

Skript Numerik I

von Prof. Dr. Luise Blank im WS14/15

Gesina Schwalbe

12. November 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
2	Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden	5
2.1	Gaußsches Eliminationsverfahren	5
2.1.1	Vorwärtselimination	5
2.1.2	Rückwärtselimination	7
2.1.3	Vorsicht	8
2.1.4	Weitere algorithmische Anmerkungen	8
2.1.5	Dreieckszerlegung	8
2.1.6	Vorwärtssubstitution	9
2.1.7	Gauß-Elementation zur Lösung von $Ax = b$	9
2.1.8	Rechenaufwand gezählt in „flops“	9
2.1.9	Definition: Landau-Symbole	10
2.1.10	Allgemeines zur Aufwandsbetrachtung	10
2.1.11	Formalisieren des Gauß-Algorithmus	10
2.1.12	Lemma (Eigenschaften der L_k -Matrizen)	10
2.1.13	Satz (LR- oder LU-Zerlegung)	11
2.2	Gaußsches Eliminationsverfahren mit Pivotisierung	11
2.2.1	Spaltenpivotisierung (=partielle/ halbmaximale Pivotisierung) . .	11
2.2.2	Bemerkung	12
2.2.3	Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung	13
2.2.4	Satz: Dreieckszerlegung mit Permutationsmatrix	13
2.2.5	Lösen eines Gleichungssystems $Ax = b$	15
2.2.6	Bemerkungen	15
2.2.7	Beispiel zur Pivotisierung	15
3	Fehleranalyse	17
3.1	Zahlendarstellung und Rundungsfehler	17
3.1.1	Definition: Gleitkommazahl	18
3.1.2	Bemerkung	18
3.1.3	Beispiel	18
3.1.4	Verteilung der Maschinenzahlen	19
3.1.5	Bezeichnungen	20
3.1.6	Rundungsfehler	20
3.1.7	Bemerkung	21
3.1.8	Auslöschung von signifikanten Stellen	21

3.2	Kondition eines Problems	22
3.2.1	Definition: Problem	22
3.2.2	Definition: absoluter und relativer Fehler	22
3.2.3	Wiederholung: Normen	23
3.2.4	Definition: Matrixnorm	23
3.2.5	Definition: Frobeniusnorm, p-Norm, Verträglichkeit	23
3.2.6	Bemerkungen	24
3.2.7	Definition: absolute und relative normweise Kondition	24
3.2.8	Lemma	25
3.2.9	Beispiel: Kondition der Addition	25
3.2.10	Beispiel: Lösen eines Gleichungssystems	26
3.2.11	Definition: Kondition einer Matrix	29
3.2.12	Lemma (Neumannsche Reihe)	29
3.2.13	Bemerkung	30
3.2.14	Beispiel: Kondition eines nichtlinearen Gleichungssystems	31
3.2.15	Beispiel	32
3.2.16	Definition: Komponentenweise Kondition	32
3.2.17	Lemma	32
3.2.18	Beispiel	33
3.3	Stabilität von Algorithmen	34
3.3.1	Bemerkung	35
3.3.2	Beispiel	35
3.3.3	Definition: Elementar ausführbar	36
3.3.4	Definition: Algorithmus, Implementation	36
3.3.5	Lemma (Fehlerfortpflanzung)	37
3.3.6	Korollar	38
3.3.7	Bemerkung	38
3.3.8	Bemerkung zur Sprechweise	38
3.3.9	Beispiel	39
3.3.10	siehe Folien	40
3.4	Beurteilung von Näherungslösungen linearer GLS	40
4	Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)	41
4.1	Gaußsches Eliminationsverfahren mit Äquilibration und Nachiteration	41
4.1.1	Äquilibration der Zeilen	41
4.1.2	Äquilibration der Spalten	41
4.1.3	Lemma	42
4.1.4	Nachiteration	42
4.1.5	Bemerkung (nach Skeel 1980)	42
4.2	Cholesky-Verfahren	42
4.2.1	Satz (Eigenschaften von symm., pos. def. Matrizen)	43
4.2.2	Folgerung	44
4.2.3	Cholesky-Zerlegung	45
4.2.4	Rechenaufwand in flops	45

4.2.5	Bemerkung	45
4.3	Lineare Ausgleichsprobleme	45
4.3.1	Beispiel	45
4.3.2	Lineares Ausgleichsproblem	46
4.3.3	Projektionssatz	47
4.3.4	Satz	48
4.3.5	Lösung der Normalgleichung	49
4.3.6	Satz	50
4.3.7	Bemerkung	51
4.4	Orthogonalisierungsverfahren	51
4.4.1	Givens-QR-Algorithmus	54
4.4.2	s. Folien	55
4.4.3	Aufand des Givens-QR-Algorithmus	55
4.4.4	Bemerkung	56
Literatur		61

Vorwort

Skriptfehler

An alle, die gedenken dieses Skript zur Numerikvorlesung im WS2014/15 zu nutzen:
Es wird keinerlei Anspruch auf Richtigkeit, Vollständigkeit und auch sicher nicht Schönheit (ich bin LaTeX-Anfänger) dieses Dokuments erhoben.

Ihr würdet mir aber unglaublich weiterhelfen, wenn ihr jede Anmerkung – das kann alles, von groben inhaltlichen Fehlern über Rechtschreibkorrekturen bis hin zu Wünschen/Anregungen/Tipps zur Typografie, sein – an mich weiterleitet!

Jegliche Anmerkungen bitte gleich und jederzeit an:

gesina.schwalbe@stud.uni-regensburg.de
--

oder auch an gesina.schwalbe@gmail.com

Copyright

Was das Rechtliche angeht bitte beachten:

Urheber dieses Skriptes ist Prof. Dr. Luise Blank.

Dies ist nur eine genehmigte Vorlesungsmitschrift und unterliegt dem deutschen Urheberrecht, jegliche nicht rein private Verwendung muss demnach vorher mit Frau Blank abgesprochen werden.

Bilder oder „IMAGE MISSING“

Leider habe ich mich bisher noch nicht in die (ordentliche) Grafikerstellung in LaTeX-Dokumenten eingearbeitet, weshalb das Skript erstmal nicht mit Grafiken dienen kann – die Fehlstellen sind mit „IMAGE MISSING“ markiert.

Wenn ihr gerne Veranschaulichungen haben möchtet, könnt ihr jederzeit **die entsprechenden Bilder an mich schicken**, bitte mit Kapitelangabe. (Oder mich explizit

Inhaltsverzeichnis

darum bitten, dass ich mich übergangsweise um das Einscannen, Bearbeiten etc. kümmer(e). Dann werden sie an die entsprechenden Stellen eingebunden.

Erscheinungsdatum

Ich werde mich bemühen, das Skript jeweils am Vorlesungstag zumindest in unverbesserter Form online zu stellen, so dass v.a. diejenigen, die die Vorlesung nicht besuchen können, einen Überblick über den Stoff bekommen.

Innerhalb einer Woche sollte das Skript aktuell sein.

Anfangsteil

Nachdem ich nicht seit Semesterbeginn mittex, fehlt noch ein Großteil des ersten Kapitels. Ich hoffe, es bis Mitte des Semesters nachholen zu können, aber keine Garantie.

Ziel ist, dass es vor der Vorlesungszeit integriert ist.

06.10.2014

1 Einführung

2 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$. Gesucht ist $x \in \mathbb{R}^n$ mit

$$A \cdot x = b$$

Weitere Voraussetzungen sind die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung. Bemerkung:

- Ein verlässlicher Lösungsalgorithmus überprüft dies und behandelt alle Fälle.
- Die Cramersche Regel ist ineffizient (s. Einführung).
- Das Inverse für $x = A^{-1} \cdot b$ aufzustellen ist ebenso ineffizient, denn es ist keine Lösung für alle $b \in \mathbb{R}^n$ verlangt und der Algorithmus wird evtl. instabil aufgrund vieler Operationen.

\Rightarrow Invertieren von Matrizen vermeiden!!

\Rightarrow Lösen des Linearen Gleichungssystems!!

2.1 Gaußsches Eliminationsverfahren

Das Verfahren wurde 1809 von Friedrich Gauß, 1759 von Joseph Louis Lagrange beschrieben und war seit dem 1. Jhd. v. Chr. in China bekannt.

2.1.1 Vorwärtselimination

Das Gaußverfahren gilt der Lösung eines linearen Gleichungssystems der Form

$$Ax = b$$

2 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden

mit $A = (a_{ij})_{i,j \leq n} \in K^{n \times n}$ Matrix und $b = (b_i)_{i \leq n} \in K^n$ Vektor.
Der zugehörige Algorithmus sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{array}{cccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

\Downarrow

$$(i\text{-te Zeile}) - (1. \text{ Zeile}) \cdot \frac{a_{i1}}{a_{11}} \Rightarrow a_{i1} = 0$$

\Downarrow

$$\begin{array}{cccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ & & + & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & & & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}$$

\Downarrow
 \vdots

mit

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - a_{1j} \cdot \frac{a_{i1}}{a_{11}} && \text{für } i, j = 2, \dots, n \\ b_i^{(1)} &= b_i - b_1 \cdot \frac{a_{i1}}{a_{11}} && \text{für } i = 2, \dots, n \end{aligned}$$

08.10.2014

In jedem Schritt werden die Einträge der k -ten Spalte analog unterhalb der Diagonalen (also $k = 1, \dots, n-1$) eliminiert:

$$(i\text{-te Zeile}) - (k\text{-te Zeile}) \cdot \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \quad \text{für } i = k+1, \dots, n$$

Die Reihe

$$A \rightarrow A^{(1)} \rightarrow A^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow A^{(n-1)}$$

wird bis zum n -ten Schritt fortgeführt, d.h. bis eine obere Dreiecksgestalt eintritt:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}}_{:=R} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}}_{:=z}$$

$$Rx = z \tag{2.1.1}$$

wobei für $i = k + 1, \dots, n$ die Einträge wie folgt aussehen:

$$l_{ik} := \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad (2.1.2)$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{kj}^{(k-1)} \cdot l_{ik} \quad \text{für } j = k + 1, \dots, n \quad (2.1.3)$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - b_k^{(k-1)} \cdot l_{ik} \quad (2.1.4)$$

Dieser Prozess wird **Vorwärtselimination** genannt.

Der zugehörige Algorithmus ist:

```

for  $k = 1, \dots, n - 1$ 
|   for  $i = k + 1, \dots, n$ 
|   |    $l_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$ 
|   |   for  $j = k + 1, \dots, n$ 
|   |   |    $a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj}$ 
|   |   end
|   |    $b_i = b_i - l_{ik} b_k$ 
|   end
end

```

2.1.2 Rückwärtselimination

Für die Lösung des Gleichungssystems ist dann noch die **Rückwärtssubstitution** nötig:

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \quad (2.1.5)$$

$$x_{n-1} = \frac{b_{n-1}^{(n-2)} - a_{n-1,n}^{(n-1)} \cdot x_n}{a_{(n-1)(n-1)}^{(n-2)}} \quad (2.1.6)$$

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k-1)} x_j}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad (2.1.7)$$

Als Algorithmus:

```

for  $k = n, n-1, \dots, 1$ 
|    $x_k = b_k$ 
|   for  $j = k+1, \dots, n$ 
|   |    $x_k = x_k - a_{kj}x_j$ 
|   end
|    $x_k = x_k / a_{kk}$ 
end

```

2.1.3 Vorsicht

Algorithmen 2.1.1 und 2.1.2 sind nur ausführbar, falls für die sog. **Pivotelemente** $a_{kk}^{(k-1)}$ gilt:

$$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \quad \text{für } k = 1, \dots, n$$

Dies ist auch für invertierbare Matrizen nicht immer gewährleistet.

2.1.4 Weitere algorithmische Anmerkungen

Matrix A und Vektor b sollten möglichst **nie** überschrieben werden! (Stattdessen kann eine Kopie überschrieben werden.)

Das Aufstellen von A und b ist bei manchen Anwendungen das teuerste, sie gehen sonst verloren. In 2.1.1 wird das obere Dreieck von A überschrieben. Dies ist möglich, da in (2.1.3) nur die Zeilen $k+1, \dots, n$ mithilfe der k -ten bearbeitet werden. Am Ende steht R im oberen Dreieck von A und z in b .

Die l_{ik} werden spaltenweise berechnet und können daher anstelle der entsprechenden Nullen (in der Kopie) von A gespeichert werden, d.h.:

$$\tilde{L} := (l_{ik}) \tag{2.1.8}$$

und R werden sukzessive in A geschrieben.

IMAGE MISSING

Der Vektor z und anschließend der Lösungsvektor x kann in (eine Kopie von) b geschrieben werden. Wird eine neue rechte Seite b betrachtet, muss 2.1.1 nicht komplett neu ausgeführt werden, da sich \tilde{L} nicht ändert. Es reicht 2.1.4 zu wiederholen.

IMAGE MISSING

2.1.5 Dreieckszerlegung

Die Dreieckszerlegung einer Matrix A entspricht dem Verfahren aus 2.1.1, nur ohne die Zeile (2.1.4).

2.1.6 Vorwärtssubstitution

Die Vorwärtssubstitution entspricht der in 2.1.4 bzw. dem Verfahren aus 2.1.1 ohne die Bestimmung von l_{ik} und R , also nur Schritt (2.1.4).

