\|A\|_* = \sup_{\substack{x\in\mathbb{R}^n \\ x\neq 0}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad \forall A \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

eine Matrixnorm $\|\cdot\|_* : \mathbb{R}^{n\times n} \to [0,\infty)$ definiert. Diese der Vektornorm zugeordnete Matrixnorm ist mit der Vektornorm verträglich , das heißt

$$\|Ax\| \leq \|A\|_*\|x\| \quad \forall A \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ und } b \in \mathbb{R}^n$$

submultiplikativ , das heißt

$$\|A \cdot B\|_* \leq \|A\|_* \cdot \|B\|_* \quad \forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

und es gilt $\|\mathbb{1}\|_* = 1$.

Beispiele für eine Vektornorm und eine zugeordnete Matrixnorm sind:

- Der Maximum-Norm $\|x\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} |x_i|$ ist die Zeilensummen-Norm $\|A\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{k=1}^n |a_{ik}|$ zugeordnet.
- Der Summen-Norm $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ ist die Spaltensummen-Norm $\|A\|_1 = \max_{1\leq k\leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ik}|$ zugeordnet.
- Der euklidischen Norm $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ ist die Spektralnorm $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$ zugeordnet, wobei $\rho(B) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } B\}$. Also ist $\|A\|_2^2$ gleich dem betragsgrößten Eigenwert von $A^T A$.

4.2. Störungslemma

Lemma 4.2 (von Neumann'sches Störungslemma)
Seien $\|\cdot\|$ eine Vektornorm im $\mathbb{R}^n$ bzw. die zugeordnete Matrixnorm und $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mit $\|B\| < 1$. Dann ist $\mathbb{1} + B$ regulär und es gilt

$$\|(\mathbb{1} + B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}$$

Beweis. Mit der Dreiecksungleichung folgt für jedes $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} \|(\mathbb{1} + B)x\| &= \|x + Bx\| \\ &\geq \|x\| - \|Bx\| \\ &\geq \|x\| - \|B\|\|x\| \\ &= \|x\|(1 - \|B\|) \\ &> 0 \end{aligned} \tag{1}$$

Also gilt $(\mathbb{1} + B)x = 0$ genau dann, wenn $x = 0$. Somit ist $\mathbb{1} + B$ regulär. Aus Gleichung (1) hat man

$$\|y\| = \|(\mathbb{1} + B)(\mathbb{1} - B)^{-1}y\| \geq (1 - \|B\|)\|(\mathbb{1} + B)^{-1}y\|$$

und damit

$$\frac{\|(\mathbb{1} + B)^{-1}y\|}{\|y\|} \leq \frac{1}{1 - \|B\|}$$

für alle $y \in \mathbb{R}^n\backslash\{0\}$. Dies zieht unter Beachtung der Definition der zugeordneten Matrixnorm die zweite Behauptung des Lemmas nach sich. □

4.3. Kondition

Satz 4.3
Es seinen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär, $\Delta A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b \in \mathbb{R}^n\backslash\{0\}$, $\Delta b \in \mathbb{R}^n$ und $\|\cdot\|$ eine Vektornorm in $\mathbb{R}^n$ bzw. die zugeordnete Matrixnorm. Falls $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$, dann ist $A + \Delta A$ regulär und es gibt eindeutig bestimmte Vektoren $x, \Delta x \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$Ax = b \quad \text{und} \quad (A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b \tag{2}$$

und

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|}{1 - \|\Delta A\|\|A^{-1}\|} \left\{ \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right\} \tag{3}$$

Beweis. Mit $B = A^{-1}\Delta A$ ergibt sich

$$\begin{aligned} A + \Delta A &= A(\mathbb{1} + B) \\ \|B\| = \|A^{-1}\Delta A\| &\leq \|A^{-1}\|\|\Delta A\| < 1 \end{aligned}$$

Wegen Lemma 4.2 ist $\mathbb{1} + B = \mathbb{1} + A^{-1}\Delta A$ regulär und

$$\|(\mathbb{1}+B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|B\|} \leq \frac{1}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}$$

Damit ist auch $A(\mathbb{1}+B) = A + \Delta A$ regulär, es gilt $x = A^{-1}b$ sowie $\Delta x = -x + (A+\Delta A)^{-1}(b+\Delta b)$ und

$$\|(A+\Delta A)^{-1}\| = \|(A(\mathbb{1}+B))^{-1}\| = \|(\mathbb{1}+B)^{-1}A^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\|A^{-1}\| \tag{4}$$

Aus Gleichung (2) erhält man durch Substitution und weiter wegen der schon gezeigten Regularität von $A+\Delta A$

$$\begin{aligned}(A+\Delta A)\Delta x &= \Delta b - \Delta A x\\ \Delta x &= (A+\Delta A)^{-1}(b+\Delta b)\end{aligned}$$

Mit Gleichung (4) folgt

$$\begin{aligned}\|\Delta x\| &\leq \|(A+\Delta A)^{-1}\|\|\Delta b - \Delta A x\|\\ &\leq \frac{1}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\|A^{-1}\|(\|\Delta b\| + \|\Delta A\|\|x\|)\end{aligned}$$

Wegen $\|Ax\| = \|b\|$ liefert dies

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|\Delta A\|\|A^{-1}\|}\left\{\frac{\|\Delta b\|}{\|x\|}\frac{\|Ax\|}{\|b\|} + \|\Delta A\|\right\}$$

Da $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$ hat man schließlich Gleichung (3). □

Definition 4.4 (Konditionszahl)
Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär und $\|\cdot\|$ eine Matrixnorm. Dann heißt

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

die Konditionszahl der Matrix A in der gewählten Norm.

