

Vorlesungsmitschriften

Wintersemester 20/21

Universität Bonn *

Semester 1

Fabian

10. März 2022

Online aufrufbar auf

<https://github.com/git-fabus/lecutres/blob/main/notes.pdf>.

Veränderungsvorschläge und Verbesserungen bitte an git-fabus@uni-bonn.de.

Vorwort

Dies sind meine persönlichen Vorlesungsmitschriften. Das Dokument ist in 3 große Teilbereiche unterteilt, dazu zählen:

- Algorithmische Mathematik 1
- Analysis 1
- Lineare Algebra 1

Das Dokument wird stetig verbessert und es werden nach und nach immer mehr Aufgaben, Lösungen etc. erscheinen.

Inhaltsverzeichnis

I. Analysis 1	1
Grundlagen	2
1. Aussagenlogik	2
2. Prädikatenlogik	3
3. Mengenlehre	4
4. Vollständige Induktion	4
5. Binominal-Koeffizienten	7
Körper der reellen Zahlen	10
6. Körperaxiome	10
II. Algorithmische Mathematik 1	12
Einführung	13
Zahlendarstellung am Computer	14
1. Zahlensystem	14
2. Vorzeichen-Betrag-Darstellung	16
3. Komplementdarstellung	17
4. Fest-Komma-Darstellung	21
5. Gleitkommadarstellung	22
Fehleranalyse	25
6. Rechnerarithmetik	25
7. Vorwärts- und Rückwärtsanalyse	28
8. Kondition und Stabilität	29
Dreitermrekursion	32
9. Theoretische Grundlagen	32
10. Miller-Algorithmus	36
Sortieren	38
11. Das Sortierproblem	38
12. Mergesort	40
13. Quicksort	42
14. Untere Schranke für das Sortierproblem	44

Graphen	47
15. Grundlagen	47
16. Zusammenhang	49
17. Zyklische Graphen	51
18. Bäume	53
19. Implementierung von Graphen	55
Algorithmen auf Graphen	56
20. Graphendurchmusterung	56
21. Starker Zusammenhang	59
22. Kürzeste Wege Probleme	62
23. Netzwerkflussprobleme	71
Numerische Lösung linearer Gleichungssysteme	80
24. Vektoren- und Matrixnormen	80
25. Kondition linearer Gleichungssysteme	84
26. LR-Zerlegung	85
27. LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung	88
28. Cholesky-Zerlegung	91
Graphenbasierte Löser	94
29. Cholesky-Zerlegung und Graphen	96
30. Nested Dissection	97
31. Generalized nested dissection	97

Teil I

Analysis 1

Grundlagen

1. Aussagenlogik

1.1 Definition (Aussage). Eine *Aussage* ist eine Behauptung, die eindeutig feststeht, so ist diese entweder *wahr* oder *falsch*

1.2 Definition. Falls A und B Aussagen gilt: Die Wahrheitstafeln dazu sehen wie folgt

Symbol	Gesprochen
$\neg A$	"nicht A"
$A \vee B$	"A oder B"
$A \wedge B$	"A und B"
$A \implies B$	"aus A folgt B", "A impliziert B"
$A \iff B$	"A ist äquivalent zu B", "A genau dann wenn B"

aus:

A	B	$\neg A$	$A \vee B$	$A \wedge B$	$A \implies B$	$A \iff B$
w	w	f	w	w	w	w
w	f	f	w	f	f	f
f	w	w	w	f	w	f
f	f	w	f	f	w	w

1.1. Gesetze der Aussagenlogik

$$\begin{aligned}
 (A \implies B) &\iff (\neg B \implies \neg A) \\
 (A \implies B) &\iff (\neg A \vee B) \\
 (A \iff B) &\iff (\neg A \iff \neg B) \\
 (A \wedge (A \implies B)) &\implies B \\
 ((A \implies B) \wedge (\neg B)) &\implies \neg A \\
 ((A \implies B) \wedge (B \implies C)) &\implies (A \implies C) \\
 (A) &\implies (A \vee B) \\
 (\neg A) &\implies (A \implies B)
 \end{aligned}$$

Wir können diese Gesetze durch Wahrheitstafeln beweisen. Das wichtigste Gesetz ist die Kontraposition

1.3 Satz (Kontraposition). Falls A und B Aussagen gilt:

$$(A \implies B) \iff (\neg B \implies \neg A)$$

1.4 Bemerkung. Der Satz 1.3 wird oft benutzt um etwas zu beweisen.

Noch ein kurzer Beweis zu

$$(A \implies B) \iff (\neg A \vee B)$$

Beweis. Durch eine Wahrheitstafel. □

A	B	$A \implies B$	$\neg A \vee B$
w	w	w	w
w	f	f	f
f	w	w	w
f	f	w	w

2. Prädikatenlogik

Aussagen, die von freien Variablen abhängen.

2.5 Beispiel. Zwei Aussagenformen

- Es gibt eine reelle Zahl x mit $x^2 + 1 = 0$
- Für alle natürlichen Zahlen x gilt: $x^2 - 1 = (x - 1)(x + 1)$

2.6 Notation (Quantoren). Wir verwenden die Kurzformen

- \exists für "es gibt ein"
- \forall für "für alle"

Regeln:

$$\begin{aligned} \neg(\forall x : A(x)) &\iff (\exists x : \neg A(x)) \\ \neg(\exists x : A(x)) &\iff (\forall x : \neg A(x)) \\ \neg(\forall x \forall y : A(x, y)) &\iff (\forall x \exists y : \neg A(x, y)) \end{aligned}$$

2.7 Warnung. Es gilt nicht:

$$\forall x \in M : A(x) \implies \exists x \in M : A(x)$$

Da M z.B eine leere Menge sein kann.

3. Mengenlehre

3.8 Definition (Menge nach Cantor). Eine Menge ist die Zusammenfassung bestimmter wohlunterschiedener Objekte, welche die Elemente der Menge genannt werden, unserer Anschauung oder unseres Denkens zu einem Ganzen.

3.9 Beispiel. Die typischen Zahlenmengen kennt man bereits:

- Menge der natürlichen Zahlen \mathbb{N}
- Menge der rationalen Zahlen \mathbb{Q}
- Menge der reellen Zahlen \mathbb{R}

3.10 Notation. Wir bezeichnen:

Symbole	Gesprochen
$x \in M$	x Element der Menge M
$M \subset N$	M Teilmenge von N
$M \subseteq N$	M strikte Teilmenge von N
$\emptyset = \{\}$	leere Menge
$M \cap N$	Schnittmenge von M und N
$M \cup N$	Vereinigung von M und N
$M \setminus N$	M ohne N
N^c	Komplement der Menge
$M \cap N = \{\}$	\implies M und N sind disjunkt

3.11 Bemerkung (Grenzen der naiven Mengenlehre). Nicht erlaubt ist die Konstruktion der Menge aller Mengen, die sich selbst als Element enthalten.

4. Vollständige Induktion

Das Beweisprinzip der vollständigen Induktion ist:

$\forall_{n \in \mathbb{N}} : A(n)$ falls

1. Induktionsanfang (IA, IV) : $A(1)$ gilt

2. Induktionsschritt (IS) : $\forall_{n \in \mathbb{N}} : \text{falls } A(n) \text{ gilt, dann auch } A(n+1)$

4.12 Satz. $\forall_{n \in \mathbb{N}} : 1 + 2 + 3 + \dots + n = \frac{n(n+1)}{2}$

Beweis. per Induktion.

◇ IA $n = 1$

$$1 = \frac{1 \cdot 2}{2}$$

◇ IS $n \rightarrow n + 1$ Angenommen $A(n)$ ist wahr, dann muss

$$1 + 2 + \dots + n + n + 1 = \frac{(n+1) \cdot (n+2)}{2}$$

gelten.

$$1 + 2 + \dots + n + n + 1 = \frac{n(n+1)}{2} + n + 1$$

nach Induktionsannahme. Dies ist nichts anderes als:

$$\frac{(n+1)n}{2} + (n+1) = \frac{(n+1) \cdot (n+2)}{2}$$

□

Um nicht immer $1 + 2 + \dots + n$ zu schreiben, verwenden wir ab sofort das Summenzeichen.

4.13 Notation. Für ganze Zahlen m, n und $a_k \in \mathbb{R}$ ist

$$\sum_{k=m}^n a_k = a_m + a_{m+1} + \dots + a_n$$

$$\sum_{k=m}^{m-1} a_k = 0$$

4.14 Beispiel. Der Satz 4.12 lässt sich wie folgt schreiben:

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

4.15 Satz. Für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt:

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

Beweis. per Induktion:

◇ IA $n = 1$

$$1 = 1^2$$

◇ IS $n \rightarrow n + 1$ $A(n)$ gilt, dann muss auch

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

gelten.

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

Damit gilt die Behauptung

□

4.16 Satz (Geometrische Summenformel). Für alle $x \in \mathbb{R} \setminus \{1\}$ und für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\sum_{k=1}^n x^k = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$$

Hierbei gilt $x^0 = 1$ auch für $x = 0$.

Beweis. per Induktion.

◇ IA $n = 1$

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

◇ IS $n \rightarrow n + 1$ Angenommen $A(n)$ gilt.

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n x^k + x^{n+1} &= \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x} + x^{n+1} \\ &= \frac{1 - x^{n+2}}{1 - x} \end{aligned}$$

□

4.17 Bemerkung. Statt den Anfang bei $n = 1$ kann der Induktionsbeweis auch bei jeder Zahl $n_0 \in \mathbb{Z}$ starten und dann die Aussagen für alle $n \in \mathbb{Z}, n \geq n_0$ liefern.

Analog zu dem Summenzeichen gibt es auch ein Produktzeichen:

4.18 Notation (Produktzeichen). Für $m, n \in \mathbb{N}, a_k \in \mathbb{R}, m \leq n$ gilt:

$$\begin{aligned} \prod_{k=m}^n a_k &= a_m \cdot a_{m+1} \cdot \dots \cdot a_n \\ \prod_{k=m}^{m-1} a_k &= 1 \end{aligned}$$

Rekursiv $\forall_{k \geq m}$:

$$\prod_{k=m}^n a_k = a_n \cdot \prod_{k=m}^{n-1} a_k$$

4.19 Definition (Fakultät). Die Fakultät ist definiert als:

$$n! = \prod_{k=1}^n k = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n$$

Beweis. durch Induktion:

◇ IA $n = 1$:

$$(x + y)^1 = x + y$$

◇ IS $n \rightarrow +1$:

$$\begin{aligned} (x + y)^{n+1} &= (x + y)^n \cdot (x + y) \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{n+1-k} y^k + \sum_{k=0}^n x^{n-k} y^{k+1} \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{n+1-k} y^k + \sum_{k=1}^{n+1} \binom{n}{k-1} x^{n+1-k} y^k \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \left(\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} \right) x^{n+1-k} y^k \end{aligned}$$

□

5.24 Korollar. Es folgt direkt:

- $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} = 2^n$
- $\sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} = 0$

5.25 Satz. Die Anzahl der Anordnungen von n verschiedenen Elementen ist $n!$.

Beweis. per Induktion:

◇ IA $n + 1$ a_1 , also eine Anordnung

◇ IS $n \rightarrow n + 1$ Sei $N(n)$ die Anzahl der Anordnungen von n Elementen.

Annahme: $N(n) = n!$

Gegeben sei $n + 1$ Elemente $\implies n + 1$ Möglichkeiten für den ersten Platz. Jede dieser Möglichkeiten erlaubt $N(n) = n!$ Möglichkeiten zu Anfang. Daraus folgt es gibt insgesamt $n!(n + 1) = (n + 1)!$ Optionen.

□

5.26 Satz. Die Anzahl der k -elementigen Teilmengen einer n -elementigen Menge ist $\binom{n}{k}$.

Beweis. per Induktion nach n .

◇ IA $n = 0$

$$\binom{0}{0} = 1$$

◇ IS $n \rightarrow n + 1$ Sei $M = \{a_1, \dots, a_{n+1}\}$ Für $0 \leq k \leq n + 1$ gilt:
 k -elementigen Teilmengen zerfallen in 2 Klassen:

- Teilmengen mit a_{n+1}
- Teilmengen ohne a_{n+1}

Für ersten gilt: Mengen $\{a_{n+1}\} \cup M_k$ mit beliebiger k -elementiger Teilmenge von $\{a_1, \dots, a_n\} \implies \exists \binom{n}{k-1}$ Teilmengen.

Für zweitens gilt: beliebige k -elementige Teilmengen von $\{a_1, \dots, a_n\} \implies \binom{n}{k}$ Teilmengen.

Also insgesamt:

$$\binom{n}{k-1} + \binom{n}{k} = \binom{n+1}{k}$$

Teilmengen. Damit ist $A(n+1)$ bewiesen.

□

5.27 Definition. Für eine Menge M ist die Potenzmenge $\mathfrak{P}(M)$ die Menge aller Teilmengen von M .

5.28 Beispiel. Für $M = \{a_1, a_2\}$ ist die Potenzmenge von M $\mathfrak{P}(M) = \{\emptyset, \{a_1\}, \{a_2\}, \{a_1, a_2\}\}$.

5.29 Satz. Die Potenzmenge $\mathfrak{P}(M)$ einer n -elementigen Menge M hat 2^n Elemente

Beweis. Es gibt $\binom{n}{k}$ Teilmengen mit k -Elementen. Also insgesamt:

$$\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} = 2^n$$

Teilmengen.

□

Körper der reellen Zahlen

\mathbb{R} ist Körper, angeordnet, archimedisch, vollständig.

6. Körperaxiome

6.1 Definition (\mathbb{R}). \mathbb{R} ist eine Menge, auf der zwei Verknüpfungen definiert sind:

$$+ : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\cdot : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

Dabei wird jedem Paar (x, y) mit $x, y \in \mathbb{R}$ ein Element $x + y \in \mathbb{R}$ (bzw. $x \cdot y \in \mathbb{R}$) zugeordnet.

6.2 Bemerkung. Die zwei Verknüpfungen sind die zwei Grundrechenarten "plus" und "mal". Jedoch müssen wir die typischen Rechenregeln, die wir bereits kennen, erst anhand der Körperaxiome zeigen.

6.3 Definition (Körper). \mathbb{K} ist ein Körper falls folgende Axiome gelten: Es sei $a, b, c \in \mathbb{K}$. Für die Addition:

$$A1 \quad \forall_{a,b,c} : a + (b + c) = (a + b) + c$$

$$A2 \quad \forall_{a,b} : a + b = b + a$$

$$A3 \quad \exists_{0 \in \mathbb{K}} : a + 0 = a$$

$$A4 \quad \forall_a \exists_{-a \in \mathbb{K}} : a + (-a) = 0$$

Analog weiter für die Multiplikation:

$$M1 \quad \forall_{a,b,c} : (a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$$

$$M2 \quad \forall_{a,b} : a \cdot b = b \cdot a$$

$$M3 \quad \exists_{1 \in \mathbb{K}} \forall_a : 1 \neq 0 \wedge 1 \cdot a = a$$

$$M4 \quad \forall_{a \neq 0} \exists_{a^{-1} \in \mathbb{K}} : a \cdot a^{-1} = 1$$

Außerdem gilt das Distributivgesetz:

$$D \quad \forall_{a,b,c} : (a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c$$

6.4 Notation. Vereinfachend schreiben wir auch:

- $a \cdot b = ab$
- $a^{-1} = \frac{1}{a}$
- $a \cdot b^{-1} = \frac{a}{b}$

Rechenregeln für Körper

6.5 Bemerkung. Die Eigenschaften A1-A4 besagen außerdem, dass $(\mathbb{R}, +)$ eine Gruppe ist.

a) Eindeutigkeit der 0

Beweis. $0^* = 0^* + 0 = 0 + 0^* = 0$ □

b) Das Negativ $-x$ ist eindeutig.

Beweis. Seien x'', x' für $(x' + x = 0) \wedge (x + x'' = 0)$ gilt.
 $\implies x' = x' + 0 = x' + x(-x) = x'' + x + (-x) = x''$ □

c) $-0 = 0$

Beweis. $0 = 0 + (-0) = (-0) + 0 = -0$ □

d) $\forall x : -(-x) = x$

Beweis. $0 = x + (-x) = (-x) + x$ und Eindeutigkeit des Negativen folgt: $x = -(-x)$ □

e) $\forall a, b, c \in \mathbb{R} : a + b = c \iff a = c - b$

f) $\forall a, b \in \mathbb{R} : -(a + b) = (-a) + (-b)$

6.6 Bemerkung. Die Eigenschaften M1-M4 besagen, dass $\mathbb{R} \setminus \{0\}, \cdot$ auch eine Gruppe ist. Demnach gelten die Eigenschaften a-f eigentlich fast Analog für die Multiplikation.

Wegen der Distributivität folgt außerdem:

g) $\forall a, b, c \in \mathbb{R} : (a + b) \cdot c = c \cdot a + c \cdot b$

h) $\forall a \in \mathbb{R} : x \cdot 0 = 0$

Beweis. $x \cdot 0 = x \cdot 0 + x \cdot 0 = x \cdot (0 + 0) = x \cdot 0$ □

i) $\forall a, b \in \mathbb{R} : a \cdot b = 0 \iff (x = 0) \vee (y = 0)$

Beweis. Hinrichtung folgt aus h.