2.1.7 Gauß-Elimination zur Lösung von $Ax = b$

1 Dreieckszerlegung

2 Vorwärtssubstitution $b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - b_k^{(k-1)} \cdot l_{ik}$

3 Rückwärtssubstitution $x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k-1)} x_j}{a_{kk}^{(k-1)}}$

2.1.8 Rechenaufwand gezählt in „flops“

„flops“ = floating point operations

1. Dreieckszerlegung

für $j = k + 1, \dots, n$ 1 Addition, 1 Multiplikation für a_{ij}

für $i = k + 1, \dots, n$ 1 Division zusätzl. für l_{ik}

Dies ist je für $k = 1, \dots, n - 1$, also ist die Zahl an Additionen und Multiplikationen

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 &= \sum_{k=1}^{n-1} k^2 \\ &= \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} \\ &= \frac{2n^3 - 3n^2 + n}{6}. \end{aligned}$$

Für große n sind das etwa $\frac{n^3}{3}$ Additionen und Multiplikationen und

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{n^2 - n}{2} \approx \frac{n^2}{2}$$

Divisionen.

Damit ergibt sich eine Gesamtanzahl an flops von

$$2 \cdot \frac{2n^3 - 3n^2 + n}{6} + \frac{n^2 - n}{2} = \frac{2}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{6}n \approx \frac{2}{3}n^3$$

für große n .

2 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden

2. Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstitution

Hier ergeben sich je

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{n^2 - n}{2} \approx \frac{n^2}{2}$$

Multiplikationen und Additionen sowie n Divisionen für die Rückwärtssubstitution und damit insgesamt

$$n^2 + n$$

flops.

Zusammenfassung

Die Dreieckszerlegung benötigt $\mathcal{O}(n^3)$ flops und die Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstitution $\mathcal{O}(n^2)$ flops.

2.1.9 Definition: Landau-Symbole

MISSING

2.1.10 Allgemeines zur Aufwandsbetrachtung

13.10.2014

MISSING

2.1.11 Formalisieren des Gauß-Algorithmus

MISSING

2.1.12 Lemma (Eigenschaften der L_k -Matrizen)

1. L_k ist eine Frobeniusmatrix, d.h. sie unterscheidet sich höchstens in einer Spalte von der Einheitsmatrix I .
2. $L_k^{-1} = I + l_k e_k^T$

3. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 L &= L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{n-1}^{-1} \\
 &= I + \sum_{i=1}^{n-1} l_i e_i^T \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ l_{ij} & & 1 \end{pmatrix} \\
 &= I + \tilde{L}
 \end{aligned} \tag{2.1.9}$$

Hiermit folgt:

2.1.13 Satz (LR- oder LU-Zerlegung)

Das obige Verfahren ((2.1.2) und (2.1.3)) erzeugt unter der Voraussetzung von nicht-nullwertigen Pivotelementen eine Faktorisierung

$$A = L \cdot R \quad \text{IMAGE MISSING}$$

wobei R eine obere Dreiecksmatrix und L eine untere, normierte Dreiecksmatrix ist, d.h. für $i = 1, \dots, n$ gilt $l_{ii} = 1$.

Weiterhin existiert zu jeder regulären Matrix höchstens eine solche Zerlegung.

Beweis. MISSING

□

2.2 Gaußsches Eliminationsverfahren mit Pivotisierung

Beispiel Die Matrix $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ist invertierbar, aber die Gauß-Elimination versagt. Permutiere also die erste mit der zweiten Zeile und der Algorithmus wird anwendbar.

Allgemein Vermeide die Division durch betragsmäßig kleine Zahlen!

2.2.1 Spaltenpivotisierung (=partielle/ halbmaximale Pivotisierung)

Im k -ten Eliminationsschritt ist

IMAGE MISSING (s. Folien)

MISSING

2.2.2 Bemerkung

- a) Hiermit gilt $|l_{jk}| \ll 1$.
- b) Anstelle von Spaltenpivotisierung kann eine **Zeilenpivotisierung** durchgeführt werden. Welche günstiger (in cpu-time) ist, hängt von der Rechnerarchitektur und der damit zusammenhängenden Umsetzung des Gauß-Algorithmus ab.
(Beispielsweise greifen Vektorrechner entweder auf die gesamte Spalte oder auf die gesamte Zeile einer Matrix zu und bevorzugen dementsprechend Operationen spalten- bzw. zeilenweise.)
- c) Der Aufwand enthält (bis auf $|\cdot|$) keine Rechenoperationen (flops), aber $\mathcal{O}(n^2)$ Vergleiche und Vertauschungen.
- d) Eine **vollständige Pivotsuche** sucht das betragsmäßig größte Element der gesamten Restmatrix und benötigt $\mathcal{O}(n^3)$ Vergleiche (sie wird so gut wie nie angewendet).

Damit die LR-Zerlegung unabhängig von der rechten Seite erstellt werden kann, müssen die Permutationen gespeichert werden. Hierfür verwendet man einen sog. **Permutationsvektor** Π , wobei

$$\Pi^{(k-1)}(r) = s$$

bedeutet, dass nach dem $(k-1)$ -ten Eliminationsschritt in der r -ten Zeile von $A^{(k-1)}$ die s -te bearbeitete Zeile von A steht, also

$$\Pi^{(k)}(k) = \Pi^{(k-1)}(p)$$

$$\Pi^{(k)}(p) = \Pi^{(k-1)}(k) \quad \text{und entsprechend}$$

$$\Pi^{(k)}(i) = \Pi^{(k)}(i) \quad \text{für } i \neq k, p$$

Für die **Permutationsmatrix**

$$P_{\Pi} = (e_{\Pi(1)}, \dots, e_{\Pi(n)}) \quad e_j := \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow j\text{-te Stelle}$$

$$\text{mit } PA = LR$$

gilt

$$P^{-1} = P^T$$

und

$$\det P_{\Pi} = \text{sign}(\Pi) = \begin{cases} +1 & \text{falls } \Pi \text{ von gerader} \\ -1 & \text{falls } \Pi \text{ von ungerader} \end{cases} \quad \text{Anzahl an Transpositionen erzeugt wird}$$

2.2.3 Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

Der zugehörige Algorithmus zur Spaltenpivotisierung ist:

```

 $\pi(1:n) = [1:n]$ 
for  $k = 1, \dots, n-1$ 
|   bestimme Pivotzeile  $p$ , so dass
|        $|a_{pk}| = \max\{|a_{jk}|, j = k, \dots, n\}$ 
|    $\pi(k) \rightleftharpoons^1 \pi(p)$ 
|    $A(k, 1:n) \rightleftharpoons A(p, 1:n)$ 
|   if  $a_{kk} \neq 0$ 
|       |    $zeile = [k+1:n]$ 
|       |    $A(zeile, k) = A(zeile, k)/a_{kk}$ 
|       |    $A(zeile, zeile) = A(zeile, zeile) - A(zeile, k)A(k, zeile)$ 
|   else
|       |   „ $A$  ist singulär“
|   end
end

```

\rightleftharpoons bedeutet „vertausche mit“

2.2.4 Satz: Dreieckszerlegung mit Permutationsmatrix

Für jede invertierbare Matrix A existiert eine Permutationsmatrix P , so dass eine Dreieckszerlegung

$$PA = LR$$

existiert. P kann so gewählt werden, dass alle Elemente von L betragsmäßig kleiner oder gleich 1 sind, d.h.

$$|l_{ij}| \leq 1 \quad \forall i, j$$

Beweis. Da $\det A \neq 0$ ist, existiert eine Transposition τ_1 , s.d.

$$a_{11}^{(1)} = a_{\tau_1, 1} \neq 0$$

und

$$|a_{\tau_1, 1}| \geq |a_{i1}| \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

2 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden

Wir erhalten damit

$$L_1 P_{\tau_1} \cdot A = A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & \\ 0 & & \\ \vdots & & \\ 0 & & B^{(1)} \end{pmatrix}$$

und alle Elemente von L_1 sind betragsmäßig kleiner oder gleich 1 sowie $\det L_1 = 1$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \det B^{(1)} &= \underbrace{\frac{1}{a_{11}^{(1)}}}_{\neq 0} \cdot \det A^{(1)} \\ &= \frac{1}{a_{\tau_1,1}^{(1)}} \cdot \det(L_1) \cdot \det(A) \\ &\neq 0. \end{aligned}$$

Also ist $B^{(1)}$ invertierbar.

Induktiv erhalten wir dann

$$R = A^{(n-1)} = L_{n-1} P_{\tau_{n-1}} \cdot \dots \cdot L_1 P_{\tau_1} \cdot A$$

15.10.2014

Da τ_i nur zwei Zahlen $\geq i$ vertauscht, ist

$$\Pi_i := \tau_{n-1} \circ \dots \circ \tau_i \quad \text{für } i = 1, \dots, (n-1)$$

eine Permutation der Zahlen $\{i, \dots, n\}$, d.h. insbesondere gilt:

$$\begin{aligned} \Pi_i(j) &= j && \text{für } j = 1, \dots, (i-1) \\ \Pi_i(j) &\in \{i, \dots, n\} && \text{für } j = i, \dots, n. \end{aligned}$$

$$P_{\Pi_{i+1}} = (e_1, \dots, e_i, e_{\Pi_{i+1}(i+1)}, \dots, e_{\Pi_{i+1}(n)}) = \begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & P_\sigma \end{pmatrix}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}
 P_{\Pi_{i+1}} \cdot L_i \cdot P_{\Pi_{i+1}}^{-1} &= P_{\Pi_{i+1}} \cdot \left(\begin{array}{ccc|c} I_i & & & 0 \\ & -l_{i+1,i} & & \\ 0 & \vdots & & I_{n-i} \\ & -l_{n,i} & & \end{array} \right) \cdot \begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & P_{\sigma}^{-1} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & P_{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \dots \cdot \left(\begin{array}{ccc|c} I_i & & & 0 \\ & -l_{i+1,i} & & \\ 0 & \vdots & & P_{\sigma}^{-1} \\ & -l_{n,i} & & \end{array} \right) \\
 &= \left(\begin{array}{ccc|c} I_i & & & 0 \\ & -l_{\Pi_{i+1}(i+1),i} & & \\ 0 & \vdots & & I_{n-i} \\ & -l_{\Pi_{i+1}(n),i} & & \end{array} \right) \\
 &= I - (P_{\Pi_{i+1}} l_i) e_i^T \\
 &=: \widehat{L}_i
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 R &= L_{n-1} \\
 &\quad \cdot (P_{\tau_{n-1}} L_{n-2} P_{\tau_{n-1}}^{-1}) \\
 &\quad \cdot (P_{\tau_{n-1}} P_{\tau_{n-2}} L_{n-2} P_{\tau_{n-2}}^{-1} P_{\tau_{n-1}}^{-1}) \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad \cdot (P_{\tau_{n-1}} \dots P_{\tau_1} L_1 P_{\tau_1} \dots P_{\tau_{n-1}}) \cdot A \\
 &= L_{n-1} \widehat{L}_{n-2} \dots \widehat{L}_1 P_{\Pi_1} \cdot A
 \end{aligned}$$

Nach Lemma 2.1.12 gilt daher, es existiert eine Permutation Π_1 mit

$$P_{\Pi_1} \cdot A = LR,$$

wobei R obere Dreiecksgestalt hat und

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{\Pi_2(2),1} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ l_{\Pi_n(n),1} & \dots & l_{\Pi_n(n),n-1} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } |l_{ij}| \leq 1$$

gilt. □

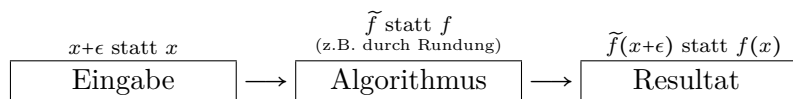
2.2.5 Lösen eines Gleichungssystems $Ax = b$

2.2.6 Bemerkungen

2.2.7 Beispiel zur Pivotisierung

15.10.2014

3 Fehleranalyse



Bei der Fehleranalyse liegt das Hauptaugenmerk auf

Eingabefehler

z.B. Rundungsfehler, Fehler in Messdaten, Fehler im Modell (falsche Parameter)

Fehler im Algorithmus

z.B. Rundungsfehler durch Rechenoperationen, Approximationen

(z.B. Ableitung durch Differenzenquotient oder die Berechnung von Sinus durch abgebrochene Reihenentwicklung)

1. *Frage* Wie wirken sich Eingabefehler auf das Resultat unabhängig vom gewählten Algorithmus aus?
2. *Frage* Wie wirken sich (Rundungs-)Fehler des Algorithmus aus?
Und wie verstärkt der Algorithmus Eingabefehler?

3.1 Zahlendarstellung und Rundungsfehler

Auf (Digital-)Rechnern können nur endlich viele Zahlen realisiert werden.

Die wichtigsten Typen sind:

- **ganze Zahlen** (integer):

$$z = \pm \sum_{i=0}^m z_i \beta_i \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} \beta = \text{Basis des Zahlensystems (oft } \beta = 2) \\ z_i \in \{0, \dots, \beta - 1\} \end{array}$$

- **Gleitpunktzahlen** (floating point)

3.1.1 Definition: Gleitkommazahl

Eine Zahl $x \in \mathbb{Q}$ mit einer Darstellung

$$x = \sigma \cdot (a_1.a_2 \dots a_t)_\beta \cdot \beta^e = \sigma \beta^e \cdot \sum_{\nu=1}^t a_\nu \beta^{-\nu+1}$$

$\beta \in \mathbb{N}$	Basis des Zahlensystems
$\sigma \in \{\pm 1\}$	Vorzeichen
$m = (a_1.a_2 \dots a_t)_\beta$ $= \sum_{\nu=1}^t a_\nu \beta^{-\nu+1}$	Mantisse
$a_i \in \{0, \dots, \beta - 1\}$	Ziffern der Mantisse
$t \in \mathbb{N}$	Mantissenlänge
$e \in \mathbb{Z}$	mit $e_{min} \leq e \leq e_{max}$ Exponent

heißt **Gleitkommazahl** mit t Stellen und Exponent e zur Basis β .