Satz 4.5
Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär und $\|\cdot\|$ eine Vektornorm in $\mathbb{R}^n$. Für die zugeordnete Matrixnorm und die damit gebildete Konditionszahl $\text{cond}(A)$ gilt:

$$\text{cond}(A) = \frac{\max_{\|x\|=1}\|Ax\|}{\min_{\|x\|=1}\|Ax\|}$$

und eine untere Schranke für den relativen Abstand der zu A nächsten singulären Matrix

$$\min\left\{\frac{\|A-B\|}{\|A\|}\middle| B \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ singulär}\right\} \geq \text{cond}-1(A)$$

▶ **Bemerkung 4.6**
Falls $\text{cond}(A)$ groß ist, heißt die Matrix A bzw. das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ schlecht konditioniert , andernfalls gut konditioniert .

Sei $\tilde{x}$ so gegeben, dass der Defekt $\|A\tilde{x} - b\|$ klein ist. Selbst dann muss man bei großer von A damit

rechnen, dass

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|}$$

groß ausfällt.

Kapitel IV

Kondition von Aufgaben und Stabilität von Algorithmen

1. Maschinenzahlen und Rundungsfehler

Ein Computer kann nur endlich viele Maschinenzahlen in normalisierter Gleitpunktdarstellung

$$z = \sigma \cdot d_0 d_1 ... d_{t-1} \cdot b^e$$

exakt speichern, wobei

- $b \in \mathbb{N}$ mit $b \geq 2$ die Basis
- $d_0 d_1 ... d_{t-1}$ mit $d_0, d_1, ..., d_{t-1} \in \{0, ..., b-1\}$ die Mantisse mit den Ziffern d_i
- $t \in \mathbb{N}$ mit $t \geq 1$ die Mantissenlänge
- $e \in \mathbb{N}$ mit $-m \leq e \leq M$ der Exponent
- $\sigma \in \{+1, -1\}$ das Vorzeichen

bedeuten. Zusätzlich ist 0 eine Maschinenzahl. Mit $\mathbb{M} = \mathbb{M}(b, t, m, M)$ wird die Menge aller Maschinenzahlen bezeichnet. Jede andere Zahl $x \in \mathbb{R}$, die im Computer gespeichert werden soll (auch Zwischenergebnisse), wird vorher auf eine Zahl $\mathrm{rd}(x) \in \mathbb{M}$ so gerundet, dass der durch die Rundung entstehende relative Fehler durch

$$\frac{|\,\mathrm{rd}(x) - x|}{|x|} = \min_{z \in \mathbb{M}} \frac{|z - x|}{|x|} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{M}$$

gegeben ist.

Lemma 1.1
Für jedes $x \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ mit $b^{-m} \leq |x| \leq b^M$ gilt

$$\frac{|\,\mathrm{rd}(x) - x|}{|x|} \leq eps \ = \frac{1}{2} b^{1-t}$$

Beweis. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei $x > 0$. Dann gibt es Zahlen $e \in \mathbb{Z}$ mit $m \leq e \leq M$ und eine (gegebenenfalls unendliche) Ziffernfolge $(x_k) \subset \{0, ..., b-1\}$, so dass

$$x = (x_0 x_1 ... x_{t-1} x_t x_{t+1} ...) \cdot b^e$$

Damit folgt

$$|\operatorname{rd}(x) - x| \leq \frac{b}{2} b^{e-t}$$
$$\frac{|\operatorname{rd}(x) - x|}{|x|} \leq \frac{b^{e-t+1}}{2b^e} \leq \frac{1}{2} b^{1-t}$$ □

Die Zahl *eps* wird als Maschinengenauigkeit bezeichnet und gibt den maximalen relativen Rundungsfehler für $x \in [-b^m, b^M]$ an.