Annahme: $xy = 0$ und $x \neq 0$. Zu zeigen: $y = 0$

Mit $y = 0 \cdot x^{-1}$ und h folgt: $y = 0$ □

Teil II

Algorithmische Mathematik 1

Einführung

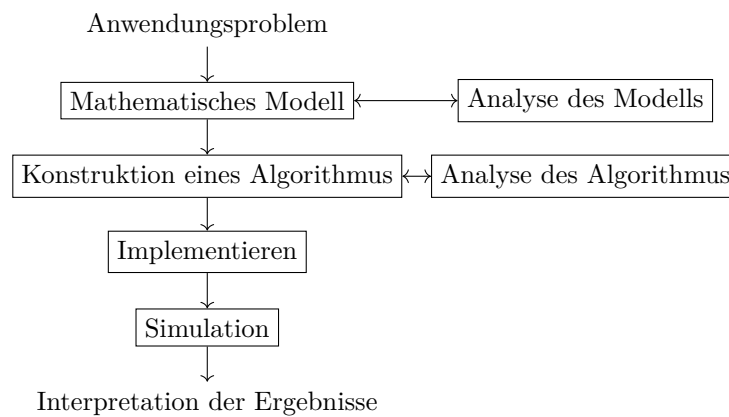
Algorithmische Mathematik -Was ist das?

Gegenstand der Alma ist die Konstruktion und Analyse effizienter Algorithmen zur Lösung mathematischer Problemstellungen mit Hilfe des Computers.

Damit liegt sie im Bereich der Angewandten Mathematik. Konkrete Problemstellungen ergeben sich oft aus technischen Problemen, Naturwissenschaften, Medizin etc.

Man kann hierbei annehmen, dass verschiedene Problemstellungen aus der Anwendungen oft zu ähnlichen oder gleichen mathematischen Modellen zurückgeführt werden können.

Diese Probleme können wie folgt aussehen:



0.1 Beispiel. Ein typisches Problem ist das Lösen eines linearen Gleichungssystems.

Im Rahmen dieser Vorlesung konzentrieren wir uns auf die Teilbereiche

- a) Numerik
- b) Diskrete Mathematik
- c) Statistik

der Angewandten Mathematik

Zahlendarstellung am Computer

1. Zahlensystem

Die Darstellung von Zahlen basiert auf sogenannten *Zahlensystemen*. Diese Zahlensysteme unterscheiden sich in der Wahl des zugrundeliegenden Alphabets. Unsere Zahl entspricht dann einem Wort, bestehend aus Elementen des Alphabets.

1.1 Definition (Alphabet). Es sei $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ und $b \in \mathbb{N}$. Wir bezeichnen mit \sum_b das Alphabet des *b-adischen Zahlensystems*

1.2 Beispiel. Verschiedene Zahlensysteme

- a) Dezimalsystem: $\sum_{10} = \{0, 1, \dots, 9\}$
wie $(384)_{10}$
- b) Dual bzw. Binärsystem $\sum_2 = \{0, 1\}$
wie $(42)_{10} = (101010)_2$
- c) Oktalsystem $\sum_8 = \{0, \dots, 7\}$
wie $(42)_{10} = (52)_8$
- d) Hexadezimalsystem $\sum_{16} = \{0, \dots, 9, A, B, \dots, F\}$
wie $(42)_{10} = (2A)_{16}$

Um die Zahlendarstellung sinnvoll zu nutzen ergibt sich folgendes:

1.3 Satz. Seien $b, n \in \mathbb{N}, b > 1$.

Dann ist jede ganze, nicht-negative Zahl z mit $0 \leq z \leq b^n - 1$ *eindeutig* als Wort der Länge n über \sum_b darstellbar durch:

$$z = \sum_{i=0}^{n-1} z_i b^i$$

mit $z_i \in \sum_b$ für alle $i = 0, 1, \dots, n-1$.

Wir schreiben vereinfachend:

$$z = (z_{n-1}, \dots, z_0)_b$$

Beweis. • Induktion

◇ *Induktionsanfang:* $z < b$ hat die eindeutige Darstellung $z_0 = z$ und $z_i = 0$ sonst.

◇ *Induktionsschritt:* $z - 1 \rightarrow z \geq b$

Betrachte

$$z = \left\lfloor \frac{z}{b} \right\rfloor \cdot b + (z \bmod b)$$

Da $\hat{z} < z$ besitzt die eindeutige Darstellung

$$\hat{z} = (z_{n-1}, \dots, \hat{z}_0)_b$$

Bemerke $z_{n-1} = 0$, da

$$(z_{n-1}b^{n-1})b \leq z \leq b^n - 1$$

Also ist z_b eine n-stellige Darstellung von z in b-adischen Zahlensystem

- Eindeutigkeit wird durch Widerspruch gezeigt.
Angenommen: Es gibt zwei verschiedene Darstellungen

$$z = (z_{n-1}^{(2)}, \dots, z_0^{(2)})_b = (z_{n-1}^{(1)}, \dots, z_0^{(1)})_b$$

Sei $m \in \mathbb{N}$ der größte Index mit $z_m^{(1)} \neq z_m^{(2)}$,

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann gesagt werden $z_m^{(1)} > z_m^{(2)}$.

Dann müssten die Stellen $0, 1, \dots, m-1$ den niedrigeren Wert von $z_m^{(2)}$ kompensieren.
 Die größte mit diesen Stellen darstellbare Zahl ist aber:

$$\sum_{i=0}^{m-1} (b-1)b^i = (b-1) \sum_{i=0}^{m-1} b^i = b^m - 1.$$

Da b^m der kleinstmögliche Wert der fehlende Stelle m ist, kann diese aber nicht kompensiert werden. Dies ist ein Widerspruch.

□

Durch den Beweis ergibt sich sofort ein Algorithmus zur Umwandlung einer Zahl in ein anderes Zahlensystem:

1.4 Beispiel. Umwandlung von $(1364)_{10}$ in das Oktalsystem.

- $1364 = 170 \cdot 8 + 4$
 - $170 = 21 \cdot 8 + 2$
 - ...
 - $0 \cdot 8 + 2$
- $\Rightarrow (2524)_8$

Daten: Dezimalzahl $z \in \mathbb{N}_0$, Basis $b \in \mathbb{N}$
Ergebnis: b-adische Darstellung $(z_{n-1}, \dots, z_0)_b$
 Initialisiere $i = 0$
solange $z > 0$ **tue**
 $z_i = z \bmod b$
 $z = \lfloor \frac{z}{b} \rfloor$
 $i = i + 1$
Ende

Algorithmus 1: Bestimmung der b-adischen Darstellung

Beobachtung Wir sehen, dass das Honor-Schema nur eine Schleife, Additionen und Multiplikationen benötigt. Diese Operationen können wir am Computer durchführen. Im Gegensatz dazu steht die Potenz b^i in modernen Programmiersprachen zwar zur Verfügung, wird aber im Hintergrund oft auf Multiplikationen zurückgeführt. Man überprüft leicht, dass das Honor-Schema weniger Multiplikationen benötigt und somit schneller ist.

2. Vorzeichen-Betrag-Darstellung

Um auch Zahlen mit Vorzeichen am Computer darstellen zu können, betrachten wir im Folgenden die Vorzeichen-Betrag-Darstellung für Binärzahlen. Das Binäralphabet besteht nur aus 0 und 1, welche wir auch als *Bits* bezeichnen. Bei einer Wortlänge von n Bits wird das erste Bit als Vorzeichen verwendet, die restlichen $n - 1$ -Bits für den Betrag der Zahl. Da die 0 die Darstellung $+0$ und -0 besitzt, können wir insgesamt $2^n - 1$ Zahlen darstellen.

2.5 Beispiel. Für $n = 3$

Bitmuster	Dezimaldarstellung
000	+0
001	+1
010	+2
011	+3
100	-0
101	-1
110	-2
111	-3

Aber: Diese Darstellung am Computer ist unpraktisch, da die vier Grundrechenarten auf Hardwareebene typischerweise mit Hilfe von Addition und Zusatz-Logik umgesetzt werden.

Lösung: Komplementdarstellung

3. Komplementdarstellung

3.6 Definition ((b-1)-Komplement). Sei $z = (z_{n-1} \dots z_1 z_0)_b$ eine n-stellige b-adische Zahl. Das (b-1)-Komplement $K_{b-1}(z)$ ist definiert als:

$$K_{b-1} = (b-1-z_{n-1}, \dots, b-1-z_0)_b$$

Geben wir hierzu direkt ein paar Beispiele an

3.7 Beispiel. Komplemente

- $K_9((325)_{10}) = (674)_{10}$ (9er-Komplement im 10-er System)
- $K_1((10110)_2) = (01001)_2$ (1er-Komplement im 2er System)

3.8 Definition (b-Komplement). Das b-Komplement einer b-adischen Zahl $z \neq 0$ ist definiert als

$$K_b(z) = K_{b-1}(z) + (1)_b$$

3.9 Beispiel. • $K_{10}((325)_{10}) = (674)_{10} + (1)_{10} = (675)_{10}$

3.10 Lemma. Für jede n-stellige b-adische Zahl z gilt:

- i) $z + K_{b-1}(z) = (b-1, \dots, b-1)_b = b^n - 1$
- ii) $K_{b-1}(K_{b-1}(z)) = z$

Ist außerdem $z \neq 0$ so gilt:

- iii) $z + K_b(z) = b^n$
- iv) $K_b(K_b(z)) = z$

Beweis. Hilfssatz

(i) Durch nachrechnen:

$$\begin{aligned}
 z + K_{b-1}(z) &= (z_{n-1} \dots z_0)_b + (b-1 - z_{n-1}, \dots, b-1 - z_0)_b \\
 &= \sum_{i=0}^{n-1} z_i b^i + \sum_{i=0}^{n-1} (b-1 - z_i) b^i \\
 &= \sum_{i=0}^{n-1} (b-1) b^i = (b-1, \dots, b-1)_b \\
 &= (b-1) \sum_{i=0}^{n-1} b^i \\
 &= (b-1) \left(\frac{b^n - 1}{b-1} \right) \\
 &= b^n - 1
 \end{aligned}$$

- (ii) per Definition
- (iii) Nachrechnen:

$$z + K_b(z) = z + K_{b-1}(z) + 1 = b^n - 1 + 1 = b^n$$

- Definiere $\hat{z} = K_b(z) = K_{b-1}(z) + (1)_b > 0$ und rechne

$$z + K_b(z) = b^n = \hat{z} + K_b \hat{z} + K_b(K_b(z)) \implies \text{Behauptung.}$$

□

3.11 Bemerkung. Modifikation

- Die 3. Aussage gilt auch für $z = 0$, falls man dann bei der Addition von 1 die Anzahl der Stellen erweitert.
 - die 4. Aussage gilt für $z = 0$, falls überall im Beweis modulo b^n gerechnet wird.
- Außerdem impliziert die 3. Aussage des Lemmas, dass

$$K_b(z) = b^n - z. \quad (3.1)$$

Dies können wir geschickt zum Darstellen der b^n verschiedenen ganzen Zahlen z mit

$$-\left\lfloor \frac{b^n}{2} \right\rfloor \leq z \leq \left\lceil \frac{b^n}{2} \right\rceil - 1$$

nutzen. Diesen Bereich nennt man darstellbaren Bereich.

3.12 Definition (b-Komplement-Darstellung). Die b-Komplement-Darstellung $(z)_{K_b} = (z_{n-1} \dots z_0)_b$ einer Zahl $z \in \mathbb{Z}$ im darstellbaren Bereich ist definiert als:

$$(z)_{K_b} = \begin{cases} (z)_b & \text{falls } z \geq 0 \\ (K_b(|z|))_b & \text{falls } z < 0 \end{cases}$$

3.13 Beispiel. Der darstellbare Bereich.

- Sei $b = 10$, $n = 2$.
Dann impliziert (3.1), dass

$$K_{10}(50) = 10^2 - 50 = 50$$

$$K_{10}(49) = 100 - 49 = 51.$$

Der darstellbare Bereich ist nun

$$-50 \leq z \leq 49$$

und hat konkrete Darstellungen:

Darstellung	Zahl
0	+0
1	+1
...	...
49	+49
50	-50
...	...
99	-1

- Sei $b = 2$, $n = 3$ Der darstellbare Bereich ist $-4 \leq z \leq 3$.

Bitmuster	Dezimaldarstellung
000	0
001	1
...	...
100	-4
...	...
111	-1

Wir betrachten nun Addition und Subtraktion zweier Zahlen in b-Komplement-Darstellung. Hierzu bezeichne $(x)_{K_b} \oplus (y)_{K_b}$ die ziffernweise Addition der Darstellungen von x und y mit Übertrag ("schriftlich rechnen"), wobei ein eventueller Überlauf auf die $(n+1)$ -te Stelle vernachlässigt wird (wir rechnen also immer mit modulo b^n).

3.14 Satz (Addition in b-Komplement-Darstellung). Seien x und y zwei n -stellige, b -adische Zahlen und x, y und $x + y$ im darstellbaren Bereich. Dann gilt:

$$(x + y)_{K_b} = (x)_{K_b} \oplus (y)_{K_b}$$

Beweis. Wir betrachten dazu mehrere Fälle.

- Fall $x, y \geq 0$:

$$\begin{aligned} (x)_{K_b} \oplus (y)_{K_b} &\stackrel{\text{Def.}}{=} ((x)_b + (y)_b) \mod b^n \\ &\stackrel{\text{Def.}}{=} (x + y) \mod b^n \\ &\stackrel{\text{Def.}}{=} (x + y)_{K_b} \end{aligned}$$

Der letzte Schritt ist möglich, da $(x + y)_{K_b}$ im darstellbaren Bereich sind.

- Fall $x, y < 0$

$$\begin{aligned} (x)_{K_b} \oplus (y)_{K_b} &\stackrel{\text{Def.}}{=} ((K_b(|x|))_b + (K_b(|y|))_b) \mod b^n \\ &= ((K_b(|x|)) + (K_b(|y|))) \mod b^n \\ &= (b^n - |x| + b^n - |y|) \mod b^n \\ &= (x + y) \mod b^n \\ &= (x + y)_{K_b} \end{aligned}$$

- Fall $x \geq 0, y < 0$:

$$\begin{aligned} (x)_{K_b} \oplus (y)_{K_b} &\stackrel{\text{Def.}}{=} ((x)_b + (K_b(|y|))_b) \mod b^n \\ &= (x + K_b(|y|)) \mod b^n \\ &= (x + b^n - |y|) \mod b^n \\ &= (x + y) \mod b^n \\ &= (x + y)_{K_b} \end{aligned}$$

- Fall $x < 0, y \geq 0$: Analog

□

3.15 Satz (Subtraktion in b-Komplement-Darstellung). Seien x und y n -stellige b -adische Zahlen und x, y und $x-y$ im darstellbaren Bereich. Dann gilt:

$$(x - y)_{K_b} = (x)_{K_b} \oplus (K_b(y))_{K_b}$$

Beweis. • Fall $y = 0$ nichts zu zeigen.

- $y \neq 0$: (3.1) impliziert:

$$-y = K_b(y) - b^n$$

mit modulo b^n -rechnen folgt, dass

$$(-y)_{K_b} = (K_b(y))_{K_b}$$

ist und somit:

$$\begin{aligned}(x - y)_{K_b} &= (x + (-y))_{K_b} \\ &= (x)_{K_b} \oplus (-y)_{K_b} \\ &= (x)_{K_b} \oplus (K_b(y))_{K_b}\end{aligned}$$

□

3.16 Beispiel. Für $b = 10$ und $n = 2$ ist der darstellbare Bereich $-50 \leq z \leq 49$

- $(20 + 7)_{K_{10}} = (20)_{K_{10}} \oplus (7)_{K_{10}} = (27)_{K_{10}} = 27$
- $28 - 5 = 28 + (-5) = (28)_{K_{10}} \oplus (95)_{K_{10}} = (23)_{K_{10}} = 23$
- $-18 - 20 = (-18) + (-20) = \dots = -38$

Die darstellbaren Zahlen kann man sich beim K_b -Komplement als Zahlenrad vorstellen.

Achtung Ein eventueller Überlauf bzw. Unterlauf wird im Allgemeinen nicht aufgefangen.

3.17 Beispiel. In n -stelliger Binärarithmetik ist die größte darstellbare Zahl $x_{max} = (011 \dots 1)_{K_2}$ gleich $2^{n-1} - 1$. Hingegen ist $x_{max} + 1 = (100 \dots 0)_{K_2}$ und wird als -2^{n-1} interpretiert.