Ist $a_1 \neq 0$, so heißt x **normalisierte Gleitkommazahl**

3.1.2 Bemerkung

- a) 0 ist keine normalisierte Gleitkommazahl, da $a_1 = 0$ ist.
- b) $a_1 \neq 0$ stellt sicher, dass die Gleitkommadarstellung eindeutig ist.
- c) In der Praxis werden auch nicht-normalisierte Darstellungen verwendet.
- d) Heutige Rechner verwenden meist $\beta = 2$, aber auch $\beta = 8, \beta = 16$.

3.1.3 Beispiel

bit-Darstellung nach IEEE-Standard 754 von floating point numbers

Sei die Basis $\beta = 2$.

	Speicherplatz	t	e_{min}	e_{max}
einfache Genauigkeit (float)	32bits = 4Bytes	24	-126	127
doppelte Genauigkeit (double)	64bits = 8Bytes	52	-1022	1023

Darstellung im Rechner (Bitmuster) für float:

$$\boxed{s \mid b_0 \dots b_7 \mid a_2 \dots a_{24}}$$

(Da $a_1 \neq 0$, also $a_1 = 1$ gilt, wird a_1 nicht gespeichert)

Interpretation ($s, b, a_i \in \{0, 1\} \forall i$)

- s Vorzeichenbit: $\sigma = (-1)^s \Rightarrow \begin{matrix} \sigma(0) = 1 \\ \sigma(1) = -1 \end{matrix}$
- $b = \sum_{i=0}^7 b_i \cdot 2^i \in \{1, \dots, 254\}$ speichert den Exponenten mit
 $e = b - \underbrace{127}_{\text{Basiswert}}$ (kein Vorzeichen nötig)
 Beachte: $b_0 = \dots = b_7 = 1$ sowie $b_0 = \dots = b_7 = 0$ sind bis auf Ausnahmen keine gültigen Exponenten
- $m = (a_1.a_2 \dots a_{24}) = 1 + \sum_{\nu=2}^{24} a_\nu 2^{1-\nu}$ stellt die Mantisse dar, $a_1 = 1$ wird nicht abgespeichert.
- Besondere Zahlen per Konvention:

$$x = 0: s \text{ bel.}, b = 0, m = 1 \quad \boxed{s \mid 0 \dots 0 \mid 0 \dots 0}$$

$$x = \pm\infty: s \text{ bel.}, b = 255, m = 1 \quad \boxed{s \mid 1 \dots 1 \mid 0 \dots 0}$$

$$x = \text{NaN} \quad s \text{ bel.}, b = 255, m \neq 1$$

$$x = (-1)^s \quad s \text{ bel.}, b = 0, m \neq 1 \text{ und } x \text{ hat die Form } x = (0 + \sum_{\nu=2}^{24} a_\nu \cdot 2^{1-\nu}) \cdot 2^{126} \text{ („denormalized“ number)}$$

Betragsmäßig **größte Zahl**:

$$\boxed{0 \mid 01 \dots 1 \mid 1 \dots 1}$$

$$x_{max} = (2 - 2^{-23}) \cdot 2^{127} \approx 3,4 \cdot 10^{38}$$

Betragsmäßig **kleinste Zahl**:

$$\boxed{0 \mid 0 \dots 0 \mid 0 \dots 01}$$

$$x_{min} = (2 - 2^{-23}) \cdot 2^{-126} = 2^{-149} \approx 1,4 \cdot 10^{-45}$$

3.1.4 Verteilung der Maschinenzahlen

ungleichmäßig im Dezimalsystem, z. B.

$$x = \pm a_1.a_2a_3 \cdot 2^e \quad -2 \leq e \leq 1 \quad a_i \in \{0, 1\}$$

IMAGE MISSING

ist im Dualsystem gleichmäßig verteilt.

3.1.5 Bezeichnungen

overflow es ergibt sich eine Zahl, die betragsmäßig größer ist als die größte maschinendarstellbare Zahl

underflow entsprechend, betragsmäßig kleiner als die kleinste positive Zahl

Bsp.: overflow beim integer $b = e + 127$

$$\begin{array}{rcl} b & = & 254 \quad 11111110 \\ & + & 3 \quad 00000011 \\ b + 3 = 257 \bmod 2^8 & = & 1 \quad \overline{100000001} \end{array}$$

3.1.6 Rundungsfehler

Habe $x \in \mathbb{R}$ die normalisierte Darstellung

$$\begin{aligned} x &= \sigma \cdot \beta^e \left(\sum_{\nu=1}^t a_{\nu} \beta^{1-\nu} + \sum_{\nu=t+1}^{\infty} a_{\nu} \beta^{1-\nu} \right) \\ &= \sigma \cdot \beta^e \left(\sum_{\nu=1}^t a_{\nu} \beta^{1-\nu} + \beta^{1-t} \sum_{l=1}^{\infty} a_{t+l} \beta^{-l} \right) \end{aligned}$$

mit $e_{\min} \leq e \leq e_{\max}$, dann wird mit $fl(x)$ die gerundete Zahl bezeichnet, wobei $fl(x)$ eindeutig gegeben ist durch die Schranke an den **absoluten Rundungsfehler**

$$|fl(x) - x| \leq \begin{cases} \frac{1}{2} \beta^{e+1+t} & \text{bei symmetrischem Runden} \\ \beta^{e+1+t} & \text{bei Abschneiden} \end{cases}.$$

Für die **relative Rechengenauigkeit** folgt somit

$$\frac{|fl(x) - x|}{|x|} \leq \begin{cases} \frac{1}{2} \beta^{1-t} & \text{bei symmetrischem Runden} \\ \beta^{1-t} & \text{bei Abschneiden} \end{cases}.$$

Die **Maschinengenauigkeit** des Rechners ist daher durch

$$eps = \beta^{1-t} \quad (\text{für float} \approx 10^{-7}, \text{ für double} \approx 10^{-16})$$

gegeben.

Die Mantissenlänge bestimmt also die Maschinengenauigkeit. Bei einfacher Genauigkeit ist $fl(x)$ bis auf ungefähr 7 signifikante Stellen genau.

Im Folgenden betrachten wir symmetrisches Runden und definieren daher

$$\tau := \frac{1}{2} eps$$

Weiterhin gilt:

a) Die kleinste Zahl am Rechner, welche größer als 1 ist, ist

$$1 + \epsilon_{ps}$$

b) Eine Maschinenzahl x repräsentiert eine Eingabemenge

$$E(x) = \{\tilde{x} \in \mathbb{R} : |\tilde{x} - x| \leq \tau|x|\}$$

IMAGE MISSING

3.1.7 Bemerkung

Gesetze der arithmetischen Operationen gelten i.A. nicht, z.B.

- x Maschinenzahl $\Rightarrow fl(x + \nu) = x$ für $|\nu| < \tau|x|$
- Assoziativ- und Distributivgesetze gelten nicht, z.B. für $\beta = 10$, $t = 3$, $a = 0,1$, $b = 105$, $c = -104$ gilt:

$$\begin{aligned} fl(a + fl(b + c)) &= 1,1 \\ fl(fl(a + b) + c) &= fl(fl(105,1) + (-104)) \\ &= fl(105 - 104) \\ &= 1 \quad \nexists \end{aligned}$$

\Rightarrow Für einen Algorithmus ist die Reihenfolge der Operationen wesentlich! Mathematisch äquivalente Formulierungen können zu verschiedenen Ergebnissen führen.

3.1.8 Auslöschung von signifikanten Stellen

Sei $x = 9,995 \cdot 10^{-1}$, $y = 9,984 \cdot 10^{-1}$. Runde auf drei signifikante Stellen und berechne $x - y$:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x, y) &:= fl(fl(x) - fl(y)) = fl(1,00 \cdot 10^0 - 9,98 \cdot 10^{-1}) \\ &= fl(0,02 \cdot 10^{-1}) \\ &= fl(2,00 \cdot 10^{-3}) \\ f(x, y) &:= x - y \\ &:= 0,0011 = 1,1 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich der relative Fehler

$$\frac{|\tilde{f}(x, y) - f(x, y)|}{|f(x, y)|} = \frac{|2 \cdot 10^{-3} - 1,1 \cdot 10^{-3}|}{|1,1 \cdot 10^{-3}|} = 82\%$$

3 Fehleranalyse

Der Grund hierfür ist, dass das Problem der Subtraktion zweier annähernd gleich großer Zahlen schlecht konditioniert ist.

Zwei Regeln:

- 1) Umgehbare Subtraktion annähernd gleich großer Zahlen vermeiden!
- 2) Unumgängliche Subtraktion möglichst an den Anfang des Algorithmus stellen! (siehe später)

3.2 Kondition eines Problems

Es wird das Verhältnis

$$\frac{\text{Ausgabefehler}}{\text{Eingabefehler}}$$

untersucht.

3.2.1 Definition: Problem

Sei $f : U \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit U offen und sei $x \in U$. Dann bezeichne (f, x) das Problem, zu einem gegebenen x die Lösung $f(x)$ zu finden.

3.2.2 Definition: absoluter und relativer Fehler

Sei $x \in \mathbb{R}^n$ und $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ eine Näherung an x . Weiterhin sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf \mathbb{R}^n .

a) $\|\tilde{x} - x\|$ heißt **absoluter Fehler**

b) $\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|}$ heißt **relativer Fehler**

Da der relative Fehler skalierungsinvariant ist, d.h. unabhängig von der Wahl von x ist, ist dieser i.d.R. von größerem Interesse. Beide Fehler hängen von der Wahl der Norm ab! Häufig werden Fehler auch komponentenweise gemessen:

$$\begin{array}{lll} \text{Für } i = 1, \dots, n : & |\tilde{x}_i - x_i| \leq \delta & (\text{absolut}) \\ & |\tilde{x}_i - x_i| \leq \delta |x_i| & (\text{relativ}) \end{array}$$

3.2.3 Wiederholung: Normen

Euklidische Norm (l_2 -Norm):	$\ x\ _2 := \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i ^2}$
<i>IMAGE MISSING</i>	
Maximumsnorm (l_∞ -Norm):	$\ x\ _\infty := \max\{ x_i : i = 1, \dots, n\}$
<i>IMAGE MISSING</i>	
Summennorm (l_1 -Norm):	$\ x\ _1 := \sum_{i=1}^n x_i $
<i>IMAGE MISSING</i>	
Hölder-Norm (l_p -Norm):	$\ x\ _p := \left(\sum_{i=1}^n x_i ^p \right)^{\frac{1}{p}}$

3.2.4 Definition: Matrixnorm

Auf dem \mathbb{R}^n sei die Norm $\|\cdot\|_a$ und auf dem \mathbb{R}^m die Norm $\|\cdot\|_b$ gegeben. Dann ist die zugehörige **Matrixnorm** gegeben durch:

$$\begin{aligned} \|A\|_{a,b} &:= \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_b}{\|x\|_a} \\ &= \sup_{\|x\|_a=1} \|Ax\|_b \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

Also ist $\|A\|_{a,b}$ die kleinste Zahl $c > 0$ mit

$$\|Ax\|_b \leq c \|x\|_a \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

3.2.5 Definition: Frobeniusnorm, p-Norm, Verträglichkeit

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

- a) **Frobeniusnorm** (Schurnorm): $\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}^2|}$
- b) **p-Norm**: $\|A\|_p := \|A\|_{p,p}$
- c) Eine Matrixnorm heißt **verträglich** mit den Vektornormen $\|\cdot\|_a, \|\cdot\|_b$, falls gilt ¹:

$$\|Ax\|_b \leq \|A\| \cdot \|x\|_a \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

¹ Beachte: $\|A\|_{a,b}$ ist die kleinste Norm im Gegensatz zu $\|A\|$, welche hier beliebig ist.

3.2.6 Bemerkungen

- a) Die Normen $\|\cdot\|_F$ und $\|\cdot\|_p$ sind **submultiplikativ**, d.h.

$$\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

- b) Die Norm $\|\cdot\|_{1,1}$ wird auch **Spaltensummennorm** genannt:

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

Sie ist das Maximum der Spaltensummen².

- c) Die Norm $\|\cdot\|_{\infty,\infty}$ wird auch **Zeilensummennorm** genannt³:

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

- d) Die Frobeniusnorm $\|\cdot\|_F$ ist verträglich mit der euklidischen Norm $\|\cdot\|_2$

- e) Die Wurzeln aus den Eigenwerten von $A^T A$ heißen **Singulärwerte** σ_i von A. Mit ihnen kann die $\|\cdot\|_{2,2}$ Norm dargestellt werden⁴:

$$\begin{aligned} \|A\|_2 &= \max\{\sqrt{\mu} : A^T A \cdot x = \mu x \text{ für ein } x \neq 0\} \\ &= \sigma_{\max} \end{aligned}$$

22.10.2014

3.2a) Normweise Konditionsanalyse

3.2.7 Definition: absolute und relative normweise Kondition

Sei (f, x) ein Problem mit $f : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $\|\cdot\|_a$ auf \mathbb{R}^n und $\|\cdot\|_b$ auf \mathbb{R}^m eine Norm.