2. Fehleranalyse

2.1. Die Kondition einer Aufgabe

Unter Aufgabe wird hier die Auswertung einer zumindest stetig differenzierbaren Abbildung

$$\Phi : D \to \mathbb{R}^n$$

verstanden. Die Lösung der Aufgabe für ein Argument $a \in D \subset \mathbb{R}^n$ besteht also darin, $\Phi(a)$ zu ermitteln. Wir interessieren uns nun für die Frage, welchen Einfluss ein Fehler in a (also die Verwendung der Maschinenzahl $\mathrm{rd}(a)$ statt a) auf das Ergebnis $\Phi(a)$ bei ansonsten exakter Rechnung hat. Dazu bezeichne $\tilde{a} \in D$ das fehlerbehaftete Argument. Für $\tilde{a}$ nahe bei a erhält man aus der TAYLOR-Formel

$$\Phi(\tilde{a}) - \Phi(a) \approx \nabla\Phi(a)^T(\tilde{a} - a) = \left(\frac{\partial\Phi_i(a)}{\partial a_j}\right)_{\substack{i=1,\ldots,m \\ j=1,\ldots,n}} (\tilde{a} - a)$$

und damit (unter der Bedingung $a_j \neq 0$ und $\Phi(a)_i \neq 0$)

$$\frac{\Phi_i(\tilde{a}) - \Phi_i(a)}{\Phi_i(a)} \approx \frac{1}{\Phi_i(a)} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial\Phi_i(a)}{\partial a_j}(\tilde{a_j} - a_j) = \sum_{j=1}^{n} \frac{a_j}{\Phi_i(a)} \frac{\partial\Phi_i(a)}{\partial a_j} \frac{\tilde{a_j} - a_j}{a_j} \tag{1}$$

Definition 2.1 (relative Konditionszahlen, gut/schlecht konditioniert)
Es seien $D \subset \mathbb{R}^n$, $\Phi : D \to \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar und $a \in D$ mit $\Phi(a) \neq 0$. Dann heißen

$$K_{ij} = \left| \frac{a_j}{\Phi_i(a)} \frac{\partial\Phi_i(a)}{\partial a_j} \right|$$

relative Konditionszahlen der Aufgabe $\Phi(a)$. Die Aufgabe heißt gut konditioniert , wenn alle diese Konditionszahlen klein sind, sonst schlecht konditioniert .

Mit Gleichung (1) folgt

$$\frac{\Phi_i(\tilde{a}) - \Phi_i(a)}{\Phi_i(a)} \approx \sum_{j=1}^{n} K_{ij} \frac{\tilde{a_j} - a}{a_j}$$

Bei einer gut konditionierten Aufgabe verhält sich also der relative Fehler des Ergebnisses etwa wie die relativen Fehler der Eingangsdaten.

■ **Beispiel 2.2**

(a) Mit $\Phi(a) = \sqrt{a}$ für $a > 0$ erhält man $m = n = 1$ und

$$K_{11} = \left| \frac{a}{\sqrt{a}} \frac{1}{2\sqrt{a}} \right| = \frac{1}{2}$$

Die Aufgabe ist für alle $a > 0$ gut konditioniert.

(b) Mit $\Phi(a) = a_1 + a_2$ für $a_1 + a_2 \neq 0$ und $a_2 \neq 0$ erhält man $m = 1$, $n = 2$ und

$$K_{1j} = \left| \frac{a_j}{a_1 + a_2} \cdot 1 \right| \quad \text{für } j = 1, 2$$

Die Aufgabe ist schlecht konditioniert, falls $a_1 + a_2 \approx 0$. Selbstauslöschung bei Subtraktion etwa gleich großer Zahlen, zum Beispiel:

$$\begin{aligned} a_1 &= 1.23456789 & \tilde{a_1} &= 1.234567885 \\ a_2 &= -1.23456788 & \tilde{a_2} &= -1.23456788 \\ \Rightarrow a_1 + a_2 &= 10^{-8} \\ \Rightarrow \tilde{a_1} + \tilde{a_2} &= -0.5 \cdot 10^{-8} \end{aligned}$$

Der relative Fehler des Ergebnisses beträgt $\frac{\tilde{a_1}+\tilde{a_2}-(a_1+a_2)}{a_1+a_2} = 0.5$, also 50%!

2.2. Stabilität von Algorithmen

Nun wird untersucht, wie sich die Rundungsfehler in einzelnen Rechenschritten eines Algorithmus auswirken. Dazu wird die Aufgabe $\Phi : D \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m$ zu Grunde gelegt. ($m = 1$ ist keine Einschränkung, da die folgende Untersuchung auch für weitere Komponenten analog möglich ist) und ein allgemeiner Algorithmus mit stetig differenzierbaren Abbildungen $r_i : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}$ (mit $i = 0, ..., N$) betrachtet.

■ **Algorithmus 2.3**

Input: a

```
1  y_0 = r_0(a)
2  y_1 = r_1(a, y_0)
3  ...
```

Output: y_N ($= \Phi(a)$ bei exakter Rechnung)

Kapitel V

Newton-*Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme*

1. Das Newton-Verfahren

2. Gedämpftes Newton-Verfahren

Kapitel VI

lineare Optimierung

1. Ecken und ihre Charakterisierung

2. Simplex-Verfahren

3. Die Tableauform des Simplex-Verfahrens

4. Revidiertes Simplex-Verfahren

5. Bestimmung einer ersten zulässigen Basislösung

Anhang

Anhang A: Listen

A.1. Liste der Theoreme

A.2. Liste der benannten Sätze, Lemmata und Folgerungen

Index