4. Fest-Komma-Darstellung

4.18 Definition. Bei der Festkommadarstellung einer n -stelligen Zahl werden k Vorkomma und $n-k$ Nachkommastellen definiert:

$$z = \pm(z_{k-1} \dots z_0.z_{-1} \dots z_{k-n})_b = \pm \sum_{i=k-n}^{k-1} z_i b^i$$

4.19 Beispiel. Im Zehner System wie gehabt.

Im Binärsystem ergibt sich folgendes: $(101.01)_2 = 2^2 + 2^0 + 2^{-2} = 5.25$

Achtung Im Gegensatz zur Darstellung ganzer Zahlen können bereits bei der Konvertierung von Dezimalzahlen in das b -adische Zahlensystem Rundungsfehler auftreten.

4.20 Beispiel. $(0.8)_{10} = (0.110\overline{1100})_2$

Das größte Problem der Festkommadarstellung ist allerdings, dass der darstellbare Bereich stark eingeschränkt ist und schlecht aufgelöst ist, da der Abstand zwischen zweier Zahlen immer gleich ist.

4.21 Beispiel. Die kleinste darstellbare Zahl in Fixkommadarstellung ist

$$z_1 = (0 \dots 0.0 \dots 01)_b$$

Die zweitkleinste Zahl ist $z_2 = 2z_1$. Wir wollen $x = \frac{z_1 + z_2}{2}$ in Fixkommadarstellung darstellen, müssen wir entweder zu z_1 abrunden oder zu z_2 aufrunden.

4.22 Der relative Fehler dieses Runden ist:

$$\frac{|x - z_1|}{|x|} = \frac{1}{3}$$

Analog für z_2 .

Solche Fehler machen jede Rechnung unbrauchbar.

5. Gleitkommadarstellung

5.23 Definition (Gleitkommadarstellung). Die Gleitkommastellung einer Zahl $z \in \mathbb{R}$ ist gegeben durch:

$$z = \pm m \cdot b^e$$

mit einer Mantisse m , dem Exponenten e und der Basis b .

Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass die Basis für alle Zahlen gleich ist, obwohl sie prinzipiell verschieden sein könnte.

5.24 Beispiel. Die Gleitkommadarstellungen von:

- $(-384.753)_{10} = -3.84753 \cdot 10^2$
- $(0.00042)_{10} = 4.2 \cdot 10^{-4}$
- $(1010.101)_2 = (1.010101)_2 \cdot 2^3$

Achtung: Die Gleitkommadarstellung ist nicht eindeutig!

5.25 Definition. Die Mantisse m heißt normalisiert, falls $m = m_1.m_2m_3 \dots m_t$ mit $1 \leq m_1 \leq b$.

Um die eindeutige, normalisierte Gleitkommadarstellung im Computer zu speichern, müssen wir festlegen, wie viele Stellen für Mantisse und Exponent zur Verfügung gestellt werden. Dies resultiert in der Menge

$$F = F(b, t, e_{min}, e_{max}) = \{z = \pm m_1.m_2m_3 \dots m_t \cdot b^e \mid e_{min} \leq e \leq e_{max}\}$$

Da 0 nicht in dieser Form dargestellt werden kann, reserviert man dafür eine spezielle Ziffernfolge in Mantisse und Exponent.

5.26 Bemerkung. Das Hidden Bit ist hilfreich

- Für $b = 2$ kann die erste Ziffer m_1 der Mantisse weggelassen werden (Hidden Bit)

- Um den Exponenten besser vergleichen zu können, verwendet man oft die Exzess- oder Bias-Darstellung. Durch Addition der Exzesser $|e_{min}| + 1$ wird der Exponent auf den Bereich $1, 2, \dots, |e_{min}| + e_{max} + 1$ transformiert.

5.27 Beispiel (IEEE 754 Standard). Betrachte binäre Gleitkommazahlen mit 64 Bit auf dem Computer.

- 52 Bit für die Mantisse in Hidden Bit Darstellung
- 11 Bit für den Exponenten mit $e_{min} = -1022$ und $e_{max} = 1023$ gespeichert in Exzessdarstellung.
- 1 Bit als Vorzeichen.

Weitere Fälle können Online nachgelesen werden.

Genauigkeit der Gleitkommadarstellung

Da die Menge aller Zahlen in $F = F(b, t, e_{min}, e_{max})$ endlich ist, müssen wir Zahlen in $\mathbb{R} \setminus F$ geeignet annähern.

5.28 Definition. Die Rundung ist eine Abbildung $rd: \mathbb{R} \rightarrow F$ mit

- $rd(a) = a, a \in F$
- $rd(z), z \in \mathbb{R}$ ist gegeben so, dass $|z - rd(z)| = \min_{a \in F} (z - a)$ für alle $z \in \mathbb{R}$.

5.29 Definition (Maschinengenauigkeit). Den maximalen relativen Rundungsfehler ε_{mach} für $z_{min} \leq |z| \leq z_{max}$ nennt man Maschinengenauigkeit. Die Stellen der Mantisse heißen signifikante Stellen. Wenn die Mantisse t -stellig ist, spricht man von t -stelliger Arithmetik.

5.30 Satz (Maschinengenauigkeit von F). Die Maschinengenauigkeit ε_{mach} für $F = F(b, t, e_{min}, e_{max})$ ist:

$$\varepsilon_{mach} = \frac{1}{2} b^{1-t}.$$

Beweis. Betrachte relativen Rundungsfehler ε , der vom Abscheiden nicht signifikanter Stellen herrührt. Sei $z_{min} < x < z_{max}$ und \tilde{x} die durch Abschneiden entstehende Zahl. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{|x - \tilde{x}|}{|x|} \\ &= \frac{|x_1.x_2x_3 \dots x_t x_{t+1} \dots \cdot b^e - x_1x_2x_3 \dots x_t \cdot b^e|}{|x|} \\ &= \frac{|0.x_{t+1} \dots| \cdot |b^{e+1-t}|}{|x|} \end{aligned}$$

Da $|0.x_{t+1} \dots| < 1$ und $b^e \leq |x|$ gilt:

$$\varepsilon < \frac{b^{e+1-t}}{b^e} = b^{1-t}$$

Da der Rundungsfehler ε_{mach} höchsten halb so groß ist wie der Abschneidefehler folgt die Behauptung. \square

Die Maschinengenauigkeit ε_{mach} ist die wichtigste Größe zur Beurteilung der Genauigkeit von Gleitkommarechnungen am Computer. Sie gibt Aufschluss zur Anzahl signifikanter Stellen zur Basis b . Die zugehörige Anzahl s Stellen im Dezimalsystem erhält man durch das Auflösen von:

$$\varepsilon_{mach} = \frac{1}{2}b^{1-t} = \frac{1}{2}10^{1-s}$$

nach s . Es folgt daher:

$$s = \lfloor 1 + (t - 1) \log_{10}(b) \rfloor$$

Für den IEEE 754 Standard mit $b = 2, t = 53$ erhält man $s = 16$ signifikante Stellen.

Fehleranalyse

6. Rechnerarithmetik

6.1 Beispiel. Betrachte $F = F(10, 5, -4, 5)$ und Maschinenzahlen

$$\begin{aligned}x &= 2.5684 \cdot 10^0 = 2.56840000 \\y &= 3.2791 \cdot 10^{-3} = 0.0032791\end{aligned}$$

Es gilt:

$$\left. \begin{aligned}x + y &= 2.5716792 \\x - y &= 2.5651209 \\x \cdot y &= 0.00842204044 \\\frac{x}{y} &= 783.2637004\end{aligned} \right\} \notin F$$

6.2 Bemerkung. Die Menge $F(b, t, e_{min}, e_{max})$ ist nicht abgeschlossen bezüglich der Grundrechenarten und können somit im Allgemeinen nicht im Computer implementiert werden.

Lösung Wir runden das Ergebnis und implementieren so eine Pseudoarithmetik. Das bedeutet, wir ersetzen $\circ \in \{+, -, \cdot, \div\}$ durch $\boxdot \in \{\boxplus, \boxminus, \boxtimes, \boxdiv\}$ definiert durch:

$$x \boxdot y := rd(x \circ y) \tag{6.1}$$

Auf Hardwareebene wird üblicherweise mit einer längeren Mantisse gearbeitet und dann normalisiert und gerundet. Dies entspricht dem IEEE 754 Standard.

6.3 Bemerkung. Für $|x|, |y|, |x \circ y| \in [z_{min}, z_{max}]$ impliziert (6.1), dass

$$\frac{|x \boxdot y - x \circ y|}{|x \circ y|} = \frac{|rd(x \circ y) - x \circ y|}{|x \circ y|} \leq \varepsilon_{mach}$$

Das bedeutet, dass \boxdot im Computer bestmöglich umgesetzt ist.

6.4 Beispiel. Betrachte $F = F(10, 5, -4, 5)$

- Setze:
 - $a = 0.98765$

- $b = 0.012424$
- $c = -0.0065432$

Dann gilt:

$$(a + b) + c = a + (b + c) = 0.9925208$$

Numerisch gilt:

$$(0.98765 \boxplus 0.012424) \boxminus 0.0065432 = rd(0.9935568) = 0.99356$$

und

$$0.98765 \boxplus (0.012424 \boxminus 0.0065432) = rd(0.9935308) = 0.99353$$

- Setze

- $a = 4.2832$
- $b = -4.2821$
- 5.7632

Dann gilt

$$(a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c = 0.006339520000001$$

Numerisch gilt:

$$(4.2832 \boxminus 4.2821) \boxtimes 5.7632 = 0.006339$$

und

$$(4.2832 \boxtimes 5.7632) \boxminus (4.2821 \boxtimes 5.7632) = 0.006000$$

6.5 Bemerkung. Mathematisch äquivalente Algorithmen auf Fließkommazahlen können je nach Implementierung zu wesentlich unterschiedlichen Ergebnissen führen, selbst wenn die Eingangszahlen exakt dargestellt werden.

6.1. Auslöschung

Unglücklicherweise pflanzen sich numerische Fehler, zum Beispiel durch Rundung im Verlauf eines Algorithmus fort.

6.6 Lemma (Fehlerfortpflanzung). Es seien $x, y \in \mathbb{R}$ mit Datenfehlern $\Delta x, \Delta y \in \mathbb{R}$ behaftet, welche

$$\left| \frac{\Delta x}{x} \right|, \left| \frac{\Delta y}{y} \right| \ll 1$$

erfüllen. Für $\circ \in \{+, -, \cdot, \div\}$ gilt für den fortgepflanzten Fehler

$$\Delta(x \circ y) := (x + \Delta x) \circ (y + \Delta y) - x \circ y,$$

dass

$$\begin{aligned}\frac{\Delta(x \pm y)}{x \pm y} &= \frac{x}{x \pm y} \frac{\Delta x}{x} \pm \frac{y}{x \pm y} \frac{\Delta y}{y} \\ \frac{\Delta(x \cdot y)}{xy} &\approx \frac{\Delta x}{x} + \frac{\Delta y}{y} \\ \frac{\Delta(\frac{x}{y})}{\frac{x}{y}} &\approx \frac{\Delta x}{x} - \frac{\Delta y}{y}\end{aligned}$$

Hierbei bedeutet "≈", dass Terme mit $(\Delta x)^2, (\Delta y)^2, \Delta x \Delta y$ vernachlässigt werden.

Beweis. Übung. □

Für \cdot, \div addieren bzw. subtrahieren sich die Fehler.

Achtung: Ist $|x \pm y|$ wesentlich kleiner als $|x|$ oder $|y|$, kann der relative Fehler massiv verstärkt werden. Dieses Phänomen heißt Auslöschung.

Bei der Konstruktion von Algorithmen sollte Auslöschung möglichst vermieden werden.

6.7 Beispiel. Betrachte

$$x^2 - 2px + q = 0 \tag{6.2}$$

mit Lösungen:

$$x_{1,2} = p \pm \sqrt{p^2 - q}$$

Daten: $p, q \in \mathbb{R}$ so ,dass (6.2) lösbar ist

Ergebnis: Nullstellen x_1, x_2 von (6.2).

$$d = \sqrt{p \cdot p - q}$$

$$x_1 = p + d$$

$$x_2 = p - d$$

Algorithmus 2: naive Nullstellenberechnung

Mit $p = 100, q = 1$ in dreistelliger, dezimaler Gleitkommaarithmetik ergibt sich:

$$d = \sqrt{10000 - 1} = \sqrt{rd(9999)} = \sqrt{10000} = 100$$

$$x_1 = 100 + 100 = 200$$

$$x_2 = 100 - 100 = 0$$

Die exakten Werte sind $x_1 \approx 199.99, x_2 \approx 0.00500$, welche in dreistelliger, dezimaler Gleitkommaarithmetik als $x_1 = 200, x_2 = 0$ dargestellt werden.

Gemäß 5.30 ist die Maschinengenauigkeit:

$$\varepsilon_{mach} = \frac{1}{2}b^{1-t} = \frac{1}{2}10^{1-3} = 0.005$$

Der relative Fehler $\frac{|0-0.005|}{|0.005|} = 1$ ist also zu 100 Prozent falsch.

Wir können die Genauigkeit von x_2 erhöhen, indem wir den Wurzelsatz von Vieta $x_1 x_2 = q$ verwenden.

Daten: $p, q \in \mathbb{R}$ so ,dass (6.2) lösbar ist.

Ergebnis: Nullstellen x_1, x_2 (6.2).

$$d = \sqrt[3]{p \cdot p - q}$$

wenn $q \geq 0$ **dann**

$$x_1 = p + d$$

$$x_1 = p - d$$

Ende

Ende

$$x_2 = \frac{q}{x_1}$$

Algorithmus 3: verbesserte Nullstellenberechnung

Wir erhalten nun $d = 100, x_1 = 200, x_2 = \frac{1}{200} = 0.005$

7. Vorwärts- und Rückwärtsanalyse

Abstrakt gesehen entspricht das Lösen eines Problems dem Auswerten einer Funktion f . Beim numerischen Auswerten von f können verschiedene Fehler passieren:

7.8 Definition (Fehlerarten). Sei $D \subset \mathbb{R}$ eine Menge von Eingangsdaten und $W \subset \mathbb{R}$ die Menge der möglichen Ergebnisse. Wir unterscheiden folgende Fehlerarten bei der Auswertung von $f: D \rightarrow W$.

- Datenfehler Typischerweise sind die Eingangsdaten $x \in D$ nicht exakt, sondern mit einem Datenfehler Δx behaftet. Die gestörten Eingangsdaten $\tilde{x} = x + \Delta x$ produzieren einen Fehler $f(x + \Delta x) - f(x)$.
- Verfahrensfehler Exakte Verfahren enden bei exakter Rechnung nach endlich vielen Operationen mit dem exakten Ergebnis. Näherungsverfahren enden in Abhängigkeit bestimmter Kriterien mit einer Näherung \tilde{y} für die Lösung $y \in W$.
- Rundungsfehler Verursacht durch Maschinenzahlen und Rundungen während der Arithmetik.

Ein Teilgebiet der Numerik versucht diese Fehler durch eine Fehleranalyse zu quantifizieren. Hierzu verfolgt man die Auswirkungen von allen Fehlern, die in den einzelnen Schritten vorkommen können.

7.9 Definition (Analysearten). Bei der *Vorwärtsanalyse* wird der Fehler von Schritt zu Schritt verfolgt und der akkumulierte Fehler für jedes Teil-Ergebnis abgeschätzt. Bei der *Rückwärtsanalyse* geschieht die Verfolgung des Fehlers hingegen so, dass jedes Zwischenergebnis als exakt berechnetes Ergebnis zu gestörten Daten interpretiert wird, d.h., der akkumulierte Fehler wird als Datenfehler interpretiert.

7.10 Beispiel. Betrachte $f(x, y) = x + y$

- Vorwärtsanalyse: $\boxed{f} = x \boxplus y = (x + y)(1 + \varepsilon)$
- Rückwärtsanalyse: $x \boxplus y = x(1 + \varepsilon) + y(1 + \varepsilon) = f(x(1 + \varepsilon), y(1 + \varepsilon))$

mit $|\varepsilon| \leq \varepsilon_{mach}$

In der Praxis ist die Vorwärtsanalyse kaum durchführbar. Für die meisten Algorithmen ist, wenn überhaupt, nur eine Rückwärtsanalyse bekannt.

7.11 Beispiel. Fortsetzung von Beispiel 6.7

Führe Rückwärtsanalyse durch zu Algorithmus 2 für die Betrags-kleinere Nullstelle x_2 durch: Dann ist

$$f(p, q) = p - \sqrt[2]{p^2 - q}$$

mit $p > 0$. Für $|\varepsilon_i| \leq \varepsilon_{mach}, i = 1, 2, 3, 4$ betrachten wir:

$$\begin{aligned} \left(p - \sqrt[2]{(p^2(1 + \varepsilon_1) - q)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3)} \right) (1 + \varepsilon_4) &= p(1 + \varepsilon_4) - \sqrt[2]{(p^2(1 + \varepsilon_1) - q)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3)^2(1 + \varepsilon_4)^2} \\ &= p^2(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_3)^2(1 + \varepsilon_4)^2 - q(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3)^2(1 + \varepsilon_4)^2 \\ &= \dots \\ &= p(1 + \varepsilon_4) - \sqrt[2]{p^2(1 + \varepsilon_4)^2 - q(1 + \varepsilon_7)} \\ &= f(p(1 + \varepsilon_4), q(1 + \varepsilon_7)) \end{aligned}$$

Die Abschätzung für ε_7 explodiert, falls $0 < |q| \ll 1 < p$. Dies war in Beispiel 6.7 der Fall.