- a) Die **absolute normweise Kondition** eines Problems (f, x) ist die kleinste Zahl $\kappa_{abs} > 0$ mit

$$\begin{aligned} \|f(\tilde{x}) - f(x)\|_b &\leq \kappa_{abs}(f, x) \|\tilde{x} - x\|_a + o(\|\tilde{x} - x\|_a) \\ \left(f(\tilde{x}) - f(x) &= \underbrace{f'(x)(\tilde{x} - x)}_{\text{Taylorentwicklung}} \pm o(\|\tilde{x} - x\|) \right) \quad \text{für } \tilde{x} \rightarrow x \end{aligned} \tag{3.2.2}$$

²Beweis: siehe Übungsblatt 3

³Beweis: siehe Übungsblatt 3

⁴Beweis: siehe Übungsblatt 3

- b) Die **relative normweise Kondition** eines Problems (f, x) mit $x \neq 0, f(x) \neq 0$ ist die kleinste Zahl $\kappa_{rel} > 0$ mit

$$\frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|_b}{\|f(x)\|_b} \leq \kappa_{rel}(f, x) \frac{\|\tilde{x} - x\|_a}{\|x\|_a} + o\left(\frac{\|\tilde{x} - x\|_a}{\|x\|_a}\right) \quad \text{für } \tilde{x} \rightarrow x \quad (3.2.3)$$

c) Sprechweise:

- falls κ „klein“ ist, ist das Problem „gut konditioniert“
- falls κ „groß“ ist, ist das Problem „schlecht konditioniert“

3.2.8 Lemma

Falls f differenzierbar ist, gilt

$$\kappa_{abs}(f, x) = \|Df(x)\|_{a,b} \quad (3.2.4)$$

und für $f(x) \neq 0$

$$\kappa_{rel}(f, x) = \frac{\|x\|_a}{\|f(x)\|_b} \cdot \|Df(x)\|_{a,b} \quad (3.2.5)$$

wobei $Df(x)$ die Jakobi-Matrix bezeichnet.

3.2.9 Beispiel: Kondition der Addition

$f(x_1, x_2) := x_1 + x_2, f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.

Wähle l_1 -Norm auf \mathbb{R}^2 (und \mathbb{R})

$$\begin{aligned} Df(x_1, x_2) &= (\nabla f^T) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} f, \frac{\partial}{\partial x_2} f \right) \\ &= (1, 1) \end{aligned} \quad (\text{Matrix!})$$

damit

$$\begin{aligned} \kappa_{abs}(f, x) &= \|Df(x)\|_{1,1} && (\text{Matrix-Norm!!}) \\ &= \|Df(x)\|_1 \\ &= 1 \\ \kappa_{rel}(f, x) &= \frac{\|x\|_1}{\|f(x)\|_1} \cdot \|Df(x)\|_1 \\ &= \frac{|x_1| + |x_2|}{|x_1 + x_2|} \end{aligned}$$

3 Fehleranalyse

Daraus folgt: Die Addition zweier Zahlen mit gleichem Vorzeichen ergibt

$$\kappa_{rel} = 1$$

Die Subtraktion zweier annähernd gleich großer Zahlen ergibt eine sehr schlechte relative Konditionierung:

$$\kappa_{rel} \gg 1$$

Zum Beispiel in 3.1.8: Es ist

$$x = \begin{pmatrix} 9,995 \\ -9,984 \end{pmatrix} \cdot 10^{-1}$$
$$\tilde{x} = fl(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -9,98 \cdot 10^{-1} \end{pmatrix}$$

also

$$\begin{aligned} \frac{|f(\tilde{x}) - f(x)|}{|f(x)|} &= \frac{0,9}{1,1} = 0,8\overline{1} \\ &\leq \kappa_{rel}(f, x) \cdot \frac{\|\tilde{x} - x\|_1}{\|x\|_1} \\ &= \kappa_{rel}(f, x) \cdot 4,6 \cdot 10^{-4} \end{aligned}$$

3.2.10 Beispiel: Lösen eines Gleichungssystems

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und $b \in \mathbb{R}^n$. Es soll

$$Ax = b$$

gelöst werden. Die möglichen Lösungen in A und in b lassen sich folgendermaßen ermitteln:

- a) Betrachte die Störungen in b :
Sei hierzu

$$f : b \mapsto x = A^{-1}b$$

Berechne dann $\kappa(f, b)$ und löse

$$\begin{aligned} A(x + \Delta x) &= b + \Delta b \\ f(b + \Delta b) - f(b) &= \Delta x \\ &= A^{-1} \cdot \Delta b && \text{da } x = A^{-1}b \\ \Rightarrow \|\Delta x\|_b &= \|A^{-1} \Delta b\|_b \\ &\leq \|A^{-1}\|_{a,b} \cdot \|\Delta b\|_b && \forall b, \Delta b \end{aligned}$$

wobei $\|\cdot\|$ auf $\mathbb{R}^{n \times n}$ die dem \mathbb{R}^n zugeordnete Matrix-Norm sei.

Die Abschätzung ist **scharf**, d.h. es gibt ein $\Delta b \in \mathbb{R}^n$, so dass „=“ gilt, nach Definition 3.2.4.

Also gilt⁵:

$$\kappa_{abs}(f, b) = \|A^{-1}\|_{a,b} \quad (3.2.6)$$

unabhängig von b . ($x \mapsto Ax = \kappa_{abs}$)

Ebenso folgt die scharfe Abschätzung

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

Damit

$$\kappa_{rel}(f, b) = \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|b\|}{\|A^{-1} \cdot b\|} \quad (3.2.7)$$

Da $\|b\| \leq \|A\| \cdot \|x\| = \|A\| \cdot \|A^{-1}b\|$ folgt:

$$\kappa_{rel}(f, b) \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \quad (3.2.8)$$

für alle (möglichen rechten Seiten) b .

3.2.8 ist scharf in dem Sinne, dass es ein $\widehat{b} \in \mathbb{R}^n$ gibt mit

$$\|\widehat{b}\| = \|A\| \cdot \|\widehat{x}\|$$

und somit

$$\kappa_{rel}(f, \widehat{b}) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

b) Betrachte die Störungen in A :

Löse also

$$(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b$$

Sei hierzu

$$\begin{aligned} f : A &\mapsto x = A^{-1}b \\ \mathbb{R}^{n \times n} &\rightarrow \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

⁵vgl. auch Lemma 3.2.8: $\kappa_{abs}(f, b) = \|Df(b)\|_{a,b} = \|A^{-1}\|_{a,b}$

3 Fehleranalyse

und berechne $\kappa(f, A)$ mittels Ableitung $Df(A) : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} C \mapsto Df(A)C &= \frac{d}{dt} \left((A + tC)^{-1} \cdot b \right) \Big|_{t=0} \\ &= \frac{d}{dt} \left((A + tC)^{-1} \right) \Big|_{t=0} \cdot b \end{aligned}$$

Weiterhin gilt

$$\frac{d}{dt} \left((A + tC)^{-1} \right) \Big|_{t=0} = -A^{-1}CA^{-1}, \quad (3.2.9)$$

da

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} I \\ &= \frac{d}{dt} \left((A + tC)(A + tC)^{-1} \right) \\ &= C(A + tC)^{-1} + (A + tC) \cdot \frac{d}{dt} (A + tC)^{-1} \\ \Leftrightarrow \frac{d}{dt} (A + tC)^{-1} &= -(A + tC)^{-1} \cdot C(A + tC)^{-1}, \end{aligned}$$

falls $(A + tC)$ invertierbar ist. Für ein genügend kleines t ist das gewährleistet, da A invertierbar ist (s. Lemma 3.2.12).

$$\Rightarrow Df(A)C = -A^{-1}CA^{-1}b$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \kappa_{abs}(f, A) &= \|Df(A)\| \\ &= \sup_{\substack{C \neq 0 \\ C \in \mathbb{R}^{n \times n}}} \frac{\|A^{-1}CA^{-1}b\|}{\|C\|} \\ &\leq \sup_{\substack{C \neq 0 \\ C \in \mathbb{R}^{n \times n}}} \frac{\|A^{-1}\| \cdot \|C\| \cdot \|A^{-1}b\|}{\|C\|} \\ &= \|A^{-1}\| \cdot \|b\| \\ &\leq \|A^{-1}\|^2 \cdot \|b\| \\ \kappa_{rel}(f, A) &= \frac{\|A\|}{\|f(A)\|} \cdot \|Df(A)\| \\ &\leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

c) betrachte Störungen in A und b :

$$(A + \Delta A)(x + \Delta x) = (b + \Delta b)$$

Für κ müsste $\|(A, b)\|$ festgelegt werden. Dies wird jedoch nicht betrachtet. Es gilt aber folgende Abschätzung für invertierbare Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und Störungen $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot (1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\|) \cdot \underbrace{\left(\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right)}_{\neq \frac{\|(\Delta A, \Delta b)\|}{\|(A, b)\|}} \quad (3.2.11)$$

Beweis. s. Übungsblatt □

3.2.11 Definition: Kondition einer Matrix

Sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf $\mathbb{R}^{n \times n}$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Die Größe

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

heißt **Kondition der Matrix** bzgl. der Norm $\|\cdot\|$.

Ist $\|\cdot\|$ von einer Vektor-Norm $\|\cdot\|_p$ induziert, bezeichnet $\text{cond}_p(A)$ die $\text{cond}_{\|\cdot\|_p}(A)$. Wir schreiben $\text{cond}(A)$ für $\text{cond}_2(A)$.

$\text{cond}_{\|\cdot\|}(A)$ schätzt die relative Kondition eines linearen GLS $Ax = b$ für alle möglichen Störungen in b oder in A ab und diese Abschätzung ist scharf.

Es stellt sich nun die Frage:

Wann existiert die Inverse der gestörten invertierbaren Matrix A ?

Hierzu werden wir die Relationen benötigen:

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

und mit $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\|C\| < 1$

$$(I - C)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} C^k$$

$$\|(I - C)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|C\|}$$

27.10.2014

3.2.12 Lemma (Neumannsche Reihe)

Sei $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $\|C\| < 1$ und mit einer submultiplikativen Norm $\|\cdot\|$, so ist $(I - C)$ invertierbar und es gilt:

$$(I - C)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} C^k$$

3 Fehleranalyse

Weiterhin gilt:

$$\|(I - C)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|C\|}$$

Beweis. Es gilt zu zeigen, dass $\sum_{k=1}^{\infty} C^k$ existiert:

Sei $q := \|C\| < 1$, dann gilt:

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{k=0}^m C^k \right\| &\leq \sum_{k=0}^m \|C^k\| && \text{Dreiecksungleichung} \\ &\leq \sum_{k=0}^m \|C\|^k && \text{da } \|\cdot\| \text{ submultiplikativ} \\ &= \sum_{k=0}^m q^k \\ &= \frac{1 - q^{m+1}}{1 - q} \\ &\leq \frac{1}{1 - \|C\|} && \forall m \in \mathbb{N}, \text{ da } q < 1 \text{ (geometr. Reihe)} \end{aligned}$$

Daraus folgt bereits, dass $\sum_{k=1}^{\infty} C^k$ existiert (nach Majorantenkriterium).

Weiter gilt dann:

$$\begin{aligned} (I - C) \sum_{k=1}^{\infty} C^k &= \lim_{m \rightarrow \infty} (I - C) \sum_{k=1}^m C^k \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} (C^0 - C^{m+1}) \\ &= I \end{aligned}$$

□

3.2.13 Bemerkung

a) Für symmetrische, positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt⁶:

$$\kappa_2(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (3.2.13)$$

b) Eine andere Darstellung von $\kappa(A)$ ist

$$\kappa(A) := \frac{\max_{\|x\|=1} \|Ax\|}{\min_{\|x\|=1} \|Ax\|} \in [0, \infty] \quad (3.2.14)$$

Diese ist auch für nicht invertierbare und rechteckige Matrizen wohldefiniert.

Dann gilt offensichtlich:

⁶Beweis: siehe Übungsblatt 3

- c) $\kappa(A) \geq 1$
- d) $\kappa(\alpha A) = \kappa(A)$ für $0 \neq \alpha \in \mathbb{R}$ (skalierungsinvariant)
- e) $A \neq 0$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist genau dann singulär, wenn $\kappa(A) = \infty$.
 Wegen der Skalierungsinvarianz ist die Kondition zur Überprüfung der Regularität von A besser geeignet als die Determinante.

3.2.14 Beispiel: Kondition eines nichtlinearen Gleichungssystems

Sei $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar und $y \in \mathbb{R}^n$ gegeben.

Löse

$$f(x) = y$$

Gesucht:

$$\kappa(f^{-1}, y)$$

mit f^{-1} Ausgabe und y Eingabe.

Sei $Df(x)$ invertierbar, dann existiert aufgrund des Satzes für implizite Funktionen die inverse Funktion f^{-1} lokal in einer Umgebung von y mit $f^{-1}(y) = x$, sowie

$$D(f^{-1})(y) = (Df(x))^{-1}$$

Hiermit folgt:

$$\begin{aligned} \kappa_{abs}(f^{-1}, y) &= \|(Df(x))^{-1}\| \\ \kappa_{rel}(f^{-1}, y) &= \frac{\|f(x)\|}{\|x\|} \cdot \|(Df(x))^{-1}\| \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Für skalare Funktionen $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ folgt somit:

$$\kappa_{rel}(f^{-1}, y) = \frac{|f(x)|}{|x|} \cdot \frac{1}{|f'(x)|}$$

Falls $|f'(x)| \rightarrow 0$ ist es eine schlechte absolute Kondition.

Für $|f'(x)| \gg 0$ ist es eine gute absolute Kondition.

IMAGE MISSING

Damit bedeutet eine kleine Störung in y eine große Störung in x .

3.2b) Komponentenweise Konditionsanalyse

3.2.15 Beispiel

Falls A Diagonalgestalt hat, sind die Gleichungen unabhängig voneinander (entkoppelt). Die erwartete relative Kondition wäre dann – wie bei skalaren Gleichungen – stets gleich 1. Ebenso sind Störungen nur in der Diagonale zu erwarten. Jedoch:

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \\ \Rightarrow A^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon^{-1} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \kappa_{\infty} = \kappa_2 &= \frac{1}{\epsilon} \quad \text{für } 0 < \epsilon \leq 1 \end{aligned}$$

3.2.16 Definition: Komponentenweise Kondition

Sei (f, x) ein Problem mit $f(x) \neq 0$ und $x = (x_i)_{i=1, \dots, n}$ mit $x_i \neq 0$ für alle $i = 1, \dots, n$. Die **komponentenweise Kondition** von (f, x) ist die kleinste Zahl $\kappa_{rel} \geq 0$, so dass:

$$\frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|_{\infty}}{\|f(x)\|_{\infty}} \leq \kappa_{rel} \cdot \max_i \frac{|\tilde{x}_i - x_i|}{|x_i|} + o\left(\max_i \frac{|\tilde{x}_i - x_i|}{|x_i|}\right) \quad \text{für } \tilde{x} \rightarrow x$$

Vorsicht:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \neq \max_i \frac{|\tilde{x}_i - x_i|}{|x_i|}$$

3.2.17 Lemma

Sei f differenzierbar und fasse $|\cdot|$ komponentenweise auf, d.h. $|x| = \begin{pmatrix} |x_1| \\ \vdots \\ |x_n| \end{pmatrix}$. Dann gilt:

$$\kappa_{rel} = \frac{\| |Df(x)| \cdot |x| \|_{\infty}}{\|f(x)\|_{\infty}} \quad (3.2.16)$$

Beweis. Vergleiche seien ebenfalls komponentenweise zu verstehen.
Nach dem Satz von Taylor gilt:

$$\begin{aligned}
 f_i(\tilde{x}) - f_i(x) &= \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}(x) \right) \cdot \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 - x_1 \\ \vdots \\ \tilde{x}_n - x_n \end{pmatrix} + o(\|\tilde{x} - x\|) \\
 \Rightarrow |f_i(\tilde{x}) - f_i(x)| &\leq |Df(x)| \cdot \begin{pmatrix} |x_1| \cdot \frac{\tilde{x}_1 - x_1}{|x_1|} \\ \vdots \\ |x_n| \cdot \frac{\tilde{x}_n - x_n}{|x_n|} \end{pmatrix} + o\left(\max_i \frac{\tilde{x}_i - x_i}{|x_i|}\right) \quad \text{da } x_i \text{ fest und } \tilde{x}_i \rightarrow x_i \\
 &\leq |Df(x)| \cdot |x| \cdot \max_i \frac{\tilde{x}_i - x_i}{|x_i|} + o\left(\max_i \frac{\tilde{x}_i - x_i}{|x_i|}\right) \\
 \Rightarrow \frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|_\infty}{\|f(x)\|_\infty} &\leq \frac{\| |Df(x)| \cdot |x| \|_\infty}{\|f(x)\|_\infty} \cdot \max_i \frac{\tilde{x}_i - x_i}{|x_i|} + o\left(\max_i \frac{\tilde{x}_i - x_i}{|x_i|}\right)
 \end{aligned}$$

Wähle $\tilde{x}_i = x_j + h \cdot \text{sign} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x)$ mit $h > 0$, dann gilt:

$$|Df_i(x)(\tilde{x} - x)| = Df_i(x)(\tilde{x} - x)$$

und in obiger Rechnung gilt Gleichheit.

Also folgt, dass

$$\frac{\| |Df(x)| \cdot |x| \|_\infty}{\|f(x)\|_\infty} = \kappa_{rel}$$

□

3.2.18 Beispiel

a) Komponentenweise Kondition der Multiplikation

$$\begin{aligned}
 f: \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) := x \cdot y \\
 \Rightarrow Df(x, y) &= (y, x) \\
 \Rightarrow \kappa_{rel}(x, y) &= \frac{\left\| (|y|, |x|) \cdot \begin{pmatrix} |x| \\ |y| \end{pmatrix} \right\|_\infty}{|x \cdot y|} \\
 &= \frac{2 \cdot |x| \cdot |y|}{|x \cdot y|} \\
 &= 2
 \end{aligned}$$

b) Komponentenweise Kondition eines linearen Gleichungssystems:

Löse $Ax = b$ mit möglichen Störungen in b , also zu

$$\begin{aligned}
 f: b &\mapsto A^{-1}b \\
 \kappa_{rel} &= \frac{\| |A^{-1}| \cdot |b| \|_\infty}{\|A^{-1}b\|_\infty}
 \end{aligned}$$

3 Fehleranalyse

Falls A eine Diagonalmatrix ist, folgt:

$$\kappa_{rel} = 1$$

c) Komponentenweise Kondition des Skalarproduktes:

$$\begin{aligned}\langle x, y \rangle &:= \sum_{i=1}^n x_i y_i = x^T y \\ f: \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = \langle x, y \rangle \\ \Rightarrow Df(x, y) &= (y^T, x^T) \\ \kappa_{rel} &= \frac{\left\| \begin{pmatrix} y^T & x^T \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right\|_{\infty}}{\|\langle x, y \rangle\|_{\infty}} \\ &= \frac{2 \cdot |y^T| \cdot |x|}{|\langle x, y \rangle|} \\ &= 2 \cdot \frac{\langle |x|, |y| \rangle}{|\langle x, y \rangle|} \\ &= 2 \cdot \frac{\cos(|x|, |y|)}{\cos(x, y)}\end{aligned}$$

$$\text{da } \cos(x, y) = \frac{\langle y, x \rangle}{\|x\|_2 \cdot \|y\|_2}.$$

Falls x und y nahezu senkrecht aufeinander stehen, kann das Skalarprodukt sehr schlecht konditioniert sein.

Zum Beispiel für $x = \tilde{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $y = \begin{pmatrix} 1 + 10^{-10} \\ -1 \end{pmatrix}$, $\tilde{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

IMAGE MISSING

3.3 Stabilität von Algorithmen

Bislang: Kondition eines gegebenen Problems (f, x) .

Nun stellt sich die Frage: *Was passiert durch das Implementieren am Rechner?*

Ein „stabiler“ Algorithmus sollte ein gut konditioniertes Problem nicht „kaputt machen“.

IMAGE MISSING

3.3a) Vorwärtsanalyse

Die Fehlerfortpflanzung durch die einzelnen Rechenschritte, aus denen die Implementierung aufgebaut ist, wird abgeschätzt.

3.3.1 Bemerkung

Für die Rechenoperationen $+$, $-$, \cdot , $/$, kurz ∇ , gilt:

$$\begin{aligned} fl(a \nabla b) &= (a \nabla b) \cdot (1 + \epsilon) \\ &= (a \nabla b) \cdot \frac{1}{1 + \mu} \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

mit $|\epsilon|, |\mu| \leq eps$.

29.10.2014

3.3.2 Beispiel

Sei $f(x_1, x_2, x_3) := \frac{x_1 x_2}{x_3}$ mit Maschinenzahlen x_i und $x_3 \neq 0$ und sei der Algorithmus durch

$$f(x_1, x_2, x_3) = (f^{(2)} \circ f^{(1)})(x_1, x_2, x_3)$$

gegeben mit

$$\begin{aligned} f^{(1)}(x_1, x_2, x_3) &= (x_1 \cdot x_2, x_3) & \text{und} \\ f^{(2)}(y, z) &= \frac{y}{z} \end{aligned}$$

Die Implementierung \tilde{f} von f beinhaltet Rundungsfehler.

Sei $x = (x_1, x_2, x_3)$. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{f}^{(1)}(x) &= (fl(x_1 \cdot x_2), x_3) \\ &= (x_1 x_2 (1 + \epsilon_1), x_3) \end{aligned}$$

mit $|\epsilon_1| \leq eps$:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x) &= \tilde{f}^{(2)}(\tilde{f}^{(1)}(x)) \\ &= fl(f^{(2)}(x_1 x_2 (1 + \epsilon_1), x_3)) \\ &= \frac{x_1 x_2 (1 + \epsilon_1)}{x_3} \cdot (1 + \epsilon_2) \\ &= f(x) \cdot (1 + \epsilon_1)(1 + \epsilon_2) \end{aligned}$$

mit $|\epsilon_2| \leq eps$:

$$\begin{aligned} \frac{|\tilde{f}(x) - f(x)|}{|f(x)|} &= |\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_1 \cdot \epsilon_2| \\ &\leq 2eps + eps^2 \end{aligned}$$

3 Fehleranalyse

Dies ist eine „worst case“ Analyse, da immer der maximale Fehler angenommen wird, und gibt i.d.R. eine starke Überschätzung des Fehlers an. Für qualitative Aussagen sind sie jedoch unnützlich.

In Computersystemen stehen mehr Operationen wie ∇ zur Verfügung, die mit einer relativen Genauigkeit eps realisiert werden können.

Daher:

3.3.3 Definition: Elementar ausführbar

Eine Abbildung $\phi : U \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ heißt **elementar ausführbar**, falls es eine elementare Operation $\tilde{\phi} : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}^m$ gibt, wobei \mathbb{F} die Menge der Maschinenzahlen bezeichne mit

$$|\tilde{\phi}_i(x) - \phi_i(x)| \leq eps \cdot |\phi_i(x)| \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \text{ und } i = 1, \dots, m. \quad (3.3.2)$$

$\tilde{\phi}$ heißt dann **Realisierung** von ϕ .

Bemerkung: aus (3.3.2) folgt für $1 \leq p \leq \infty$:

$$\|\tilde{\phi}(x) - \phi(x)\|_p \leq eps \cdot \|\phi(x)\|_n \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \quad (3.3.3)$$

3.3.4 Definition: Algorithmus, Implementation

Sei $f : E \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ gegeben.

Ein Tupel $(f^{(1)}, \dots, f^{(l)})$ mit $l \in \mathbb{N}$ von elementar ausführbaren Abbildungen

$$f^{(i)} : U_i \subseteq \mathbb{R}^{k_i} \rightarrow U_{i+1} \subseteq \mathbb{R}^{k_{i+1}}$$

mit $k_1 = n$ und $k_{l+1} = m$ heißt **Algorithmus** von f , falls

$$f = f^{(l)} \circ \dots \circ f^{(1)}$$

Das Tupel $(\tilde{f}^{(1)}, \dots, \tilde{f}^{(l)})$ mit Abbildungen $\tilde{f}^{(i)}$, welche Realisierungen der $f^{(i)}$ sind, heißt **Implementation** von $(f^{(1)}, \dots, f^{(l)})$. Die Komposition

$$\tilde{f} = \tilde{f}^{(l)} \circ \dots \circ \tilde{f}^{(1)}$$

heißt Implementation von f .

Im Allgemeinen gibt es verschiedene Implementierungen einer Abbildung f .

3.3.5 Lemma (Fehlerfortpflanzung)

Sei $x \in \mathbb{R}^n$ und $\tilde{x} \in \mathbb{F}^n$ mit $|\tilde{x}_i - x_i| \leq \text{eps}|x_i|$ für alle $i = 1, \dots, n$. Sei $(f^{(1)}, \dots, f^{(l)})$ ein Algorithmus für f und $(\tilde{f}^{(1)}, \dots, \tilde{f}^{(l)})$ eine zugehörige Implementation.

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} x^{(j+1)} &:= f^{(j)} \circ \dots \circ f^{(1)}(x) \\ x^{(1)} &:= x \end{aligned}$$

und entsprechend mit $\tilde{x}^{(j+1)}$ gilt, falls $x^{(j+1)} \neq 0$ für alle $j = 0, \dots, (l-1)$ und $\|\cdot\|$ eine beliebige p-Norm ist:

$$\begin{aligned} \frac{\|\tilde{x}^{(j+1)} - x^{(j+1)}\|}{\|x^{(j+1)}\|} &\leq \text{eps} \cdot \mathcal{K} + o(\text{eps}) \\ \mathcal{K}^{(j)} &= (1 + \kappa^{(j)} + \kappa^{(j)} \cdot \kappa^{(j-1)} + \dots + \kappa^{(j)} \cdot \dots \cdot \kappa^{(1)}) \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

wobei $\kappa^{(j)} := \kappa_{rel}(f^{(j)}, x^{(j)})$ die Kondition der elementar ausführbaren Operationen $f^{(j)}$ ist.