8. Kondition und Stabilität

Gegeben sei eine stetige und differenzierbare Funktion

$$f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto y = f(x)$$

Für fehlerhafte Daten $x + \Delta x$ mit kleinen Fehler Δx gilt:

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \approx f'(x).$$

Für den absoluten Datenfehler Δy gilt:

$$\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x) \approx f'(x) \cdot \Delta x$$

und für den relativen Fehler:

$$\frac{\Delta y}{y} = \frac{f'(x) \cdot \Delta x}{f(x)} = \frac{f'(x)x}{f(x)} \cdot \frac{\Delta x}{x}$$

8.12 Definition (Konditionszahlen). Die Zahl

$$K_{abs} = |f'(x)|$$

heißt *absolute Konditionszahl* des Problems $x \mapsto f(x)$. Für $f(x) \cdot x \neq 0$ heißt

$$K_{rel} = \left| \frac{f'(x) \cdot x}{f(x)} \right|$$

die entsprechende *relative Konditionszahl*. Ein Problem heißt schlecht konditioniert, falls eine dieser beiden Konditionszahlen deutlich größer als 1 sind. Ansonsten heißt das Problem gut konditioniert.

8.13 Beispiel. Konditionierung der Addition und Multiplikation

- Für die Addition $f(x) = x + a$ gilt

$$K_{rel} = \left| \frac{f'(x)x}{f(x)} \right| = \left| \frac{x}{x+a} \right|$$

$\implies K_{rel}$ ist groß, falls $|x+a| \ll |x|$.

- Für die Multiplikation $f(x) = x \cdot a$ gilt

$$K_{rel} = \frac{|f'(x)x|}{|f(x)|} = \frac{|ax|}{|ax|} = 1$$

\implies Die absolute Kondition ist schlecht, falls $1 \ll q$. Die relative Kondition ist immer gut.

8.14 Definition. Erfüllt die Implementierung eines Algorithmus \boxed{f} zur Lösung eines Problems $x \mapsto f(x)$ die Abschätzung

$$\left| \frac{\boxed{f} - f(x)}{f(x)} \right| \leq C_V K_{rel} \varepsilon_{mach}$$

mit einem mäßig großen $C_V > 0$, so wird der Algorithmus *vorwärtsstabil* genannt. Ergibt die Rückwärtsanalyse $\boxed{f}(x) = f(x + \Delta x)$ mit

$$\left| \frac{\Delta x}{x} \right| \leq C_R \varepsilon_{mach}$$

mit $C_R > 0$ nicht zu groß, so heißt der Algorithmus \boxed{f} *rückwärtsstabil*

8.15 Satz. Jeder rückwärtsstabile Algorithmus ist auch vorwärtsstabil

Beweis. Übung. □

Oft ist Rückwärtsstabilität einfacher nachzuweisen.

Faustregel zu konditionierten Probleme

- Gut konditioniertes Problem + stabiler Algorithmus
 \Rightarrow Gute numerische Resultate.
- Schlecht konditioniertes Problem oder instabiler Algorithmus
 \Rightarrow Fragwürdige Ergebnisse.

8.16 Beispiel. Fortsetzung von Beispiel 7.11

Die Rückwärtsanalyse hat gezeigt: Falls $0 < |q| \ll 1 < p$ wird der numerische Fehler untragbar. Unsere Abbildung ist:

$$f(q) = p - \sqrt[2]{p^2 - 1}$$

Als Konditionszahlen ergeben sich:

$$K_{abs} = |f'(q)| = \left| \frac{1}{2\sqrt[2]{p^2 - q}} \right| < 1$$

$$\begin{aligned} K_{rel} &= \left| \frac{f'(q)q}{f(q)} \right| \\ &= \left| \frac{q}{2\sqrt[2]{p^2 - q}(p - \sqrt[2]{p^2 - q})(p + \sqrt[2]{p^2 - q})} \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \frac{p + \sqrt[2]{p^2 - q}}{\sqrt[2]{p^2 - q}} \right| \\ &\approx \frac{1}{2} \left| \frac{p+p}{p} \right| \approx 1 \end{aligned}$$

\Rightarrow Nullstellenberechnung ist ein gut konditioniertes Problem, aber Algorithmus 2 muss instabil sein

Dreitermrekursion

9. Theoretische Grundlagen

9.1 Definition. Für gegebene p_0 und p_1 heißt eine Rekursion der Form

$$p_k = a_k p_{k-1} + b_k p_{k-2} + c_k, \quad k = 2, 3, \dots \quad (9.1)$$

mit $b_k \neq 0$ eine *Dreitermrekursion*. Die zugehörige *Rückwärtsrekursion* ist

$$p_{k-2} = -\frac{a_k}{b_k} p_{k-1} + \frac{1}{b_k} p_k - \frac{c_k}{b_k}, \quad k = n, n-1, \dots \quad (9.2)$$

Ist $b_k = 1$, das heißt (9.1) und (9.2) gehen durch vertauschen von p_{k-2} und p_k auseinander hervor, so heißt die Rekursion symmetrisch. Gilt $c_k = 0$ für alle k , so heißt die Rekursion homogen.

9.2 Beispiel. Die Fibonacci-Zahlen sind rekursiv definiert durch:

$$p_k = p_{k-1} + p_{k-2}$$

mit $p_0 = 0, p_1 = 1$. Es gilt $a_k = b_k = 1$.

Sei

$$p_k(x) = 2 \cos(x) p_{k-1}(x) - 1 \cdot p_{k-2}(x)$$

mit $p_0 = 1$ und $p_1 = \cos(x)$. Man kann zeigen, dass

$$p_k(x) = 2 \cos(kx)$$

ist.

Die Chebychev-Polynome T_k erfüllen

$$T_k(x) = 2xT_{k-1} - T_{k-2}(x)$$

mit $T_0(x) = 1$ und $T_1(x) = x$

Daten: Koeffizienten von $\{a_k\}_{k=2}^n, \{b_k\}_{k=2}^n, \{c_k\}_{k=2}^n$, Startwerte p_0, p_1
Ergebnis: Werte von $\{p_k\}_{k=2}^n$
für $k \leftarrow 2$ **bis** n **do**
 $p_k = a_k p_{k-1} + b_k p_{k-2} + c_k$
Ende

Algorithmus 4: Dreitermrekursion

9.3 Beispiel. Betrachte: $p_0 = 1, p_1 = \sqrt[3]{2} - 1, p_k = -2p_{k-1} + p_{k-2}, k = 2, 3, \dots$

Algorithmus 5 liefert:

Die Oszillationen für höhere k sollten uns misstrauische machen und uns motivieren das Problem genauer anzuschauen.

Wir können homogene Dreitermrekursion schreiben als:

$$\begin{bmatrix} p_k \\ p_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_k p_{k-1} + b_k p_{k-2} \\ p_{k-1} \end{bmatrix} =: \begin{bmatrix} a_k & b_k \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p_{k-1} \\ p_{k-2} \end{bmatrix} = A_k \begin{bmatrix} p_{k-1} \\ p_{k-2} \end{bmatrix}$$

Rekursiv folgt:

$$\begin{bmatrix} p_k \\ p_{k-1} \end{bmatrix} = A_k \begin{bmatrix} p_{k-1} \\ p_{k-2} \end{bmatrix} = A_k A_{k-1} \begin{bmatrix} p_{k-2} \\ p_{k-3} \end{bmatrix} = \dots = A_k \dots A_2 \begin{bmatrix} p_1 \\ p_0 \end{bmatrix}$$

Offensichtlich gilt für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ und Startwerte p_0, p_1, q_0, q_1 und $B_k := A_k \dots A_2$, dass

$$B_k \begin{bmatrix} \alpha p_1 + \beta q_1 \\ \alpha p_0 + \beta q_0 \end{bmatrix} = \alpha B_k \begin{bmatrix} p_1 \\ p_0 \end{bmatrix} + \beta B_k \begin{bmatrix} q_1 \\ q_0 \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} p_k \\ p_{k-1} \end{bmatrix} + \beta \begin{bmatrix} q_k \\ q_{k-1} \end{bmatrix}$$

Das heißt, die Lösungsfolge $\{p_k\}$ hängt *linear* von den Startwerten $\begin{bmatrix} p_1 \\ p_0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$ ab. Im Falle unseres Beispiels gilt: $a_k = a = -2, b_k = b = 1$. Das bedeutet, es gilt:

$$B_k = A^{k-1}, A = \begin{bmatrix} a & b \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Aus den Eigenwerten λ_1, λ_2 der Matrix A kann man die Lösungen der homogenen Dreitermrekursion direkt angeben.

9.4 Satz. Seien λ_1, λ_2 die Nullstellen des *charakteristischen Polynoms*

$$q(\lambda) = \lambda^2 - a\lambda - b \tag{9.3}$$

Dann ist die Lösung der homogenen Dreitermrekursion:

$$p_k = ap_{k-1} + bp_{k-2}, k = 2, 3, \dots$$

gegeben durch:

$$p_k = \alpha \lambda_1^k + \beta \lambda_2^k, k = 2, 3, \dots$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ Lösungen des linearen Gleichungssystems.

$$\alpha + \beta = p_0$$

$$\alpha \lambda_1 + \beta \lambda_2 = p_1$$

Beweis. • Induktion über k

$$\diamond \text{ Induktionsanfang: } \underline{k=0}: p_0 = \alpha + \beta = \alpha \lambda_1^0 + \beta \lambda_2^0$$

◇ Induktionsschritt: $k \rightarrow k+1$:

$$\begin{aligned}
 p_{k+1} &= ap_k + bp_{k-1} \\
 &= a(\alpha\lambda_1^k + \beta\lambda_2^k) + b(\alpha\lambda_1^{k-1} + \beta\lambda_2^{k-1}) \\
 &= \alpha(a\lambda_1^k + b\lambda_1^{k-1}) + \beta(a\lambda_2^k + b\lambda_2^{k-1}) \\
 &= \alpha\lambda_1^{k-1}(a\lambda_1 + b) + \beta\lambda_2^{k-1}(a\lambda_2 + b) \\
 &= \alpha\lambda_1^{k+1} + \beta\lambda_2^{k+1}
 \end{aligned}$$

Da nach (9.3) λ_1^2 und λ_2^2 Nullstellen sind.

□

Wende 9.4 auf das Beispiel 9.3 an: Mit $a = -2, b = 1$ hat das charakteristische Polynom (9.3) die Nullstellen:

$$\lambda_1 = \sqrt[2]{2} - 1, \lambda_2 = -\sqrt[2]{2} - 1$$

Aus

$$\alpha + \beta = p_0 = 1$$

$$\alpha\lambda_1 + \beta\lambda_2 = p_1 = \sqrt[2]{2} - 1$$

folgt $\alpha = 1, \beta = 0$. Der Satz 9.4 impliziert:

$$p_k = \lambda_1^k > 0, k = 0, 1, 2, \dots$$

in Beispiel 9.3

Daten: Koeffizienten a,b, Startwerte p_0, p_1

Ergebnis: Werte $\{p_k\}_{k=2}^n$

Initialisiere:

- $\lambda_1 = \frac{a}{2} + \sqrt{\frac{a^2}{4} + b}$
- $\lambda_2 = \frac{a}{2} - \sqrt{\frac{a^2}{4} + b}$
- $\beta = \frac{p_1 - \lambda_1 p_0}{\lambda_2 - \lambda_1}$
- $\alpha = p_0 - \beta$

für $k \leftarrow 2$ **bis** n **tue**

$p_k = \alpha\lambda_1^k + \beta\lambda_2^k$

Ende

Algorithmus 5: verbesserte Dreitermrekursion

Dieser Algorithmus liefert für Beispiel 9.3 folgende Grafik:

Dies ist in diesem Fall das richtige Ergebnis, da

$$p_k = \lambda_1^k = (\sqrt[2]{2} - 1)^k \ll 1$$

Was geht schief in dem vorherigen Algorithmus 5?

Betrachten wir unser Problem $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $f(p_0, p_1) = p_k$ mit gestörten Eingangsdaten: $\hat{p}_0 = 1(1 + \varepsilon_0)$, $\hat{p}_1 = \lambda_1(1 + \varepsilon_1)$, $|\varepsilon_0|, |\varepsilon_1| \leq \varepsilon_{mach}$.

Dies ergibt:

$$\begin{aligned}\tilde{\beta} &= \frac{\lambda_1(1 + \varepsilon_1) - \lambda_1(1 + \varepsilon_0)}{\lambda_2 - \lambda_1} = (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \\ \tilde{\alpha} &= 1 + \varepsilon_0 \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} = 1 + \varepsilon_0 \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} - \varepsilon_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}\end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned}\tilde{p}_k &= \tilde{\alpha} \lambda_1^k + \tilde{\beta} \lambda_2^k \\ &= (1 + \varepsilon_0 \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} - \varepsilon_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}) \lambda_1^k + (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \lambda_2^k\end{aligned}$$

Der relative Fehler von \tilde{p}_k zu $p_k = \lambda_1$ ist somit :

$$\begin{aligned}|\frac{\tilde{p}_k - p_k}{p_k}| &= |\varepsilon_0 \frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} - \varepsilon_1 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^k| \\ &= |\varepsilon_0 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \left(\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k - 1 \right)|\end{aligned}$$

Beobachte: Falls $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} > 1$ explodiert der relative Fehler für wachsende k. Dies war in Beispiel 9.3 der Fall.

Falls wir den Begriff der Konditionszahl aus der Definition 8.12 geeignet für Funktion $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ erweitern, sehen wir, dass das Problem schlecht konditioniert ist.

9.5 Definition (Minimallösung). Die Lösung $\{p_k\}$ der Dreiterm-Rekursion (9.1) zu den Startwerten p_0 und p_1 heißt *Minimallösung*, falls für jede Lösung $\{p_k\}$ zu den von p_0, p_1 linear unabhängigen Startwerten q_0, q_1 gilt, dass:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{p_k}{q_k} = 0$$

Die Lösung $\{p_k\}$ wird dominante Lösung genannt.

9.6 Beispiel. In Beispiel 9.3 ist $\{p_k\}$ Minimallösung genau dann, wenn $\beta = 0$.

Die Minimallösung ist nur bis auf einen skalaren Faktor eindeutig. Deshalb normieren wir sie mit der zusätzlichen Bedingung: $p_0^2 + p_1^2 = 1$.

Frage: Wie können wir eine normierte Minimallösung berechnen, obwohl das Problem schlecht konditioniert ist?

10. Miller-Algorithmus

Betrachte die Rückwärtsrekursion zu

$$q_k = a_k q_{k-1} + b_k q_{k-2}, k = 2, 3, \dots$$

d.h.

$$q_{k-2} = -\frac{a_k}{b_k} q_{k-1} + \frac{1}{b_k} q_k, k = n, n-1, \dots, 2$$

mit Startwerten $q_n = 0, q_{n-1} = 1$. Für $a_k = a, b_k = b$ besitzt das charakteristische Polynom

$$q(\mu) = \mu^2 + \frac{a}{b}\mu - \frac{1}{b}$$

Die Nullstellen:

$$\mu_{1,2} = \frac{-a \pm \sqrt{a^2 + 4b}}{2b} = \frac{1}{\lambda_{1,2}}$$

Idee: Wende Satz 9.4 "rückwärts" an.

Lösen wir

$$\alpha + \beta = 0$$

und

$$\alpha\mu_1 + \beta\mu_2 = q_{n-1} = 1$$

ergibt sich:

$$\alpha = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \neq 0$$

$$\beta = -\frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \neq 0$$

und

$$q_k = \alpha\mu_1^{n-k} + \beta\mu_2^{n-k} = \frac{\alpha}{\lambda_1^{n-k}} + \frac{\beta}{\lambda_2^{n-k}}$$

Für $|\lambda_1| < |\lambda_2|$ folgt, dass

$$\begin{aligned} p_k^{(n)} &:= \frac{q_k}{q_0} \\ &= \frac{\frac{\alpha}{\lambda_1^{n-k}} + \frac{\beta}{\lambda_2^{n-k}}}{\frac{\alpha}{\lambda_1^n} + \frac{\beta}{\lambda_2^n}} \\ &= \frac{\lambda_1^k + \frac{\beta}{\alpha} \lambda_2^k \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^n}{1 + \frac{\beta}{\alpha} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^n} \\ &\rightarrow \lambda_1^k = p_k \end{aligned}$$

Beobachtung: Für großes n approximiert $p_k^{(n)}$ die Minimallösung.