Beweis.

$$\begin{aligned} \frac{\|\tilde{x}^{(j+1)} - x^{(j+1)}\|}{\|x^{(j+1)}\|} &= \frac{\|\tilde{f}^{(j)}(\tilde{x}^{(j)}) - f^{(j)}(x^{(j)})\|}{\|f^{(j)}(x^{(j)})\|} \\ &\leq \frac{\|\tilde{f}(\tilde{x}) - f(\tilde{x})\|}{\|f(\tilde{x})\|} \cdot \frac{\|f(\tilde{x})\|}{\|f(x)\|} + \frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \quad (\text{Index } j \text{ vernachlässigt}) \\ &\leq \text{eps} \left(1 + \frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \right) + \frac{\|f(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \\ &\stackrel{\text{nach 3.3.3}}{=} \text{eps} + (\text{eps} + 1) \cdot \left(\kappa^{(j)} \cdot \frac{\|\tilde{x}^{(j)} - x^{(j)}\|}{\|x^{(j)}\|} \right) + o\left(\frac{\|\tilde{x}^{(j)} - x^{(j)}\|}{\|x^{(j)}\|} \right) \end{aligned}$$

Nach Voraussetzung gilt Gleichung (3.3.4) mit $\mathcal{K}^{(0)} = 1$ für $j = 0$.

Für $j = 1$ folgt nach Voraussetzung mit Gleichung (3.3.3)

$$\begin{aligned} \frac{\|\tilde{x}^{(2)} - x^{(2)}\|}{\|x^{(2)}\|} &\leq \text{eps} + (\text{eps} + 1) \cdot \left(\kappa^{(1)} \text{eps} + o(\text{eps}) \right) \\ &= \text{eps}(1 + \kappa^{(1)}) + o(\text{eps}) \\ &= \text{eps}\mathcal{K}^{(1)} + o(\text{eps}) \end{aligned}$$

3 Fehleranalyse

Womit der Induktionsanfang gezeigt ist.
Für den Induktionsschritt von $j - 1$ zu j :

$$\begin{aligned} \frac{\|\tilde{x}^{(j+1)} - x^{(j+1)}\|}{x^{(j+1)}} &\leq eps + (1 + eps)\kappa^{(j)} \left[eps\mathcal{K}^{(j-1)} + o(eps) \right] \\ &\quad + (1 + eps) \cdot o\left(eps \cdot \mathcal{K}^{(j-1)} + o(eps)\right) \\ &= eps \left(1 + \kappa^{(j)} \cdot \mathcal{K}^{(j-1)} \right) + o(eps) \end{aligned}$$

Mit $\mathcal{K}^{(j)} = 1 + \kappa^{(j)} \cdot \mathcal{K}^{(j-1)}$ folgt die Behauptung. □

Hiermit folgt:

3.3.6 Korollar

Unter der Voraussetzung von Lemma 3.3.5 gilt:

$$\frac{\|\tilde{f}(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \leq eps \cdot \left(1 + \kappa^{(l)} + \kappa^{(l)} \cdot \kappa^{(l-1)} + \dots + \kappa^{(l)} \cdot \dots \cdot \kappa^{(1)} \right) + o(eps) \quad (3.3.5)$$

3.3.7 Bemerkung

Mit Korollar 3.3.6 ist offensichtlich, dass schlecht konditionierte Probleme zu elementar ausführbaren Abbildungen so früh wie möglich ausgeführt werden sollten.

Nach Beispiel 3.2.9 ist die Subtraktion zweier annähernd gleicher Zahlen schlecht konditioniert. Deshalb sollte man unvermeidbare Subtraktionen möglichst früh durchführen. Allerdings hängt $\kappa^{(j)}$ nicht nur von $f^{(j)}$, sondern auch vom Zwischenergebnis $x^{(j)}$ ab, welches a priori unbekannt ist.

3.3.8 Bemerkung zur Sprechweise

Der Quotient

$$\begin{aligned} &\overbrace{\frac{\|\tilde{f}(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|}}^{\text{Gesamtfehler}} \\ &= \underbrace{\frac{\|\tilde{f}(\tilde{x})\|}{\|f(x)\|}}_{\substack{\text{Fehler} \\ \text{durch} \\ \text{Problem}}} \cdot \underbrace{\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|}}_{\substack{\text{Eingabe-} \\ \text{fehler}}} \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

gibt die **Güte des Algorithmus** an. Als Stabilitätsindikator kann also

$$\sigma(f, \tilde{f}, x) := \frac{\mathcal{K}}{\kappa_{rel}(f, x)} \quad (3.3.7)$$

verwendet werden und es gilt

$$\frac{\|\tilde{f}(\tilde{x}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} < \underbrace{\sigma(f, \tilde{f}, x)}_{\text{Beitrag des Algorithmus}} \cdot \underbrace{\kappa_{rel}(f, x)}_{\text{Beitrag des Problems}} \cdot \underbrace{eps}_{\text{Rundungsfehler}} + o(eps)$$

Falls $\sigma(f, \tilde{f}, x) < 1$, dämpft der Algorithmus die Fehlerfortpflanzung der Eingabe- und Rundungsfehler und heißt **stabil**.

Für $\sigma(f, \tilde{f}, x) \gg 1$ heißt der Algorithmus **instabil**.

3.3.9 Beispiel

Nach Gleichung (3.3.3) gilt für die Elementaroperationen $\mathcal{K} \leq 1$. Da für die Subtraktion zweier annähernd gleich großer Zahlen $\kappa_{rel} \gg 1$ gilt, ist der Stabilitätsfaktor zweier annähernd gleich großer Zahlen sehr klein und der Algorithmus also stabil, Falls es sich jedoch bei einer zusammengesetzten Abbildung $f = h \circ g$ bei der zweiten Abbildung h um eine Subtraktion handelt, gilt

$$\mathcal{K} = (1 + \kappa(sub) + \kappa(sub) \cdot \kappa(g))$$

und die Stabilität ist gefährdet. Genauere Abschätzungen und damit genauere Indikatoren können durch komponentenweise Betrachtungen erhalten werden.

3.3b) Rückwärtsanalyse

Die Fragestellung ist nun:

Kann $\tilde{f}(\hat{x})$ als exaktes Ergebnis von einer gestörten Eingabe \hat{x} unter der exakten Abbildung f aufgefasst werden?

Das würde heißen

$$\exists \hat{x} \in \mathbb{R}^n : f(\hat{x}) = \tilde{f}(\tilde{x}).$$

Dann schätze den Fehler

$$\|\hat{x} - x\|$$

bzw. für nicht injektive f

$$\min_{\hat{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \|\hat{x} - x\| \mid f(\hat{x}) = \tilde{f}(\tilde{x}) \}$$

ab.

IMAGE MISSING

3.3.10 siehe Folien

(siehe auch Folien)

IMAGE MISSING

3.4 Beurteilung von Näherungslösungen linearer GLS

Zu $Ax = b$ liege eine Näherungslösung \tilde{x} vor.

a) Im Sinne der Vorwärtsanalyse und der Fehlerentwicklung durch das Problem gilt:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

nach Beispiel 3.2.10, mit dem Residuum

$$\begin{aligned} r(\tilde{x}) &:= A\tilde{x} - b \\ &= \tilde{b} - b \\ &= \Delta b \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

Wie der absolute Fehler ist das Residuum skalierungsabhängig. Daher ist $\|r(\tilde{x})\|$ „klein“ ungeeignet, um Genauigkeitsaussagen zu treffen.

Um den Fehler in x abzuschätzen, ist die Betrachtung von

$$\frac{\|r(\tilde{x})\|}{\|b\|} \tag{3.4.2}$$

geeigneter.

Für große $\text{cond}(A)$ ist dieser Quotient jedoch weiterhin ungeeignet.

b) siehe Folien

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

4.1 Gaußsches Eliminationsverfahren mit Äquilibration und Nachiteration

Mit Skalierung $D_z A$ (**Zeilenskalierung**) oder $D_s A$ (**Spaltenskalierung**) mittels Diagonalmatrizen D_z, D_s lässt sich eine Pivotstrategie beliebig abändern. Jetzt ist die Frage: *Was ist eine „gute“ Skalierung?*

Skalierung ändert die Länge der Basisvektoren des Bild- bzw. des Urbildvektorraumes. Durch Normierung der Länge auf 1 wird die Pivotstrategie unabhängig von der gewählten Einheit.

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ und $\|\cdot\|$ eine Vektornorm.

4.1.1 Äquilibration der Zeilen

Alle Zeilen von $D_z A$ haben die gleiche Norm, z.B. $\|\cdot\| = 1$, wofür

$$D_z = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_n \end{pmatrix} \quad \text{mit } \sigma_i := \frac{1}{\|(a_{i1}, \dots, a_{im})\|} \quad (4.1.1)$$

gesetzt wird.

4.1.2 Äquilibration der Spalten

Alle Spalten von $A D_s$ haben die gleiche Norm, z.B. $\|\cdot\| = 1$, wofür

$$D_s = \begin{pmatrix} \tau_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \tau_m \end{pmatrix} \quad \text{mit } \tau_j := \left\| \begin{pmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix} \right\|^{-1} \quad (4.1.2)$$

gesetzt wird.

Äquilibration von Zeilen **und** Spalten führt zu einem nichtlinearen Gleichungssystem und ist i.d.R. aufwendig.

4.1.3 Lemma

Sei A zeilenäquibriert bzgl. der l_1 -Norm, dann gilt:

$$\text{cond}_\infty(A) \leq \text{cond}_\infty(DA) \quad (4.1.3)$$

für alle regulären Diagonalmatrizen D .

Beweis. siehe Übungsaufgabe □

Wie in Kapitel 3 gesehen, kann die Näherungslösung \tilde{x} trotz Pivotisierung und Äquilibration noch sehr ungenau sein.

4.1.4 Nachiteration

Die Näherung \tilde{x} kann durch Nachiteration verbessert werden.
Falls \tilde{x} exakt ist, gilt:

$$r(\tilde{x}) := b - A\tilde{x} = 0 \quad (4.1.4)$$

ansonsten ist $A(x - \tilde{x}) = r(\tilde{x})$. Also löse die Korrekturgleichung

$$A\Delta x = r(\tilde{x}) \quad (4.1.5)$$

und setze

$$x^{(1)} := \tilde{x} + \Delta x$$

Wiederhole dies sooft, bis $x^{(i)}$ „genau genug“ ist. Die Lösung \tilde{x} wird durch Nachiteration meist mit sehr gutem Erfolg verbessert [genaueres in 7]

(4.1.5) wird mit der bereits vorhandenen LR-Zerlegung nur mit der neuen rechten Seite $r(\tilde{x})$ gelöst, d.h. eine vorwärts und eine Rückwärtssubstitution mit $\mathcal{O}(n^2)$ flops.

4.1.5 Bemerkung (nach Skeel 1980)

Die Gauß-Elimination mit Spaltenpivotsuche und einer Nachiteration ist komponentenweise stabil.

4.2 Cholesky-Verfahren

Im Folgenden sei A eine symmetrische, positiv definite Matrix in $\mathbb{R}^{n \times n}$, d.h. $A = A^T$ und $\langle x, Ax \rangle = x^T Ax > 0$ für alle $x \neq 0$.

(kurs: **spd Matrix**)

4.2.1 Satz (Eigenschaften von symm., pos. def. Matrizen)

Für jede spd Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt:

- i) A ist invertierbar
- ii) $a_{ii} > 0$ für $i = 1, \dots, n$
- iii) $\max_{ij} |a_{ij}| = \max_i a_{ii}$
- iv) Bei der Gauß-Elimination ohne Pivotsuche ist jede Restmatrix wieder eine spd Matrix.

Beweis. i) folgt aus (??)

ii) Sei e_i der i -te Einheitsvektor, so folgt $a_{ii} = e_i^T A e_i > 0$.

iii) siehe Übungsaufgabe

iv) Es gilt:

$$\begin{aligned}
 A^{(1)} &:= A = \begin{pmatrix} a_{11} & z^T \\ z & B^{(1)} \end{pmatrix} \\
 A^{(2)} &:= L_1 A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{z}{a_{11}} & & & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & z^T \\ 0 & B^{(2)} \\ \vdots & \\ 0 & \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow L_1 A^{(1)} L_1^T &= \begin{pmatrix} a_{11} & z^T \\ 0 & B^{(2)} \\ \vdots & \\ 0 & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -\frac{z}{a_{11}} \\ 0 & I \\ \vdots & \\ 0 & \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & B^{(2)} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Weiterhin gilt:

$$x \neq 0 \Leftrightarrow L_1 x \neq 0$$

da L_1 invertierbar. Also gilt insgesamt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{x}^T B^{(2)} \tilde{x} &= x^T L_1 A^{(1)} L_1^T x && \text{für } x := \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{x} \end{pmatrix} \\
 &= (L_1^T x)^T A (L_1^T x) > 0 && \forall \tilde{x} \neq 0
 \end{aligned}$$

und damit ist auch $B^{(2)}$ spd.

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

Induktiv folgt hiermit iv).

□ Insbesondere ergibt sich:

$$(L_{n-1} \cdots L_1) A^{(1)} (L_1^T \cdots L_{n-1}^T) = \begin{pmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_n \end{pmatrix},$$

wobei d_i das i -te Diagonalelement von $A^{(i)}$ ist und somit $d_i > 0$ für $i = 1, \dots, n$ gilt.

Sei $L := (L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1})$ wie in (2.1.8), so ergibt sich:

□

4.2.2 Folgerung

Für jede spd Matrix A existiert eine eindeutige Zerlegung der Form

$$A = LDL^T$$

wobei L eine reelle unipotente (d.h. $l_{ii} = 1$) (, normierte) untere Dreiecksmatrix und D eine positive Diagonalmatrix ist. Diese Zerlegung heißt **rationale Cholesky-Zerlegung**. Die Zerlegung

$$A = \bar{L} \bar{L}^T \quad (4.2.1)$$

mit der reellen unteren Dreiecksmatrix

$$\bar{L} = L \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{d_n} \end{pmatrix} = LD^{\frac{1}{2}}$$

heißt **Cholesky-Zerlegung**. .

Wegen (4.2.1) gilt:

$$a_{kk} = \bar{l}_{k1}^2 + \cdots + \bar{l}_{kk}^2 \quad (4.2.2)$$

$$a_{ik} = \bar{l}_{i1} \bar{l}_{k1} + \cdots + \bar{l}_{ik} \bar{l}_{kk} \quad (4.2.3)$$

$$IMAGE MISSING \quad (4.2.4)$$

Demnach funktioniert spaltenweises und zeilenweises Berechnen.

Es ergibt sich folgender Algorithmus:

4.2.3 Cholesky-Zerlegung

Der Algorithmus der Cholesky-Zerlegung ist wie folgt:

```

for  $k = 1, \dots, n$ 
|    $l_{kk} = (a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2)^{\frac{1}{2}}$ 
|   for  $i = k + 1, \dots, n$ 
|   |    $l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}l_{kj})/l_{kk}$ 
|   end
end

```

4.2.4 Rechenaufwand in flops

Es sind je

$\frac{1}{6}(n^2 - n)$ Additionen sowie Multiplikationen und

$\frac{1}{6}(3n^2 - 3n)$ Divisionen

also ca. $\frac{2}{3}n^2$ flops für große n notwendig.

Im Vergleich zur LR-Zerlegung halbiert sich in etwa der Aufwand.

4.2.5 Bemerkung

- a) Wegen (4.2.2) gilt $|\bar{l}_{kj}| \leq \sqrt{a_{kk}}$, d.h. die Matrizeneinträge können nicht zu groß werden.
- b) Für spd Matrizen ist der Cholesky-Algorithmus stabil nach (??)
- c) Da A symmetrisch ist, muss nur die untere Dreiecksmatrix gespeichert werden. In Algorithmen kann \bar{L} in eine Kopie dieser Dreiecksmatrix geschrieben werden.
- d) Fast singuläre Matrizen können durch die Diagonale erkannt werden.

10.11.2014

4.3 Lineare Ausgleichsprobleme

4.3.1 Beispiel

(s. Einführung)

Seien m Messungen (I_i, U_i) für die Stromstärke I und die Spannung U gegeben.

IMAGE MISSING

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

Das Ohmsche Gesetz liefert hierfür:

$$U = R \cdot I$$

Gesucht ist der zugehörige Widerstand R .

IMAGE MISSING

Wird jetzt davon ausgegangen dass die I_i exakt sind, wird das R gesucht, für das RI_i im Mittel den minimalen Abstand zu U_i hat. Genauer gesagt berechne

$$\min_{r \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^m (U_i - r I_i)^2$$

Vorsicht: Es wird **nicht** die Gerade (bzw. der lineare Untervektorraum) mit minimalem euklidischem Abstand zu (I_i, U_i) gesucht!

Dieses Problem ist nichtlinear und aufwendig zu lösen.

IMAGE MISSING

4.3.2 Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben seien Messdaten (t_i, b_i) mit $t_i, b_i \in \mathbb{R}$ für $i = 1, \dots, m$ und die Abhängigkeit $b(t)$ werde beschrieben durch eine Modellfunktion, welche linear von den unbekannten Parametern x_1, \dots, x_n des Modells abhängt, d.h.

$$b(t) = a_1(t)x_1 + \dots + a_n(t)x_n$$

Für exakte Messdaten b_i würde

$$b(t_i) = b_i \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}$$

gelten.

Im Allgemeinen werden jedoch $m \geq n$ Messwerte b_i bestimmt, und hiermit die n Parameter x_i so gewählt, dass die kleinsten **Fehlerquadrate auftreten**:

$$\min_{x_1, \dots, x_n} \sum_{i=1}^m (b_i - b(t_i))^2 \tag{4.3.1}$$

(Nach Gauß kann (4.3.1) auch aus der Maximum-Likelihood-Methode für einen stochastischen Ansatz hergeleitet werden.)

Definiere:

$$\begin{aligned} b &= (b_i)_{i=1,\dots,m} \in \mathbb{R}^m \\ x &= (x_j)_{j=1,\dots,n} \in \mathbb{R}^n \\ A &= (a_j(t_i))_{\substack{i=1,\dots,m \\ j=1,\dots,n}} \in \mathbb{R}^{m \times n} \end{aligned}$$

Damit ist (4.3.1) äquivalent zum **linearen Ausgleichsproblem**:

Zu gegebenem $b \in \mathbb{R}^m$ und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n$ ist das $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ gesucht mit

$$\|b - A\bar{x}\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2 \quad (4.3.2)$$

Das entspricht der „Lösung“ eines überbestimmten, i.A. nicht erfüllbaren GLS $Ax = b$. Aufgrund der l_2 -Norm ist \bar{x} gegeben durch die orthogonale Projektion von b auf den Bildraum $R(A)$, wie gleich gezeigt wird.

IMAGE MISSING

4.3.3 Projektionssatz

Sei V ein reeller Vektorraum mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ und der induzierten Norm $\|v\| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$. Sei $U \subset V$ ein endlich dimensionaler Untervektorraum und sei

$$U^\perp := \{v \in V \mid \langle v, u \rangle = 0 \quad \forall u \in U\}$$

Dann gilt:

- 1) Zu jedem $v \in V$ existiert genau ein $\bar{u} \in U$, so dass $v - \bar{u} \in U^\perp$, d.h.

$$\langle v - \bar{u}, u \rangle = 0 \quad \forall u \in U$$

Dies definiert die **orthogonale Projektion**

$$P : V \rightarrow U, \quad v \mapsto \bar{u} = Pv$$

- 2) Zu jedem $v \in V$ bestimmt $P \cdot v$ die eindeutige Lösung

$$\|v - Pv\| = \min_{u \in U} \|v - u\|$$

Also gilt mit einem eindeutigen $\bar{u} = Pv$, dass

$$\|v - \bar{u}\| = \min_{u \in U} \|v - u\| \iff \langle v - \bar{u}, u \rangle = 0 \quad \forall u \in U \quad (4.3.3)$$

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

Beweis. 1) Sei $\{u_1, \dots, u_n\}$ eine Orthonormalbasis von U und $\bar{u} \in U$.

Daraus folgt:

$$\exists! (\alpha_i)_{i=1, \dots, n} \in \mathbb{R} : \bar{u} = \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle v - \bar{u}, u \rangle & \forall u \in U \\ \iff 0 &= \langle v - \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i, u_j \rangle & \forall j = 1, \dots, n \\ \iff \langle v, u_j \rangle &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle u_i, u_j \rangle = \alpha_j \end{aligned}$$

Setze also

$$\begin{aligned} P \cdot v &= \bar{u} \\ &= \sum_{i=1}^n \langle v, u_i \rangle u_i \in U \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

dann ist \bar{u} die eindeutig bestimmte Lösung für $v - \bar{u} \in U^\perp$

IMAGE MISSING

Sei $u \in U$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \|v - u\|^2 &= \|v - \bar{u} + \bar{u} - u\|^2 \\ &= \|v - \bar{u}\|^2 + \underbrace{\langle v - \bar{u}, \overbrace{\bar{u} - u}^{\in U} \rangle}_{=0} + \|u - \bar{u}\|^2 \\ &= \|v - \bar{u}\|^2 + \|u - \bar{u}\|^2 \end{aligned} \tag{4.3.5}$$

(Dies ist anschaulich der Satz des Pythagoras.)

□

4.3.4 Satz

Der Vektor $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ ist genau dann Lösung des linearen Ausgleichsproblems

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2,$$

falls er die Normalengleichung

$$A^T A \bar{x} = A^T b \tag{4.3.6}$$

erfüllt.

Insbesondere ist \bar{x} eindeutig, falls $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ maximalen Rang $n \leq m$ hat.

Beweis. Bezeichne $V = \mathbb{R}^m$, $U = R(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$, $b \in \mathbb{R}^m$.
Nach (4.3.3) gilt:

$$\begin{aligned} \|b - A\bar{x}\|_2 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2 \\ \Leftrightarrow \langle b - A\bar{x}, Ax \rangle &= 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \\ \Leftrightarrow \langle A^T(b - A\bar{x}), x \rangle &= 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \\ \Leftrightarrow A^T(b - A\bar{x}) &= 0 \\ \Leftrightarrow A^T A\bar{x} &= A^T b \end{aligned}$$

Nach dem Projektionssatz 4.3.3 existiert mindestens ein eindeutiges $\bar{y} = Pb$. Für dieses \bar{y} ist $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $\bar{y} = A\bar{x}$ eindeutig bestimmt, falls A injektiv ist, d.h. falls $\text{rang}(A) = n$. \square

Ähnlich zum Skalarprodukt ist die relative Kondition von (P, b) schlecht, falls b fast senkrecht zu U steht. Die relative Kondition des linearen Ausgleichsproblems hängt zusätzlich von $\text{cond}(A)$ ab.

4.3.5 Lösung der Normalgleichung

Falls $\text{rang}(A) = n$, ist $A^T A$ spd und das Cholesky-Verfahren ist anwendbar. Dafür ist

1. $A^T A$ zu berechnen:

Aufwand ca. $\frac{1}{2}n^2m$ Multiplikationen

Kondition häufig schlecht, da $\frac{1}{2}n^2$ Skalarprodukte berechnet werden

2. die Cholesky-Zerlegung von $A^T A$ durchzuführen:

Aufwand ca. $\frac{1}{6}n^3$ Multiplikationen

Kondition Für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n$ und $\text{rang}(A) = n$ gilt:

$$\text{cond}_2(A^T A) = \text{cond}_2(A)^2 \quad (4.3.7)$$

(siehe Übungsaufgabe 19)

Also überwiegt für $m \gg n$ der Aufwand $A^T A$ zu berechnen. Die auftretenden Konditionen entsprechen i.d.R. nicht dem des Ausgangsproblems.

Damit ist die **Cholesky-Zerlegung für Normalgleichungen ungeeignet**.

4.3.6 Satz

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n$ und $\text{rang}(A) = n$, sei $b \in \mathbb{R}^m$ und besitze A eine Zerlegung

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und einer oberen Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
Dann ist R invertierbar.

Bezeichne

$$\begin{pmatrix} \bar{b}_1 \\ \bar{b}_2 \end{pmatrix} := Q^T \cdot b \quad (4.3.8)$$

dann ist

$$\bar{x} = R^{-1} \bar{b}_1 \quad (4.3.9)$$

die Lösung des linearen Ausgleichsproblems und

$$\begin{aligned} \|\bar{b}_2\| &= \|b - A\bar{x}\| \\ &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\| \end{aligned}$$

Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned} Q \text{ orthogonal} &: \Leftrightarrow QQ^T = I \\ &\Leftrightarrow Q^{-1} = Q^T \end{aligned}$$

Weiterhin ist Q längenerhaltend, d.h. $\|Qv\|_2 = \|v\|_2$ und somit folgt

$$\begin{aligned} \|Q\|_2 &= \|Q^{-1}\|_2 = 1 \quad \text{und} \\ \text{cond}_2(Q) &= 1 \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

Beweis. R ist invertierbar, da

$$\begin{aligned} \text{rang}(R) &= \text{rang}(Q^{-1} \cdot A) \\ &= \text{rang}(A) \\ &= n \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \|b - Ax\|_2^2 &= \left\| Q \left(Q^T b - \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} x \right) \right\|_2^2 \\ &= \left\| Q^T b - \begin{pmatrix} Rx \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &\stackrel{Q \text{ längenerhaltend}}{=} \|\bar{b}_1 - Rx\|_2^2 + \|\bar{b}_2\|_2^2 \end{aligned}$$

wird minimal für $R\bar{x} = \bar{b}_1$

□

Da Q längenerhaltend ist, folgt mit 3.2.13 b) ($\text{cond}_A := \frac{\max\|Ax\|}{\min\|Ax\|}$) sofort:

$$\text{cond}_2(A) = \text{cond}_2(R)$$

Die auftretende Kondition entspricht also der des Ausgleichsproblems.

4.3.7 Bemerkung

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und habe eine QR-Zerlegung, d.h. es existiert eine orthogonale Matrix Q und eine obere Dreiecksmatrix R , so dass:

$$A = Q \cdot R$$

Dann kann das Gleichungssystem $Ax = b$ wie folgt gelöst werden:

1. Setze $z = Q^T b$, was Kondition 1 hat.
2. Löse durch Rückwärtssubstitution $Rx = z$.

12.11.2014

4.4 Orthogonalisierungsverfahren

Konstruiere eine QR-Zerlegung

$$A = Q \cdot \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.4.1)$$

durch einen Eliminationsprozess:

$$A \rightarrow Q^{(1)} A \rightarrow Q^{(2)} Q^{(1)} A \rightarrow Q^{(p)} \dots Q^{(1)} A = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4.2)$$

mit orthogonalen Matrizen $Q^{(i)}$. Dann gilt

$$Q = Q^{(1)T} \dots Q^{(p)T} \quad (4.4.3)$$

Dies ist im Gegensatz zur LR -Zerlegung aufgrund von $\text{cond}(Q^{(i)}) = 1$ immer stabil.