Daten: n genügend groß $\{a_k\}_{k=2}^n, \{b_k\}_{k=2}^n$
Ergebnis: Approximation von $\{p_k^{(n)}\}_{k=0}^n$ um eine normierte Minimallösung
 Setze $\hat{p}_n = 0, \hat{p}_{n-1} = 1$
für $k \leftarrow n$ **bis** 2 **tue**
 $\hat{p}_{k-2} = -\frac{a_k}{b_k} \hat{p}_{k-1} + \frac{1}{b_k} \hat{p}_k$
Ende
für $k \leftarrow 0$ **bis** n **tue**
 $p_k^{(n)} = \frac{\hat{p}_n}{\sqrt{\hat{p}_0^2 + \hat{p}_n^2}}$
Ende

Algorithmus 6: Miller-Algorithmus

10.7 Satz (Miller-Algorithmus). Sei $\{p_k\}_{k=0}^\infty$ Minimallösung der normierten, homogenen Dreitermrekursion. Dann gilt für die Lösung des Miller-Algorithmus:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_k^{(n)} = p_k, k = 0, 1, 2, \dots$$

Beweis. Wir bemerken, dass sich jede Lösung der Dreitermrekursion als Linearkombination einer Minimallösung und einer dominanten Lösung schreiben lässt (Übung). Mit den richtigen α und β folgt (Übung):

$$\begin{aligned} \hat{p}_k &= \alpha p_k + \beta q_k \\ &= \frac{p_k q_n - q_k p_n}{p_{n-1} q_n - q_{n-1} p_n} = \frac{q_n}{p_{n-1} q_n - q_{n-1} p_n} \left(p_k - \frac{p_n}{q_n} q_k \right) \end{aligned}$$

Aus (Normierungs-Konstante)

$$\begin{aligned} \hat{p}_0^2 + \hat{p}_1^2 &= \frac{q_n^2}{(p_{n-1} q_n - q_{n-1} p_n)^2} \left(p_0^2 + p_1^2 - 2 \frac{p_n}{q_n} (p_0 q_0 + p_1 q_1) + \frac{p_n^2}{q_n^2} (q_0^2 + q_1^2) \right) \\ &= \frac{q_n^2}{(p_{n-1} q_n - q_{n-1} p_n)^2} \left(1 - 2 \frac{p_n}{q_n} + \frac{p_n^2}{q_n^2} \right) \end{aligned}$$

folgt:

$$\begin{aligned} p_k^{(n)} &= \frac{\hat{p}_k}{\sqrt{\hat{p}_0^2 + \hat{p}_1^2}} \\ &= \frac{p_k - \frac{p_n}{q_n} q_k}{\sqrt{1 - 2 \frac{p_n}{q_n} + \frac{p_n^2}{q_n^2}}} \rightarrow p_k \end{aligned}$$

□

Wir können also auch für schlecht konditionierte Probleme stabile Algorithmen finden.

Sortieren

11. Das Sortierproblem

Gegeben $n \in \mathbb{N}$ verschiedene Zahlen $z_1, \dots, z_n \in \mathbb{R}$.

Gesucht Permutation π_1, \dots, π_n , so dass $z_{\pi_1} < \dots < z_{\pi_n}$

11.1 Definition (Permutation). Eine Permutation π von $\{1, 2, \dots, n\}$ ist eine bijektive Abbildung von $\{1, 2, \dots, n\}$ auf sich selbst. Wir schreiben $\pi(k) = \pi_k$ für $k = 1, \dots, n$

11.2 Bemerkung. Da wir die Zahlen z_1, \dots, z_n als verschieden annehmen ist das Sortierproblem eindeutig lösbar.

Probiere so lange alle möglichen Permutationen durch, bis die gewünschte Sortierung vorliegt

Algorithmus 7: Brute-Force

11.3 Satz. Es gibt $n! = n(n-1) \dots 2 \cdot 1$ Permutationen der Menge $\{1, 2, \dots, n\}$

Beweis. Wir haben

- n Möglichkeiten die erste Zahl auszuwählen
- $n - 1$ Möglichkeiten die zweite Zahl auszuwählen
- ...
- 1 Möglichkeit die letzte Zahl auszuwählen

woraus die Behauptung folgt. □

Im schlimmsten Fall (worst case) muss der Algorithmus 7 also

$$(n-1) \cdot n!$$

Vergleiche durchführen. Da dies extrem aufwändig sein kann, betrachten wir im Folgenden einen Algorithmus, der die transitive Struktur

$$x < y \text{ und } y < z \implies x < z$$

der Ordnungsrelation ausnutzt.

Daten: Menge $S_n = \{z_1, \dots, z_n\}$
Ergebnis: Sortierte Menge $S^\pi = \{z_{\pi_1}, \dots, z_{\pi_n}\}$
für $k \leftarrow n$ **bis** 1 **tue**
 $z_{\pi_k} = \max(S_k)$
 $S_{k-1} = S_k \setminus \{z_{\pi_k}\}$
Ende

Algorithmus 8: Bubblesort

11.4 Beispiel. Die zu sortierende Menge ist: $\{4, 1, 2\}$.

- $S_3 = \{4, 1, 2\}$, $k = 3$, $z_{\pi_3} = 4$
- $S_2 = \{1, 2\}$, $k = 2$, $z_{\pi_2} = 2$
- $S_1 = \{1\}$, $k = 1$, $z_{\pi_1} = 1$

Die sortierte Liste ist: $\{1, 2, 4\}$.

Um den Aufwand von Algorithmen zu untersuchen, beschränken wir uns auf das asymptotische Verhalten für große n .

11.5 Definition (Landau-Notation). Wir schreiben

- $f(x) = \mathcal{O}(g(x))$, falls Zahlen $C > 0, x_0 > 0$ existieren, so dass: $|f(x)| \leq Cg(x), \forall x > x_0$.
- $f(x) = \Omega(g(x))$, falls Zahlen $C > 0, x_0 > 0$ existieren, so dass $|f(x)| \geq Cg(x) \forall x > x_0$.
- $f(x) = o(g(x))$, falls für jedes $c > 0$ ein $x_0 > 0$ existiert, so dass $|f(x)| \leq cg(x), \forall x > x_0$.
- $f(x) = \Theta(g(x))$, falls $f(x) = \mathcal{O}(g(x)), g(x) = \mathcal{O}(f(x))$

11.6 Bemerkung. Genau dann wenn Beziehung der Landau-Notation

- $f(x) = \mathcal{O}(g(x)) \iff \limsup_{x \rightarrow \infty} \left| \frac{f(x)}{g(x)} \right| \leq C < \infty$
- $f(x) = \Omega(g(x)) \iff \liminf_{x \rightarrow \infty} \left| \frac{f(x)}{g(x)} \right| > 0$
- $f(x) = o(g(x)) \iff \lim_{x \rightarrow \infty} \left| \frac{f(x)}{g(x)} \right| = 0$
- $f(x) = \Theta(g(x)) \iff f(x) = \mathcal{O}(g(x)), f(x) = \Omega(g(x))$

11.7 Beispiel. Es gilt $\sin(x) = \mathcal{O}(1)$, da $|\sin(x)| \leq 1$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Bei Polynomen gilt die Laufzeit ist die höchste Potenz, sofern $x \geq 1$.

11.8 Definition. Der Aufwand eines Algorithmus ist die kleinste obere Schranke für das betrachtete Aufwandsmaß

Für uns ist der Speicherbedarf irrelevant und benutzen als Aufwandsmaß für den Rechen die Anzahl der benötigten Vergleiche.

In der k -ten Iteration des Bubblesort-Algorithmus 8 müssen k Vergleiche ausgeführt werden. Das heißt, der Gesamtaufwand des Algorithmus ist:

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

Dies ist eine drastische Verbesserung im Vergleich zu $\mathcal{O}(n(n!))$ von Algorithmus 7

12. Mergesort

Zu erst wollen wir folgendes beobachten:

12.9 Lemma. Gegeben seien zwei sortierte Mengen

- $S_x = \{x_1 < \dots < x_m\}$
- $S_y = \{y_1 < \dots < y_n\}$

Dann lässt sich die Menge $S = S_x \cup S_y$ mit linearem Aufwand sortieren. Genauer werden $m + n - 1$ Vergleiche benötigt.

Beweis. Konstruktiv, durch den entsprechenden Algorithmus. □

```
Daten: Sortierte Mengen  $S_x$  und  $S_y$ 
Ergebnis: Sortierte Menge  $S = S_x \cup S_y$ 
Initialisiere  $i = j = k = 1$ 
solange  $i \leq m$  und  $j \leq n$  tue
|   wenn  $x_i < y_j$  dann
|   |    $z_k = x_i$ 
|   |    $i = i + 1$ 
|   Ende
|   sonst
|   |    $z_k = y_j$ 
|   |    $j = j + 1$ 
|   Ende
|    $k = k + 1$ 
Ende
für  $l \leftarrow 0$  bis  $m - i$  tue
|    $z_{k+l} = x_{k+l}$ 
Ende
für  $l \leftarrow 0$  bis  $n - j$  tue
|    $z_{k+l} = y_{k+l}$ 
Ende
```

Algorithmus 9: Merge

Basierend auf dieser Beobachtung können wir eine divide-and-conquer Strategie angeben um Mengen der Länge $n = 2^m, m \in \mathbb{N}$ zu sortieren.

Daten: Menge $S = \{z_1, \dots, z_n\}$
Ergebnis: Sortierte Menge $S^\pi = \{z_{\pi_1} < \dots < z_{\pi_n}\}$
wenn $n = 1$ **dann**
 | $S^\pi = S$
Ende
sonst
 |
 • Sortiere
 $L = \{z_1, \dots, z_{\frac{n}{2}}\}$
 $R = \{z_{\frac{n}{2}+1}, \dots, z_n\}$ mittels Mergesort zu L^π und R^π
 • Sortiere $L^\pi \cup R^\pi$ mittels Merge-Algorithmus 9 zu S^π
Ende

Algorithmus 10: Mergesort

12.10 Beispiel. Mergesort der Menge $\{20, 7, 84, 31, 71, 42, 18, 10\}$

12.11 Bemerkung. Da Mergesort sich selbst aufruft, sprechen wir von einem *rekursiven Algorithmus*. Im Allgemeinen ist es schwierig zu beurteilen, ob solche Algorithmen terminieren. Im Fall von Mergesort ist der Fall jedoch klar, da die Rekursion im Fall $n = 1$ abgebrochen wird.

12.12 Satz. Der Aufwand von Mergesort ist $\mathcal{O}(n \log n)$

Beweis. Bezeichne $A(n)$ den Aufwand für das Sortieren einer $n = 2^m$ elementigen Menge mittels Mergesort. Dann gilt:

$$A(1) = 0$$

$$A(n) = n - 1 + 2A\left(\frac{n}{2}\right)$$

Auflösen der Rekursion ergibt:

$$\begin{aligned} A(n) &= n - 1 + 2A\left(\frac{n}{2}\right) \\ &= 2n - 1 - 2 + 4A\left(\frac{n}{4}\right) \\ &= \dots \\ &= mn - \sum_{i=0}^{m-1} 2^i \\ &= mn - \frac{1 - 2^m}{1 - 2} \\ &= (m - 1)n + 1 \end{aligned}$$

$m = \log_2(n) = \frac{\log(n)}{\log(2)}$ impliziert die Behauptung

□

$\log n \ll n$, also ist die Verbesserung von $\mathcal{O}(n^2)$ nach $\mathcal{O}(n \log(n))$ signifikant. Man nennt das Wachstum auch beinahe linear.

- 12.13 Bemerkung.** Die Implementierung von Mergesort als in-place-Algorithmus ist je nach Datenstrukturen trickreich. Deshalb wird oft nicht in-place implementiert, weshalb für jeden "divide"-Schritt zusätzlicher Speicherplatz implementiert werden muss.

13. Quicksort

Idee: Divide-and-Conquer Strategie basierend auf dem Inhalt der zu sortierenden Liste.

Daten: Menge $S = \{z_1, \dots, z_n\}$
Ergebnis: Sortierte Menge $S^\pi = \{z_{\pi_1}, \dots, z_{\pi_n}\}$
 Wähle ein Pivot-Element $x \in S$
 Bestimme eine Permutation π , so dass $x = z_{m_\pi}$
wenn $L = \{z_{\pi_1}, \dots, z_{\pi_{m-1}}\} \neq \emptyset$ **dann**
 | Sortiere L zu L^π mittels Quicksort
Ende
wenn $R = \{z_{\pi_{m+1}}, \dots, z_{\pi_n}\} \neq \emptyset$ **dann**
 | Sortiere R zu R^π mittels Quicksort
Ende
 Vereinige $S^\pi = R^\pi \cup \{x\} \cup L^\pi$

Algorithmus 11: Quicksort

- 13.14 Beispiel.** Beispiel anhand der gleichen Menge von Mergesort.

- 13.15 Lemma.** Im schlimmsten Fall ist der Aufwand von Quicksort $\mathcal{O}(n^2)$

Beweis. $A(n)$ aus 12.12 wird umso größer, je unterschiedlicher die Größe der beiden Teilprobleme $A(m-1)$ und $A(n-m)$ ist. $A(n)$ ist also maximal für $m=1$ oder $m=n$, also wenn das Pivot-Element das größte oder kleinste Element ist. Dann gilt:

$$A(n) = n - 1 + A(n - 1)$$

Der Rest erfolgt Analog zu der Aufwandserklärung von Bubblesort 8:

$$A(n) = \frac{n(n-1)}{2} = \mathcal{O}(n^2)$$

Damit ist der Aufwand gezeigt. □

- 13.16 Satz.** Alle Permutationen der Zahlen $\{1, 2, \dots, n\}$ seien gleich wahrscheinlich. Dann benötigt Quicksort im Durchschnitt $\mathcal{O}(n \log(n))$ Vergleiche zum sortieren von Zahlen.

Beweis. Sei Π die Menge aller Permutationen von $\{1, 2, \dots, n\}$ und sei $A(\pi), \pi \in \Pi$ die Anzahl Vergleiche um eine Permutation π mittels Quicksort zu sortieren. Der durchschnittliche Aufwand ist:

$$\bar{A}(n) = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \Pi} A(\pi)$$

O.B.d.A: Sei das erste Element das Pivotelement. Definiere:

$$\Pi_k = \{\pi \in \Pi | \pi_1 = k\}, k = 1, \dots, n$$

mit

$$|\Pi_k| = (n-1)!, k = 1, \dots, n$$

Für k fix und $\pi \in \Pi_k$ teilt Quicksort im ersten Aufruf in zwei Mengen

$$\begin{aligned} \pi_{<} &= \{\text{Permutationen von } 1, 2, 3, \dots, k-1\} \\ \pi_{>} &= \{\text{Permutationen von } k+1, \dots, n\} \end{aligned}$$

Analog zu 12.12 folgt

$$A(\pi) = n-1 + A(\pi_{<}) + A(\pi_{>})$$

und

$$\sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi) = (n-1)!(n-1) + \sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi_{<}) + \sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi_{>}) \quad (13.1)$$

Wenn π alle Permutationen aus Π_k durchläuft, entstehen für $\Pi_{<}$ alle Permutationen von $\{1, 2, \dots, k-1\}$. Dabei tritt jede Permutation genau $\frac{(n-1)!}{(k-1)!} = \frac{|\Pi_k|}{|\Pi_{<}|}$ mal auf.

$$\Rightarrow \sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi_{<}) = \frac{(n-1)!}{(k-1)!} \sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi_{<}) = (n-1)! \bar{A}(k-1) \quad (13.2)$$

Analog:

$$\sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi_{>}) = (n-1)! \bar{A}(n-k) \quad (13.3)$$

Zusammensetzen:

$$\begin{aligned} \bar{A}(n) &= \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \Pi} A(\pi) \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n \sum_{\pi \in \Pi_k} A(\pi) \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Gleichungen 13.1, 13.2, 13.3 folgt weiter:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n (n-1)! (n-1 + \bar{A}(k-1) + \bar{A}(n-k)) \\
 &= n-1 + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \bar{A}(k-1) + \bar{A}(n-k) \\
 &= n-1 + \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{A}(k)
 \end{aligned}$$

mit Startwerten $\bar{A}(0) = \bar{A}(1) = 0$.

Per Induktion folgt:

$$\begin{aligned}
 \bar{A}(n) &= 2(n+1) \sum_{i=1}^n \frac{1}{i} - 4n \\
 &\leq 2(n+1) \left(1 + \int_1^n \frac{1}{x} dx\right) - 4n \\
 &= 2(n+1)(1 + \log(n)) - 4n \\
 &= 2(n+1) \log(n) - 2(n-1) \\
 &= \mathcal{O}(n \log(n))
 \end{aligned}$$

□

14. Untere Schranke für das Sortierproblem

Frage: Gibt es einen Sortieralgorithmus, der schneller ist als $\mathcal{O}(n \log(n))$?

14.17 Satz. Jedes deterministische Sortierverfahren, das auf paarweisen Vergleichen basiert und keine Vorkenntnisse über die zu sortierende Menge hat, benötigt im schlimmsten Fall mindestens $\log_2(n!)$ Vergleiche zum Sortieren von n verschiedenen Zahlen.

Bevor wir den Beweis machen gibt es noch einige Hinweise, die wir für den Beweis benötigen.