Für $Q \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ gibt es zwei mögliche Anschauungen, nämlich:

- a) Drehung IMAGE MISSING
- b) Spiegelung IMAGE MISSING

4.4a) Givens-Rotation

Es wird eine Drehung auf den 1. Einheitsvektor durchgeführt:

IMAGE MISSING

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha e_1$$

d.h. Elimination von a_2 mit

$$\|\alpha e_1\|_2 = \|a\|_2$$

Also gilt für α

$$\alpha = \pm \|a\|_2$$

Drehungen werden beschrieben durch

$$Q = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \quad \theta \in [0, 2\pi)$$

und es muss gelten

$$Qa = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$$

Hiermit folgt für $\|a\| = 0$

$$\begin{aligned} c &= 1, s = 0 \\ c &= \frac{a_1}{\alpha}, s = \frac{a_2}{\alpha} \quad \text{mit} \\ \alpha &= \pm \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \end{aligned} \tag{4.4.4}$$

für $\|a\| \neq 0$.

Im Folgenden wird dies kurz mit

$$[c, s] = \text{givens}(a_1, a_2)$$

bezeichnet.

Als **Givens-Rotation** wird eine Matrix der Form

$$\Omega_{k,l} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \mathbf{c} & & \mathbf{s} & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \\ & & & -\mathbf{s} & & \mathbf{c} & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow k\text{-te Zeile} \\ \\ \\ \leftarrow l\text{-te Zeile} \end{array} \quad (4.4.5)$$

mit $c^2 + s^2 = 1$ und $k < l$ bezeichnet.

Es folgt:

$$\begin{aligned} \Omega_{kl}A &= \tilde{A} \quad \text{mit} \\ \tilde{a}_{ij} &= a_{ij} \quad \text{für } i \neq k, l \\ \tilde{a}_{kj} &= ca_{kj} + sa_{lj} \\ \tilde{a}_{lj} &= -sa_{kj} + ca_{lj} \end{aligned}$$

Demnach werden nur die k -te und l -te Zeile verändert.

Falls nun $[c, s] = \text{givens}(x_k, x_l)$ gilt

$$\Omega_{k,l} \cdot x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ \alpha \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_{l-1} \\ 0 \\ x_{l+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \text{mit } \alpha = \pm \left\| \begin{pmatrix} x_k \\ x_l \end{pmatrix} \right\|_2$$

d.h. eine Givens-Rotation erzeugt eine Null.

Da nun

$$\mathbb{R}^{m \times n} \ni \begin{pmatrix} * & * & * & \dots \\ 0 & * & & \\ 0 & 0 & \ddots & \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

gilt, sind

$$p = \sum_{j=1}^n (m - j)$$

Givens-Rotationen nötig, um eine QR-Zerlegung nach (4.4.1) zu erzeugen. Und eine Rotation, welche a_{ij} auf 0 setzt, ist durch zugehörige (c_{ij}, s_{ij}) gegeben.

Für eine 3x4-Matrix sieht das Verfahren folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}
 A = \begin{pmatrix} * & & \\ * & & * \\ * \swarrow & & \\ * \swarrow & & \end{pmatrix} &\xrightarrow{\Omega_{3,4}} \begin{pmatrix} * & & \\ * \swarrow & & * \\ * \swarrow & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \xrightarrow{\Omega_{1,2}} \begin{pmatrix} * \swarrow & & \\ * \swarrow & & * \\ 0 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \\
 \xrightarrow{\Omega_{2,3}} \begin{pmatrix} * & & \\ 0 & & * \\ 0 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \xrightarrow{\Omega_{3,4}} \begin{pmatrix} * & * & \\ 0 & * \swarrow & * \\ 0 & * \swarrow & \\ 0 & 0 & \end{pmatrix} \xrightarrow{\Omega_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \swarrow \\ 0 & 0 & * \swarrow \end{pmatrix} \\
 \xrightarrow{\Omega_{3,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Es ergibt sich:

4.4.1 Givens-QR-Algorithmus

```

for  $j = 1, \dots, n$ 
|   for  $i = m, m-1, \dots, j+1$ 
|   |   % setze  $a_{ij}$  auf 0
|   |    $[c, s] = \text{givens}(a_{i-1,j}, \dots, a_{ij})$ 
|   |   speichere  $c$  und  $s$  für  $a_{ij}$ 
|   |    $A(i-1:j, j:h) = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} * A(i-1:j, j:n)$ 
|   end
end

```

4.4.2 s. Folien**4.4.3 Aufwand des Givens-QR-Algorithmus**

- a) $m \approx n$
 → ca. $\frac{4}{3}n^3$ Multiplikationen und $\frac{1}{2}n^2$ Quadratwurzeln nötig
 Die Givens-QR-Zerlegung ist somit ungefähr viermal so aufwändig wie die Gauß-Elimination, dafür jedoch stabil.
- b) $m \gg n$
 → ca. $2n^2m$ Multiplikationen und mn Quadratwurzeln nötig
 Das Verfahren ist daher zwei- bis viermal so aufwändig wie das Cholesky-Verfahren für die Normalgleichungen, aber stabil.
- c) Bei Hessenberg-Matrizen, d.h. Matrizen mit der Gestalt

$$A = \begin{pmatrix} * & \dots & * \\ * & * & \\ & \ddots & \ddots \\ 0 & & * \end{pmatrix}, \quad (4.4.6)$$

also $a_{ik} = 0 \forall i < k + 1$, sind nur $(n - 1)$ Givens-Rotationen auszuführen.
 Diese Matrizen tauchen z.B. bei Eigenwertberechnungen auf und sind dort ein wichtiger Bestandteil der Verfahren.

4.4b) Householder-Reflexion

Es sei H eine Hyperebene im \mathbb{R}^m und zusätzlich ein Vektor $a \in \mathbb{R}^m$ gegeben.

IMAGE MISSING

Gesucht ist nun die Reflexion Q , so dass

$$Qa = \alpha e_1 = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } \alpha = \pm \|a\|$$

Mit

$$v = a - \alpha e_1 \quad (4.4.7)$$

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

gegeben, welches senkrecht zu H steht.

Damit Stellenauslöschungen in v , d.h. in v_1 , vermieden werden, wähle ein entsprechendes Vorzeichen für α , also

$$\alpha = -\text{sign}(a_1) \|a\|_2 \quad (4.4.8)$$

Die zugehörige Reflexion Q ist gegeben durch

IMAGE MISSING

wobei

$$w = \left\langle \frac{v}{\|v\|}, x \right\rangle \cdot \frac{v}{\|v\|}$$
$$Qx = x - 2w = x - 2 \frac{v^T x}{v^T v} v = \left(I - 2 \frac{vv^T}{v^T v} \right) x \quad (4.4.9)$$

$$Q = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v} \quad vv^T \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad v^T v \in \mathbb{R} \quad (4.4.10)$$

und heißt **Householder Reflexion** (wurde 1958 von Householder eingeführt).

Für die spezielle Wahl (4.4.7) mit (4.4.8) vom Vektor v folgt

$$\begin{aligned} vv^T &= \|v\|^2 = \|a\|^2 - 2\alpha \langle a, e_1 \rangle + \alpha^2 \\ &= -2\alpha(a_1 - \alpha) \\ &= -2\alpha v \end{aligned} \quad (4.4.11)$$

4.4.4 Bemerkung

a) Q ist symmetrisch

b) Q ist orthogonal

c) Q ist involutorisch, d.h. $Q^2 = I$ (bzw. gilt $Q^{-1} = Q^T = Q$)

Die Householder Reflexion setzt nicht nur eine Null, sondern im Vektor gleich alle gewünschten Nullen

$$\begin{array}{ll} \textbf{Rotation:} & \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} * \\ * \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \textbf{Reflexion:} & \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

Um die erste Spalte in A auf die gewünschte Gestalt zu bringen, bestimme $Q^{(1)}$ wie oben, indem die erste Spalte als a gewählt wird:

$$A \rightarrow A^{(1)} = Q^{(1)} A = \begin{pmatrix} \alpha^{(1)} & & \\ 0 & * & \\ \vdots & & \\ 0 & & \end{pmatrix}$$

In der k -ten Spalte sollen nun die $(k-1)$ -ten Zeilen und die $(k-1)$ -ten Spalten bleiben und die Restmatrix verändert werden.

$$A^{(k-1)} = \begin{pmatrix} * & & & & \\ & \ddots & & & * \\ & & * & - & - & - \\ 0 & \vdots & | & T^{(k-1)} & & \\ & \vdots & | & & & \\ 0 & \vdots & | & & & \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow (k-1)\text{-te Zeile} \\ \\ \\ \uparrow (k-1)\text{-te Spalte} \end{matrix}$$

Setze also

$$Q^{(k)} = \begin{pmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \overline{Q}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (4.4.12)$$

wobei $\overline{Q}^{(k)}$ durch die erste Spalte von $T^{(k)}$, d.h.

$$a = (a_{i,k}^{k-1})_{i=k,\dots,m} \subset \mathbb{R}^{m+1-k} \quad (4.4.13)$$

bestimmt wird. Dann gilt

$$Q^{(k)} A^{(k-1)} = \begin{pmatrix} * & & & & \\ & \ddots & & & * \\ & & * & - & - & - \\ & 0 & | & * & & \\ 0 & \vdots & | & 0 & * & \\ & \vdots & | & \vdots & & \ddots \\ & 0 & | & 0 & & & * \end{pmatrix}$$

Nach insgesamt

$$p = \min(m-1, n) \quad (4.4.14)$$

4 Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)

Schritten erhalten wir für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$Q^T A = Q^{(p)} \cdot \dots \cdot Q^{(1)} A = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4.15)$$

wobei Bemerkung 4.4.4 auch für $Q^T = Q^{(p)} \cdot \dots \cdot Q^{(1)}$ und somit auch für

$$Q = Q^{(1)} \cdot \dots \cdot Q^{(p)} \quad (4.4.16)$$

gilt.

Index

- Äquilibration
 - Spalten-, 41
 - Zeilen-, 41
- Algorithmus, 36
- Ausgleichsproblem
 - linear, 45, 46
- Basis, 18
- Bildraum, 47
- Cholesky-Zerlegung, 44, 45, 49
- double, 18
- Dreieckszerlegung, 5, 8
- elementar ausführbar, 36
- entkoppelt, 22
- Fehler, 17, 22
 - absoluter, 22
 - absoluter Rundungsfehler, 20
 - Fortpflanzung, 37
 - relativer, 22
- floating point, 17, 18
- floating point operations, 9
- flops, 9
- Frobeniusmatrix, 10
- Güte
 - Algorithmus, 39
- Gauß-Eliminator, 9
- Gaußsches Eliminationsverfahren, 5, 10
- Genauigkeit
 - Maschinengenauigkeit, 20
 - relative Rechengenauigkeit, 20
- Gleitkommazahl, 18
- Implementation, 36
- integer, 17
- Kondition
 - Addition, 25
 - gut/schlecht konditioniert, 25
 - komponentenweise, 32
 - Matrix, 29
 - normweise, absolut, 24
 - normweise. relativ, 25
- längenerhaltend, 50
- Landau-Symbole, 10
- LR-Zerlegung, 10, 11
- LU-Zerlegung, 11
- Mantisse, 18
- Maximum-Likelihood-Methode, 46
- Nachiteration, 42
- Neumannsche Reihe, 29
- Norm, 23
 - Euklidische Norm, 23
 - Frobeniusnorm, 23
 - Hölder-Norm, 23
 - Matrixnorm, 23
 - Maximumsnorm, 23
 - Spaltensummennorm, 24
 - submultiplikative, 24
 - Summennorm, 23
 - verträglich, 23
- normalisierte Gleitkommazahl, 18
- normweise Kondition, 24
- orthogonale Projektion, 47
- p-Norm, 23

Index

Permutationsmatrix, 12
Pivotelement, 8
Pivotisierung, 11
 halbmaximale, 11
 partielle, 11
 Spalten-, 11
 vollständige, 12
 Zeilen-, 12
Problem, 22
Projektionssatz, 47

Rückwärtsanalyse, 39
Rückwärtssubstitution, 7
Realisierung, 36
Rechenaufwand, 9, 10
Rundungsfehler, 17

scharf, 27
Singulärwert, 24
Skalierung
 Spalten-, 41
 Zeilen-, 41
spd Matrix, 42
Stabilität, 39

unipotent, 44

Verfahren von Crout, 11
Vorwärtselimination, 5, 14
Vorwärtssubstitution, 5, 7, 9

Zahlendarstellung, 17
Zeilensummennorm, 24

Literatur

- [1] P. Deuffhard und A. Hohmann. Numerische Mathematik. I, Eine algorithmisch orientierte Einführung. 3. Aufl. de Gruyter, 2002.
- [2] von G. Golub und J.M. Ortega. Scientific Computing.
- [3] K.H. Hoffmann G. Haemmerlin. Numerische Mathematik. Springer Berlin.
- [4] W.H. Press u. a. Numerical Recipes in C++. Cambridge University Press.
- [5] R.W. Hoppe R.W. Freund. Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1. Springer.
- [6] J. Stoer und R. Bulirsch. Numerische Mathematik 2. Springer.
- [7] W.Dahmen und A. Reusken. Numerik fuer Ingenieure und Naturwissenschaftler. Springer.