14.18 Bemerkung. Es gilt:

- $\log_2(n!) = \Theta(n \log(n))$
- $\log_2(n) \leq \log_2(n^n) = n \log_2(n) = \frac{1}{\log(2)} n \log n$
- $\log(n!) \geq \log\left(\frac{n}{2} \dots \frac{n}{2}\right) \geq \log\left(\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{n}{2}}\right) = \frac{n}{2} \log\left(\frac{n}{2}\right) = \frac{n}{2} \log(n) - n \log(2)$

Zum Beweis benötigen wir einen Entscheidungsbaum. Dieser kann jedem Sortieralgorithmus mit paarweisen Vergleichen zugeordnet werden, und illustriert das Verhalten des Algorithmus:

- Innere Knoten des Entscheidungsbaums sind Vergleiche im Algorithmus.
- Ein Weg von der Wurzel zu einem Blatt entspricht der zeitlichen Abfolge der Vergleiche. Ein Weitergeben nach rechts illustriert einen richtigen Vergleich, nach links einen falschen.
- Die $n!$ Blätter des Baumes stellen die Permutationen der zu sortierenden Menge dar, die jeweils zur Abfolge der Vergleiche gehört.

14.19 Beispiel. Baum für $\{z_1, z_2, z_3\}$:

Beweis. 14.17

Idee: Finde eine untere Schranke für die Tiefe des Baumes. Dies ist die Mindestanzahl der im schlimmsten Fall nötigen Vergleiche. Im besten Fall ist ein Baum ausbalanciert, d.h. alle Blätter haben die gleiche Tiefe m und wir haben 2^m Blätter. Da wir $n!$ Permutationen haben (also Blätter), muss $2^m = n!$ gelten. Es folgt $m \log_2(n!)$ \square

Satz 14.17 sagt, dass Mergesort in der asymptotischen Laufzeit optimal ist.

Frage: Können wir etwas Ähnliches für Quicksort zeigen?

14.20 Satz. Alle Permutationen der Zahlen z_1, \dots, z_n seien gleich wahrscheinlich. Dann benötigen Sortierverfahren wie in Satz 14.17 im Mittel $\log_2(n!)$ Vergleiche.

Beweis. Die mittlere Höhe $\overline{H}(z)$ des Entscheidungsbaums τ ist gegeben als der Mittelwert der Tiefen t_τ aller seiner Blätter v . Sei $B(\tau)$ die Menge der Blätter und $\beta(\tau) = |B(\tau)|$. Dann gilt:

$$\overline{H}(\tau) = \frac{1}{\beta(\tau)} \sum_{v \in B(\tau)} t_\tau(v)$$

Zu zeigen ist, dass:

$$\overline{H}(\tau) \geq \log_2(\beta(\tau))$$

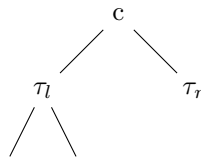
Vollständige Induktion über die Höhe des Entscheidungsbaums τ .

◇ Induktionsverankerung: $\overline{H}(\tau) = 0$

τ besteht nur aus seiner Wurzel. $\implies \overline{H}(\tau) = \frac{1}{1} \sum_{v \in B(\tau)} t_\tau(v) = 0 = \log_2(1)$

◇ Induktionsschritt: $\overline{H}(\tau) \leq h - 1 \implies \overline{H}(\tau) = h$

Seien τ_l, τ_r die Wurzeln des linken bzw. rechten Teilbaums zum Wurzelknoten von τ :



Beobachte:

- $H(\tau_l), H(\tau_r) < h$
- $B(\tau) = B(\tau_l) \cup B(\tau_r)$
- $B(\tau_l) \cap B(\tau_r) = \emptyset$
- $\beta(\bar{c}) = \beta(\tau_l) + \beta(\tau_r)$
- $\beta(\tau_l), \beta(\tau_r) \geq 1$
- $t_\tau(v) = t_{\tau_l}(v) + 1$
- $t_\tau(v) = t_{\tau_r}(v) + 1$

Rechne:

$$\begin{aligned}\overline{H}(\tau) &= \frac{1}{\beta(\tau)} \sum_{v \in B(\tau)} t_\tau(v) \\ &= \dots \\ &\geq 1 + \frac{1}{b} \min_{x \in [0, b]} (x \log_2(x) + (b-x) \log_2(b-x))\end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}f'(x) &= \log_2(x) - \log_2(b-x) \\ &= \log_2\left(\frac{x}{b-x}\right) = 0\end{aligned}$$

genau dann, wenn $x = \frac{b}{2}$, ist dies die einzige Möglichkeit, wo das Minimum in $(0, b)$ angenommen werden kann. Die anderen Möglichkeiten sind die Intervallrandpunkte, was ausgeschlossen ist. Also gilt:

$$\begin{aligned}\overline{H}(\tau) &\geq 1 + \log_2\left(\frac{b}{2}\right) \\ &= 1 + \log_2(\beta(\tau)) - 1 \\ &= \log_2(\beta(\tau))\end{aligned}$$

□

Graphen

15. Grundlagen

15.1 Definition (Graph). Ein Graph ist ein Paar $G = (V, E)$, bestehend aus endlichen Mengen V von Knoten (vertices) und E von Kanten (edges). Die Kanten beschreiben die Verbindungen zwischen den Knoten und sind gerichtet oder ungerichtet.

- Für *gerichtete* Graphen oder *Digraphen* gilt:

$$E \subset \{(v, w) \in V \times V | v \neq w\}$$

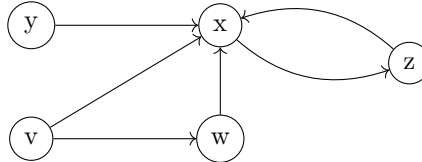
Ist $e = (v, w) \in E$, so heißt v der Anfangsknoten und w der Endknoten.

- Für *ungerichtete* Graphen ist E eine Menge von ungeordneten Paaren $\{v, w\} \subset E, v \neq w$, das heißt:

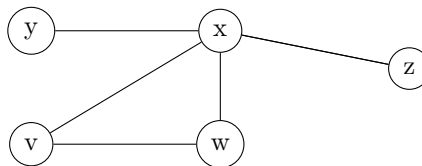
$$E \subset \{X \subset V | |X| = 2\}$$

15.2 Beispiel. Sei $V = \{v, w, x, y, z\}$

- $G = (V, E), E = \{(v, w), (v, x), (w, x), (x, z), (z, x), (y, x)\}$ ist ein Digraph, der wie folgt illustriert werden kann:



- Der gleiche Graph sieht ungerichtet wie folgt aus:



Wir bemerken insbesondere, dass $\{v, w\} = \{w, v\}$ im ungerichteten Graphen ist.

15.3 Bemerkung. In Digraphen werden manchmal auch Kanten der Form $\{v, v\}, v \in V$ zugelassen.

15.4 Definition. Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Ein *Weg* oder *Pfad* von $v = v_0$ nach $w = v_r$ in G ist eine Kantenfolge

$$\pi = v_0, v_1, \dots, v_r$$

mit $r \geq 1$ und

- $(v_i, v_{i+1}) \in E, i = 0, \dots, r - 1$ im Falle von Digraphen.
- $\{v_i, v_{i+1}\} \in E, i = 0, \dots, r - 1$ im Falle von ungerichteten Graphen.

Der Weg heißt *einfach*, falls

- v_0, \dots, v_r paarweise verschieden sind oder
- v_0, \dots, v_r paarweise verschieden mit $v_0 = v_r$.

Die *Länge* von π ist gegeben als $|\pi| = r$, ist also die Anzahl Knoten, die in π durchlaufen werden. Ein Knoten w heißt von Knoten v *erreichbar*, falls ein Weg von v nach w existiert.

15.5 Beispiel. Bezogen auf Beispiel 15.2 ist:

- $\pi_1 = v, w$ ein einfacher Weg der Länge 1
- $\pi_2 = v, w, x$ ein einfacher Weg der Länge 2
- $\pi_3 = v, w, x, z, x, z$ ein Weg der Länge 5

Im ungerichteten Fall ist

- $\pi_4 = v, w, x, v$ ein einfacher Weg der Länge 3.

In beiden Fällen ist z von v erreichbar, im ungerichteten Fall gilt dies auch umgekehrt. Im gerichteten Fall ist v nicht von z erreichbar.

15.6 Definition. Sei $G = (V, E)$ ein Digraph und $v \in V$. Wir definieren:

- die Menge der (direkten) *Nachfahren* von v :

$$\text{post}(v) = \{w \in V \mid (v, w) \in E\}$$

- die Menge der (direkten) *Vorfahren* von v :

$$\text{pre}(v) = \{w \in V \mid v \in \text{post}(w)\}$$

- die Menge der *erreichbaren Knoten* von v :

$$\text{post}^*(v) = \{w \in V \mid \text{es gib einen Weg von } v \text{ nach } w\}$$

- die Menge aller Knoten die v erreichen können:

$$\text{pre}^*(v) = \{w \in V \mid v \in \text{post}^*(w)\}$$

- die Nachbarn als die Menge $post(v) \cup pre(v)$ von v
- und den Knotengrad $deg(v)$, welcher der Anzahl seiner Kanten entspricht.

15.7 Bemerkung. Mit den offensichtlichen Modifikationen kann die Definition 15.6 auch auf ungerichtete Graphen angewendet werden. Wir erhalten in diesem Fall für $v \in V$, dass

$$\begin{aligned} post(v) &= pre(v) \\ post^*(v) &= pre^*(v) \end{aligned}$$

15.8 Beispiel. Für den Digraphen aus Beispiel 15.2 gilt:

- $post(v) = \{w, x\}$
- $post^*(v) = \{w, x, z\}$
- $pre(v) = \emptyset$
- $pre^*(v) = \emptyset$
- $deg(v) = 2$

Für den ungerichteten Graphen gilt geändert:

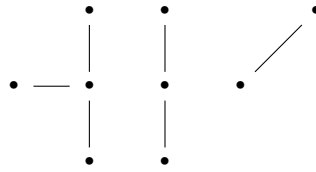
- $pre(v) = \{w, x\}$
- $pre^*(v) = \{w, x, y, z\}$
- $post^* = \{w, x, y, z\}$

16. Zusammenhang

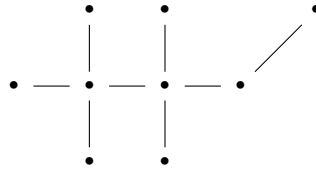
16.9 Definition. Sei $G = (V, E)$ ein ungerichteter Graph $\emptyset \neq C \subset V$

- Die Menge C heißt *zusammenhängend*, falls je zwei Knoten $v, w \in C, v \neq w$, voneinander erreichbar sind, das heißt, $v \in post^*(w), w \in post^*(v)$.
Ist G ein Digraph, so heißt C zusammenhängend, falls C im zugrundeliegenden ungerichteten Graphen zusammenhängend ist.
- Eine zusammenhängende Knotenmenge heißt *Zusammenhangskomponente*, falls sie *maximal* ist. Das bedeutet, es gibt keine weitere zusammenhängende Knotenmenge $D \subset V$ mit $C \subsetneq D$.
- Ein Graph heißt *zusammenhängend*, falls V zusammenhängend ist.

16.10 Beispiel. Dies ist ein unzusammenhängender Graph mit drei Zusammenhangskomponenten:



Analog hierzu ist der folgende Graph zusammenhängend:



Wir können beobachten, dass die Zusammenhangskomponenten eines ungerichteten Graphen die Äquivalenzklassen der Knotenmenge V unter der Äquivalenzrelation

$$v = w \iff \{v\} \cup \text{post}^*(v) = \{w\} \cup \text{post}^*(w)$$

ist.

Insbesondere zerfällt G in paarweise disjunkte Zusammenhangskomponenten C_1, \dots, C_r mit

$$V = \bigcup_{i=1}^r C_i$$

$$E = \bigcup_{i=1}^r E_i$$

wobei $E_i = E \cap \{X \subset C_i : |X| = 2\}$.

16.11 Satz. Sei $G = (V, E)$ ein ungerichteter Graph mit $n = |V| \geq 1$ Knoten und $m = |E|$ Kanten. Ist G zusammenhängend, so folgt für die Anzahl Knoten und Kanten, dass

$$m \geq n - 1$$

Beweis.

□

Per vollständiger Induktion:

◇ IV $n=1$

$$m = 0 = n - 1$$

◇ IS $n \geq 3$

Wähle $v \in V$ mit:

$$\deg(v) = \min_{v \in V} \deg(v) =: k$$

Da G zusammenhängend ist, muss $k > 0$ gelten.

$$\underline{k \geq 2}$$

$$\begin{aligned} 2m &= 2|E| \\ &= \sum_{w \in V} |deg w| \\ &\geq 2|V| \\ &= 2n \end{aligned} \quad \implies m \geq n \geq n-1$$

$$\underline{k = 1}$$

Sei $G'(V', E')$ derjenige Graph, der durch das Streichen von v und der zugehörigen Kante entsteht. G' ist zusammenhängend, weil G zusammenhängend ist. Die Induktionsannahme impliziert:

$$m-1 = |E'| \geq |V'| - 1 = (n-1) - 1 = n-2 \implies m \geq n-1$$

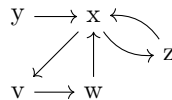
17. Zyklische Graphen

17.12 Definition. Ein *einfacher Zyklus* oder ein *einfacher Kreis* in einem Graphen $G = (V, E)$ ist ein einfacher Weg $\pi = v_0, \dots, v_r$ mit $v_0 = v_r$ und $r \geq 2$ (im Falle von Digraphen) oder $r \geq 3$ (im Falle von ungerichteten Graphen). Ein *Zyklus* oder *Kreis* ist ein Weg, der sich aus einfachen Zyklen zusammensetzt.

17.13 Bemerkung. Aus der Definition 17.12 folgt:

- Jeder einfache Zyklus ist ein Zyklus
- Sind $\pi_1 = v_0, \dots, v_r$, $\pi_2 = w_0, \dots, w_s$ mit $v_i = w_0 = w_r$ so ist auch $\pi = v_0, \dots, v_{i-1}, w_0, \dots, w_s, v_{i+1}, \dots, v_r$ ein Zyklus
- Es gibt keine andere Möglichkeit um Zyklen zu generieren.

17.14 Beispiel. Der Digraph



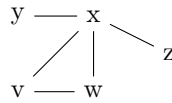
besitzt die einfachen Zyklen:

$$\begin{aligned} \pi_1 &= x, z, x \\ \pi_2 &= v, w, x, w \end{aligned}$$

und die nicht einfachen Zyklen:

$$\begin{aligned} \pi_3 &= x, z, x, z, x \\ \pi_4 &= v, w, x, z, x, v \end{aligned}$$

Der dazugehörige ungerichtete Graph:



besitzt den einfachen Zyklus

$$\pi_1 = v, w, x, v$$

Die Wege

$$\pi_2 = x, y, x$$

$$\pi_3 = v, w, x, y, x, v$$

sind keine Zyklen.

17.1. Eulergraphen

Im Folgenden betrachten wir exemplarisch das Königsberger Brückenproblem.

- 17.15** Das Königsbergerbrückenproblem ist ein von Leonhard Euler gelöstes mathematisches Problem. Es handelt konkret um die Stadt Königsberg und um die Frage, ob es einen Rundweg gibt, bei dem man alle sieben Brücken der Stadt über den Pregel exakt einmal überqueren kann und wieder zum Ausgangspunkt gelangt. Euler zeigte, dass es keinen solchen Rundweg gibt.

- 17.16 Definition.** Ein *Eulerscher Rundweg* in einem Graphen $G = (V, E)$ ist ein Zyklus, der jede Kante $e \in E$ genau einmal enthält. Im ungerichteten Fall nennen wir G *Eulersch*, falls der Grad jedes Knotens gerade ist. Ein Digraph ist Eulersch, falls $\text{indeg}(v) = \text{outdeg}(v), v \in V$.

- 17.17 Satz.** Ein zusammenhängender Graph $G = (V, E)$ besitzt genau dann einen Eulerschen Rundweg, falls der Graph Eulersch ist.

Beweis. Hin- und Rückrichtung

- \Rightarrow Ein Knoten $v \in V$ in einem Eulerschen Graph, der k -mal in einem Eulerschen Rundweg vorkommt, muss im gerichteten Fall

$$\text{indeg}(v) = \text{outdeg}(v)$$

und im ungerichteten Fall

$$\text{deg}(v) = 2k$$

erfüllen.

- \Leftarrow Sei G Eulersch und $\pi = v_0, \dots, v_r$ der längste Weg, in dem jede Kante aus E höchstens einmal vorkommt. Dies bedeutet, dass jede ausgehende Kante von v_r im Weg enthalten sein muss (sonst wäre es nicht der längste Weg). Die Bedingung an den Knotengrad impliziert: $v_0 = v_r$.

Annahme:

- Digraphen: Es gibt eine Kante $e = (w_1, w_2) \in E$ mit $e \neq (v_i, v_{i+1}, i = 0, \dots, r-1$
- ungerichtete Graphen: Es gibt eine Kante $e = \{w_1, w_2\} \in E$ mit $e \neq \{v_i, v_{i+1}\}, i = 0, \dots, r-1$.

Fall 1: w_1 oder w_2 sind in π enthalten.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit: $v_r = w_1$

$$\implies \tilde{\pi} = v_0, \dots, v_r, w_2$$

Dies ist ein Widerspruch zur Annahme, da π nun nicht mehr der längste Weg ist.

Fall 2: w_1 und w_2 sind beide nicht in π enthalten. Da G zusammenhängend ist, gibt es einen Weg von v_0 nach w_1 . Entlang dieses Weges muss es eine Kante geben, die einen Knoten in π und einen nicht in π hat.

Analog zum ersten Fall führt dies zum Widerspruch.

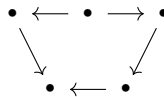
□

Wir beachten: Satz 17.17 ist die Antwort auf das Königsberger Brückenproblem. Demnach gibt es keinen solchen Weg und es ist nicht möglich einen Euler-Weg zu finden.

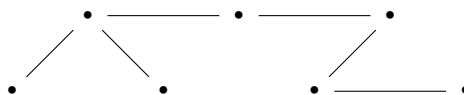
18. Bäume

18.18 Definition. Ein Graph G heißt *azyklisch* oder *zyklenfrei*, falls es keine Zyklen in G gibt. Ein ungerichteter, azyklischer und zusammenhängender Graph ist ein *Baum*.

18.19 Beispiel. Ein azyklischer Graph kann wie folgt aussehen:



Sollte dieser ungerichtet sein könnte er so aussehen:



Dieser Graph ist sogar zusammenhängend.

18.20 Satz. Sei $G = (V, E)$ ein ungerichteter Graph mit $n = |V|$ Knoten. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent.

- G ist ein Baum
- G hat $n-1$ Kanten und ist zusammenhängend

- c) G hat $n-1$ Kanten und ist azyklisch
- d) G ist azyklisch und das Hinzufügen einer beliebigen, noch nicht vorhandenen Kante erzeugt einen Zyklus.
- e) G ist zusammenhängend und das Entfernen einer beliebigen Kante macht G unzusammenhängend.
- f) Jedes Paar verschiedener Knoten in G ist durch genau einen einfachen Weg miteinander verbunden.

Beweis. Wir zeigen nicht jede Äquivalenz einzeln, sondern folgern aus anderen Aussagen.

- $a \implies f$ Falls es für ein gegebenes Paar $v, w \in V$, verschiedene Wege gäbe, so würde die Vereinigung dieser beiden Wege einen Zyklus beinhalten (Widerspruch zu azyklisch in Baum).
- $f \implies e$ "zusammenhängend" folgt per Definition. Falls wir eine beliebige Kante entfernen, so sind die beiden Endpunkte nicht mehr voneinander erreichbar ($\implies G$ wird unzusammenhängend).
- $e \implies d$ G ist azyklisch, da wir sonst eine (ausgewählte) Kante entfernen könnten, so dass G immer noch zusammenhängend wäre. Seien $v, w \in V, w \neq v$, dann gibt es einen Weg von v nach w . Hinzufügen der Kante $\{v, w\}$ macht diesen Weg zum Zyklus.
- $d \implies c$ Wir zeigen per Induktion über $m = |E|$, dass für einen azyklischen, ungerichteten Graph

$$n = m + p \tag{18.1}$$

gilt, wobei p die Anzahl Zusammenhangskomponenten ist.

◇ IV $m = 0$ trivial

◇ IS $m \rightarrow m + 1$ Beim Hinzufügen einer Kante muss eine Zusammenhangskomponente verschwinden, da sonst ein Zyklus entstehen würde.

Da das Hinzufügen einer beliebigen neuen Kante einen Zyklus entstehen lässt, muss $p = 1$ gelten.

$$\implies |E| = m = n - 1$$

- $c \implies b$ Folgt aus (18.1)
- $b \implies a$ Zu zeigen: G ist azyklisch.
Angenommen G hat k verschiedene einfache Zyklen. Dann können wir G durch entfernen von k Kanten zu einem azyklischen Graphen machen. (18.1) ist anwendbar, und impliziert, dass

$$\begin{aligned} n &= (m - k) + 1 \\ m + 1 &= (m - k) + 1 & \implies k = 0 \end{aligned}$$

d.h. G keine Zyklen.

□

- 18.21 Bemerkung.** Fixieren wir in einem Baum $G = (V, E)$ einen Wurzelknoten, so wird automatisch eine Richtung in den Kanten festgelegt. Für $v \in V$ heißt $pre(v)$, $|pre(v)| = 1$ der *Elternteil* und $post(v)$ die *Kinder*.

19. Implementierung von Graphen

- 19.22 Definition.** Ein Graph $G = (V, E)$ mit $V = \{1, \dots, n\}$ kann durch eine *Adjazenzmatrix* oder *Nachbarschaftsmatrix*

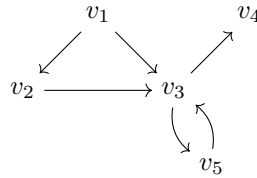
$$A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n,n}$$

mit

$$a_{i,j} = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } (i,j) \in E, \text{ bzw. falls } \{i,j\} \in E \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases}$$

dargestellt werden.

- 19.23 Beispiel.** Der gerichtete Graph



besitzt die Adjazenzmatrix

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

und falls der Graph als ungerichteter Graph aufgefasst wird:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- 19.24 Bemerkung.** Bei ungerichteten Graphen ist die Adjazenzmatrix immer symmetrisch. Der Speicherbedarf einer Adjazenzmatrix ist $|V|^2$, unabhängig von $|E|$. Für größere Graphen ist dies ineffizient. Wir werden beim Behandeln von dünnbesetzten Matrizen ein alternatives Speicherformat kennenlernen. Zum Abschluss bemerken wir, dass sich viele graphentheoretische Konzepte mit Hilfe der Adjazenzmatrix in die Sprache der linearen Algebra übersetzen lässt.

Algorithmen auf Graphen

20. Graphendurchmusterung

Graphen müssen häufig durchmustert, d.h. systematisch durchsucht, werden. Im Folgenden werden wir die "Tiefensuche" und die "Breitensuche" betrachten, welche sich beide auf den folgenden Algorithmus zurückführen lassen:

Daten: Graph $G = (V, E)$, Startknoten $s \in V$

Ergebnis: Zusammenhängender, azyklischer Graph $G'(R, T)$ mit
 $R = \{s\} \cup post^*(s)$ und $T \subset E$

- $R = \{s\}$
- $Q = \{s\}$
- $T = \emptyset$
- (a) **wenn** $Q = \emptyset$ **dann**
 - | stop**Ende**
- **sonst**
 - | Wähle $v \in Q \subset R$**Ende**
- Wähle $w \in V \setminus R \cap post(v)$ **wenn** *kein solches w existiert* **dann**
 - | setze $Q = Q \setminus \{v\}$ und gehe zu (a)**Ende**
- $R = R \cup \{w\}$
- $Q = Q \cup \{w\}$
- $T = T \cup \{e\}$ mit $e = (v, w)$ oder $e = \{v, w\}$
- Gehe zu (a)

Algorithmus 12: Algorithmische Suche

Je nachdem wie $v \in Q$ gewählt wird, bezeichnen wir den Suchalgorithmus unterschiedlich:

20.1 Definition. Bei der *Tiefensuche* oder *Depth-First-Search* (DFS) wird derjenige Knoten in $v \in Q$ ausgewählt, der zuletzt zu Q hinzugefügt wurde. Bei der *Breitensuche* oder *Breadth-First-Search* (BSF) wird derjenige Knoten $v \in Q$ ausgewählt, der zuerst zu Q hinzugefügt wurde.

20.2 Satz. Algorithmus 12 liefert einen zusammenhängenden, azyklischen Graphen $G'(R, T)$, mit $R = \{s\} \cup \text{post}^*(s)$ und $T \subset E$.

Beweis. Per Konstruktion ist (R, T) zu jedem Zeitpunkt im Algorithmus zusammenhängend.

(R, T) ist außerdem zu jedem Zeitpunkt azyklisch, denn per Konstruktion gilt $Q \subset R$ und e verbindet jeweils $v \in Q \subset R$ mit $w \in V \setminus R$. Wir müssen also zeigen: $R = \{s\} \cup \text{post}^*(v)$ ($T \subset E$ ist klar).

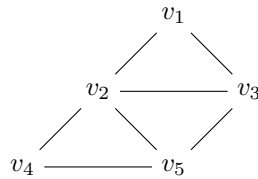
Annahme: Nach Ende des Algorithmus gibt es $w \in V \setminus R$ von s erreichbar. Dann gibt es einen Weg

$$\pi = s, v_1, \dots, v_r, w$$

und darin eine Kante $e = (x, y) \in E$ bzw. $e = \{x, y\} \in E$, mit $x \in R$ und $y \notin R$, $x, y \in \{s, v_1, \dots, v_r, w\}$. Da $x \in R$, muss zu einem gewissen Zeitpunkt im Algorithmus auch $x \in Q$ gelten. Der Algorithmus terminiert, aber nur, falls x aus Q entfernt wurde, was nur geschieht, wenn $y \notin V \setminus R \cap \text{post}(x)$, also falls $e \notin E$ ist.

Dies ist ein Widerspruch zu unserer Annahme. □

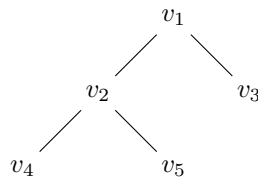
20.3 Beispiel. Betrachte



$s = \{v_1\}$. Bei der Tiefensuche entsteht folgender Baum:

$$v_1 \text{ --- } v_2 \text{ --- } v_4 \text{ --- } v_5 \text{ --- } v_3$$

Die Breitensuche hingegen ergibt:



20.4 Bemerkung. Ist G ein ungerichteter Graph, so ist das Resultat G' von Algorithmus 12 ein Baum mit Wurzel s , der *Spannbaum*

20.5 Satz. Die Ausführung von "wähle $v \in Q$ " und "wähle $w \in V \setminus R \cap \text{post}(v)$ " sei in $\mathcal{O}(1)$ durchführbar. Dann besitzt Algorithmus 12 den linearen Aufwand $\mathcal{O}(|V| + |E|)$.

Beweis. "wähle $v \in Q$ " wird maximal $(|\text{post}(v)| + 1)$ mal aufgerufen.

"wähle $w \in V \setminus R \cap \text{post}(v)$ " wird für jede Kante maximal ein mal aufgerufen.

Daraus folgt direkt die Behauptung. \square

Wir hatten gezeigt, (Satz 16.11), dass $|V| - 1 \leq |E|$, d.h. es gilt $\mathcal{O}(|V| + |E|)$ kann nach oben beschränkt werden durch $\mathcal{O}(2|E|)$.

Beobachtung: Die Breitensuche beschreibt einen "kürzesten" Weg von Startknoten zu jedem anderen Knoten.

20.6 Satz. Sie $G = (V, E)$ ein ungerichteter Graph, $s, v \in V$ und $\text{dist}_G(s, v) = \min\{|\pi| : \pi = s, u_1, \dots, u_r, v \text{ ein Weg in } G\}$ mit $\text{dist}_G(s, v) = \infty$, falls es keinen Weg von s nach v gibt. Dann enthält der durch die Breitensuche erzeugte Graph $G' = (R, T)$ zum Startknoten $s \in V$ einen kürzesten Weg zu jedem Knoten $v \in \text{post}^*(s)$. Dies bedeutet, es gibt einen einfachen Weg $\pi = s, u_1, \dots, u_r, v$ in G' mit $|\pi| = \text{dist}_{G'}(s, v) = \text{dist}_G(s, v)$ minimal.

Beweis. Wir bemerken zuerst, dass G' azyklisch ist und somit π in G' eindeutig bestimmt ist. Modifiziere Algorithmus 12 nun wie folgt:

- In 1: $l(s) = 0$
- In 4: $l(w) = l(v) + 1$

Dies bedeutet, zu jedem Zeitpunkt im Algorithmus gilt:

$$l(v) = \text{dist}_{(R,T)}(s, v), v \in R$$

Insbesondere gibt es für kein in 2 ausgewähltes $v \in Q$ ein $w \in R$ mit:

$$l(w) > l(v) + 1 \quad (20.1)$$

Zu Zeigen: $\text{dist}_{R,T}(s, v) = \text{dist}_{G'}(s, v) = \text{dist}_G(s, v)$

Annahme: Nach Abbruch des Algorithmus gibt es ein $w \in V$ mit

$$\text{dist}_G(s, w) < \text{dist}_{G'}(s, w) \quad (20.2)$$

Falls es mehr als ein solches w gibt, wähle dasjenige mit den kleinsten Abstand $\text{dist}_G(s, w)$.

Sei $\pi = s, u_1, \dots, u_r, v, w \implies \text{dist}_G(s, v) = \text{dist}_{G'}(s, v)$, da sonst v ein Knoten mit kleineren Abstand wäre, der (20.2) erfüllt.

$$\begin{aligned} \implies l(w) &= \text{dist}_{G'}(s, w) \\ &> \text{dist}_G(s, w) \\ &= \text{dist}_G(s, v) + 1 \\ &= \text{dist}_{G'}(s, v) + 1 \\ &= l(v) + 1 \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch zu (20.1). \square

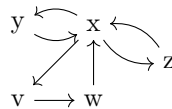
- 20.7 Bemerkung.** Die Breitensuche berechnet also die Wege aller Knoten zur Wurzel in $\mathcal{O}(|V| + |E|)$.

21. Starker Zusammenhang

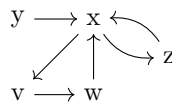
- 21.8 Definition.** Ein Digraph heißt *stark zusammenhängend*, falls für jedes Knotenpaar $v, w \in V$, $v \neq w$, sowohl $v \in \text{post}^*(w)$, als auch $w \in \text{post}^*(v)$ gilt. Es gibt also einen Weg von v nach w und umgekehrt.

Die *starken Zusammenhangskomponenten* sind die maximalen stark zusammenhängenden Teilgraphen.

- 21.9 Beispiel.** Der Graph:



ist stark zusammenhängend.



Dieser Graph, wo der Weg von x nach y entfernt wurde, ist nicht stark zusammenhängend. Die starken Zusammenhangskomponenten sind y und der restliche Graph G' .

Im folgenden konstruieren wir einen Algorithmus zur Bestimmung solcher starker Zusammenhangskomponenten.

Daten: Digraph $G = (V, E)$

Ergebnis: Abbildung $comp: V \rightarrow \mathbb{N}$, welche die Zugehörigkeit zu einer starken Zusammenhangskomponente signalisiert.

- $R = \emptyset$
- $N = 0$
- **für** $v \in V$ **tue**
 - | **wenn** $v \notin R$ **dann**
 - | FirstVisit(v)
 - | **Ende**
- **Ende**
- $R = \emptyset$
- $K = 0$
- **für** $j \leftarrow |V|$ **bis** 1 **tue**
 - | **wenn** $\psi^{-1}(j) \notin R$ **dann**
 - | $K = K + 1$
 - | SecondVisit($\psi^{-1}(j)$)
 - | **Ende**
- **Ende**

Function FirstVisit(v)

- $R = R \cup \{v\}$
- **für** $w \in V \setminus R, (v, w) \in E$ **tue**
 - | FirstVisit(w)
- **Ende**
- $N = N + 1$
- $\psi(v) = N$
- $\psi^{-1}(N) = V$

zurück

Function SecondVisit(v)

- $R = R \cup \{w\}$
- **für** $w \in V \setminus R, (w, v) \in E$ **tue**
 - | SecondVisit(w)
- **Ende**
- $comp(v) = K$

zurück

21.10 Beispiel. Wir betrachten den Graph:

Der Startknoten v_1 für FirstVisit ergibt die Besuchsreihenfolge: v_1, v_7, v_2, v_4, v_5 . Die Tiefensuche mittels FirstVisit bricht für v_3 und v_6 direkt ab. Wir erhalten:

$$\begin{array}{lll} \psi(v_2) = 1 & \psi(v_7) = 4 & \psi(v_6) = 7 \\ \psi(v_5) = 2 & \psi(v_1) = 5 & \\ \psi(v_4) = 3 & \psi(v_3) = 6 & \end{array}$$

SecondVisit für $v_6 = \psi^{-1}(7)$ bricht sofort ab $\implies comp(v_6) = 1$

SecondVisit für $v_3 = \psi^{-1}(6)$ bricht sofort ab $\implies comp(v_3) = 2$

SecondVisit für $v_1 = \psi^{-1}(5)$ ergibt die Besuchsreihenfolge: $v_2, v_7 \implies comp(v_1) = 3, v \in \{v_1, v_2, v_7\}$

SecondVisit für $v_4 = \psi^{-1}(3)$ ergibt die Besuchsreihenfolge: $v_5 \implies comp(v_4) = 4$.

Demnach ergibt sich:

$$\{v_6\}, \{v_3\}, \{v_1, v_2, v_7\}, \{v_4, v_5\}$$

21.11 Satz. Algorithmus 13 identifiziert die starken Zusammenhangskomponenten eines Digraphen $G = (V, E)$ in linearem Aufwand $\mathcal{O}(|V| + |E|)$

Beweis. Aufwand: Analog zur Tiefensuche (Satz 20.5)

- Gleiche starke Zusammenhangskomponente \implies gleicher comp-Wert
Seien $v, w \in V$ Knoten in der gleichen, starken Zusammenhangskomponente
 - \implies Es gibt einen Weg von v nach w und umgekehrt.
 - \implies SecondVisit weist $comp(v) = comp(w)$ zu
- Gleicher comp-Wert \implies Gleiche starke Zusammenhangskomponente
Seien $v, w \in V$ mit $comp(v) = comp(w)$. Definiere $r(v)$ ist derjenige von v erreichbare Knoten, der den höchsten ψ -Wert hat.
Beobachte:
 - $comp(v) = comp(w) \implies v$ und w sind im gleichen, von SecondVisit erzeugten Subbaum. $\implies r(v) = r(w) =: r$ (d.h. r ist von v, w erreichbar)
 - $\psi(r) > \psi(v) \implies v$ wurde in FirstVisit vor r nummeriert. \implies Der von FirstVisit erzeugte Baum hat einen Weg von r nach v , d.h. v ist von r erreichbar.
 - Analog: w ist von r erreichbar. $\implies v$ ist über r von w aus erreichbar und umgekehrt.

□

21.12 Definition. Sei $G = (V, E)$ ein Digraph. Zieht man die starken Zusammenhangskomponenten zu einem Knoten zusammen, entsteht ein *kondensierter Graph*.

Eine *Nummerierung* $v = \{v_1, \dots, v_n\}$ der Knoten heißt *topologische Ordnung*, falls $(v_i, v_j) \in E$ nur, wenn $i < j$.

21.13 Lemma. Der Digraph $G = (V, E)$ besitzt eine topologische Ordnung genau dann, wenn er azyklisch ist.

Beweis. Übung □

21.14 Satz. Zu jedem Digraphen $G = (V, E)$ bestimmt Algorithmus 13 eine topologische Ordnung in linearem Aufwand $\mathcal{O}(|V| + |E|)$. Gibt es eine solche Ordnung nicht, so sagt uns das der Algorithmus ebenfalls in linearem Aufwand.

Beweis. Seien $V_i, V_j \subset V$ die (disjunkten) Knotenmengen zweier stabiler Zusammenhangskomponenten mit $\text{comp}(v_i) = i, \text{comp}(v_j) = j$ für $v_i \in V_i, v_j \in V_j$.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit: $i < j$

Annahme: Es gibt eine Kante $e = (v_j, v_i)$ mit $v_j \in V_j, v_i \in V_i$. *Beobacht:* In Second-Visit werden alle Knoten in V_i vor derjenigen in V_j zu R hinzugefügt. \Rightarrow

- Beim Überprüfen von $e = (v_j, v_i)$ in SecondVisit gilt: $v_i \in R, v_j \notin R$
- v_j wird zu R hinzugefügt, bevor K erhöht wird.
- $\text{comp}(v_i) = \text{comp}(v_j)$

Dies ist ein Widerspruch.

\Rightarrow Algorithmus 13 erzeugt eine topologische Ordnung, falls diese existiert.

Aus Lemma 21.13 folgt:

Es gibt genau dann eine topologische Ordnung auf G , falls G azyklisch ist.

\Leftrightarrow alle starken Zusammenhangskomponenten sind eindeutig.

\Leftrightarrow Am Ende des Algorithmus ist $K = |V|$ □

21.15 Bemerkung. Der Beweis zeigt, dass Algorithmus 13 auch benutzt werden kann, um in linearer Zeit zu überprüfen, ob ein Graph Zyklen hat.

22. Kürzeste Wege Probleme

22.16 Definition (gewichteter Graph). Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Eine *Gewichtsfunktion* für die Kanten von G ist eine Abbildung $w: E \rightarrow \mathbb{R}$. Ist $\pi = v_0, v_1, \dots, v_r$ ein Weg, so heißt

$$w(\pi) = \sum_{i=1}^{r-1} w(v_i, v_{i+1})$$

die *Weglänge* von π bezüglich w . Das Tripel $G = (V, E, w)$ heißt *gewichteter Graph*.

22.17 Definition. Sei $G = (V, E, w)$ ein gewichteter Graph und $v, \tilde{w} \in V$. Ein *kürzester Weg* von v nach \tilde{w} in G bezüglich w ist ein v - \tilde{w} -Weg π mit der Eigenschaft $w(\pi) \leq w(\pi')$ für alle anderen v - \tilde{w} -Wege π' . Die kürzeste Weglänge $\delta(v, \tilde{w})$ von v nach \tilde{w} ist definiert durch:

$$\delta(v, \tilde{w}) = \begin{cases} \min\{w(\pi) \mid \pi \text{ ist } v\text{-}\tilde{w}\text{-Weg}\} & , \text{ falls ein solcher Weg existiert} \\ \infty & , \text{ sonst} \end{cases}$$

22.18 Beispiel. Betrachte den gewichteten Graph $G = (V, E, w)$ mit

Mögliche Wege von v_3 nach v_1 sind:

$$\begin{array}{ll} \pi_1 = v_3, v_1 & \implies w(\pi_1) = 6 \\ \pi_2 = v_3, v_2, v_1 & \implies w(\pi_2) = 5 \\ \pi_3 = v_3, v_4, v_2, v_1 & \implies w(\pi_3) = 9 \end{array}$$

22.19 Notation. Wir werden im Folgenden nur Digraphen behandeln, da sich ungerichtete Graphen immer auch als gerichtete Graphen interpretieren lassen. Sei $G = (V, E, w)$ ein gewichteter Digraph.

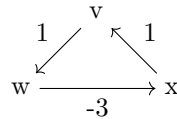
Wir unterscheiden drei verschiedene Varianten des *kürzeste-Wege-Problems*:

- a) Einzelpaar-kürzeste-Wege-Problem
Gegeben $v, u \in V$, suche einen kürzesten Weg von v nach u .
- b) Einzelquelle-kürzeste-Wege-Problem
Gegeben $v \in V$, suche einen kürzesten Weg von v zu allen $u \in \text{post}^*(v)$.
- c) Alle-Paare-kürzeste-Wege-Problem
Finde alle Paare $v, u \in V$ einen kürzesten v - u -Weg

Wir bemerken, dass das Problem c die Probleme a und b löst, daher betrachten wir im Folgenden nur Problem c.

Negative Gewichte sind zwar nach Definition 22.17 zugelassen, können aber Probleme bereiten:

22.20 Beispiel. Betrachte:



In diesem Graphen gibt es keinen kürzesten Weg.

$$\begin{aligned} w(v, w, x) &= -2 \\ w(v, w, x, v, w, x) &= -3 \end{aligned}$$

Man kann den Weg also immer weiter verlängern und der Weg wird immer kürzer.

22.21 Lemma. Sei $G = (V, E, w)$ ein gewichteter Digraph. Falls es in G keine Zyklen mit negativer Weglänge gibt, dann gibt es für $v, u \in V, u \in \text{post}^*(v)$ einen kürzesten Weg π mit:

$$\delta(v, u) = w(\pi) > -\infty$$

Beweis. Da es keine negativen Zyklen gibt, genügt es alle einfachen Wege von v nach u zu betrachten. Da $|V|$ und $|E|$ endlich sind, sind dies endlich viele, so dass π durch einen Minimierer gegeben ist. \square

22.22 Lemma. Sei $G = (V, E, w)$ ein gewichteter Digraph ohne negativen Zyklen. Ist $\pi = v_0, \dots, v_r$ ein kürzester Weg von v_0 nach v_r dann ist der Teilweg

$$\pi_{i,j} = v_i, \dots, v_j, 0 \leq i < j \leq r$$

ein kürzester Weg von v_i nach v_j .

Beweis. Angenommen: $\pi'_{i,j}$ ist ein kürzester Weg von v_i nach v_j mit $w(\pi'_{i,j}) < w(\pi_{i,j})$

$$\begin{aligned} \implies \pi' &= \pi_{0,i} \pi'_{i,j} \pi_{j,r} \text{ erfüllt:} \\ w(\pi') &= w(\pi_{0,i}) + w(\pi'_{i,j}) + w(\pi_{j,r}) \\ &< w(\pi_{0,i}) + w(\pi_{i,j}) + w(\pi_{j,r}) \\ &= w(\pi) \\ \implies w(\pi') &< w(\pi) \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch, da π kürzester Weg nach Annahme ist. \square

22.23 Lemma. Sei $G = (V, E, w)$ ein gewichteter Digraph ohne negative Zyklen und sei $\pi = v_0, v_1, \dots, v_r$ ein kürzester Weg von v_0 nach v_r . Dann gilt:

$$\delta(v_0, v_r) = \delta(v_0, v_{r-1}) + w(v_{r-1}, v_r)$$

Beweis. Aus Lemma 22.22 folgt:

- $\pi' = v_0, \dots, v_{r-1}$ ist ein kürzester Weg von v_0 nach v_{r-1}
- $\delta(v_0, v_{r-1}) = w(\pi')$
- $\delta(v_0, v_r) = w(\pi)$

$w(\pi)$ lässt sich umschreiben:

$$\begin{aligned} w(\pi) &= w(\pi') + w(v_{r-1}, v_r) \\ &= \delta(v_0, v_{r-1}) + w(v_{r-1}, v_r) \end{aligned}$$

\square

Daten: Gewichteter Graph $G = (V, E, w)$ mit nicht negativen Gewichten
Ergebnis: Kürzeste Wege von s nach $v \in \text{post}^*(s)$ samt Weglänge $l(v) = \delta(s, v)$

- $l(s) = 0$
 $l(v) = \infty, v \in V \setminus \{s\}$
 $R = \emptyset$
- Finde $u \in V \setminus R$ mit $l(u) = \min_{v \in V \setminus R} l(v)$
- $R = R \cup \{u\}$
- **für** $v \in V \setminus R$ **mit** $(u, v) \in E$ **tue**
 wenn $l(v) > l(u) + w(u, v)$ **dann**
 $l(v) = l(u) + w(u, v)$
 $p(v) = u$
 Ende
- **Ende**
- $R \neq V$ gehe zu 2.

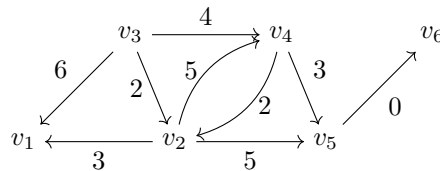
Algorithmus 14: Dijkstra Algorithmus

22.24 Bemerkung. Die kürzesten Wege im Output des Algorithmus sind durch die Abbildung $p: V \rightarrow V$ gegeben, denn

$$\pi = s, \dots, p(p(p(v))), p(p(v)), p(v), v$$

ist ein kürzester s - v -Weg.

22.25 Beispiel. Der Graph



mit Startknoten v_3 hat nach Ausführung von Algorithmus 14 folgende Ausgabe:

Tabelle 1.: Dijkstra

Iteration	$l(v_1), l(v_2), \dots, l(v_6)$						$u, l(u), p(u)$		
0	∞	∞	0	∞	∞	∞	v_3	0	—
1	6	2		4	∞	∞	v_2	2	v_3
2	5				7	∞	v_4	4	v_3
3						∞	v_1	5	v_2
4						∞	v_5	7	v_2
5						7	v_6	7	v_5

22.26 Satz. Der Algorithmus von Dijkstra 14 arbeitet korrekt, mit einer Laufzeit von $\mathcal{O}(n^2)$, $n = |V|$.

Beweis.

22.27 Notation. Schreibe in der k -ten Iteration $^{(k)}$ an alle Größen, die im Algorithmus vorkommen

Zeige: Bei jeder Ausführung von 2. gilt:

- a) $l^{(k)}(v) \leq l^{(k)}(y)$ für alle $v \in R^{(k)}, y \in V \setminus R^{(k)}$
- b) $l^{(k)}(v) = \delta(s, v)$ für alle $v \in R^{(k)}$
 $l^{(k)}(v) < \infty, v \neq s \implies$ Es existiert ein kürzester s - v -Weg mit Knoten in $R^{(k)}$ und letzter Kante $(p(v), v)$
- c) $v \in V \setminus R^{(k)} \implies l^{(k)}(v)$ ist die kürzeste Weglänge von s nach v im Teilgraphen mit Knoten $R^{(k)} \cup \{v\}$ in G
 $v \in V \setminus R^{(k)}, l^{(k)}(v) < \infty \implies p^{(k)}(v) \in R^{(k)}$ und $l^{(k)}(v) = l^{(k)}(p(v)) + w(p^{(k)}(v), v)$

Per vollständiger Induktion:

◇ IV $k = 0$ Trivialerweise erfüllt

◇ IS $k \rightarrow k + 1$ Sei u der in 2. ausgewählte Knoten.

a) Für $v \in R^{(k)}, y \in V \setminus R^{(k)}$ gilt:

$$\begin{aligned}
 l^{(k+1)}(v) &= l^{(k)}(v) \\
 &\leq l^{(k)}(u) \\
 &= \min_{u \in V \setminus R^{(k)}} l^{(k)}(u) \\
 &\leq l^{(k+1)}(y)
 \end{aligned}$$

Da $R^{(k+1)} = R^{(k)} \cup \{u\} \implies$ Behauptung a) für $k + 1$ gilt.

b) Wir müssen die Behauptung über die kürzeste Weglänge nur für u überprüfen.

c) für $k \implies l^{(k)}(u)$ ist die kürzeste Weglänge zum Weg π im Teilgraphen $R^{(k)} \cup \{u\}$.
zu Zeigen $l^{(k+1)}(u) = l^{(k)}(u) = w(\pi) = \delta(s, u)$ in G

Angenommen: Es gibt einen Weg π' in G mit mindestens einem Knoten $y \in V \setminus R^{(k)}$ und $w(\pi') < w(\pi)$

$$\pi' = s, v_1, \dots, v_{r-1}, y, v_{r+1}, \dots, v_{r+m}, u$$

$$\begin{aligned} \implies l^{(k)}(y) &\leq w(s, v_1, \dots, v_{r-1}, y) \\ &\leq w(\pi') \\ &< w(\pi) \\ &= l^{(k)}(u) \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch zu $l^{(k)}(u) = \min_{v \in V \setminus R^{(k)}} l^{(k)}(v)$
 $\implies b$ für $k+1$

c) Zeige, dass 3. und 4. die Aussage c) erhalten. Sei $v \in V \setminus R^{(k+1)}$ in 4.

$$\begin{aligned} \implies p^{(k+1)}(v) &= u \\ l^{(k+1)}(v) &= l^{(k+1)}(u) + w(u, v) \end{aligned}$$

c) für $k \implies$ Es gibt einen s-v-Weg im von $R^{(k+1)} \cup \{v\}$ aufgespannten Teilgraph $G'(v)$ in G , mit Länge $l^{(k+1)}(v) = l^{(k+1)}(u) + w(u, v)$

zu Zeigen Dieser Weg ist ein kürzester Weg in G

Angenommen: Für ein $v \in V \setminus R^{(k+1)}$ in 4. gibt es einen s-v-Weg π in $G'(v)$ mit $w(\pi) < l^{(k+1)}(v)$.

Beobachte: $l^{(k+1)}(v) \leq l^{(k)}(v)$

$\implies u$ muss π enthalten sein, da dies die einzige Veränderung zum k-ten Schritt ist und $l^{(k)}(v)$ nach c) im k-ten Schritt ein kürzester Weg in $R^{(k)} \cup \{u\}$ ist.

Sei x der Vorgänger von v in π .

$$\begin{aligned} l^{(k+1)}(v) &= l^{(k+1)}(x) + w(x, v) \\ &\leq l^{(k+1)}(u) + w(x, u) \\ &\leq w(\pi) \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch $\implies c)$ für $k+1$. Für $k=n$ impliziert b) die Behauptung.

Aufwand: $\mathcal{O}(n^2)$ ist trivial. □

22.28 Bemerkung. Clevere Implementierungen können den Dijkstra-Algorithmus 14 in $\mathcal{O}(m + n \log(n), n = |V|, m = |E|)$ durchführen.

Für die Verallgemeinerung für negative Gewichte betrachten wir folgend den Moore-Bellmann-Ford Algorithmus:

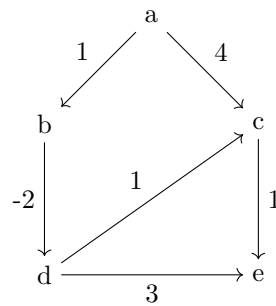
Daten: Gewichteter Digraph $G = (V, E, w)$ ohne negative Zyklen, Startknoten $s \in V$

Ergebnis: kürzeste Wege von s nach v , $v \in \text{post}^*(s)$ samt Weglänge
 $l(v) = \delta(s, v)$

- $l(s) = 0$
 $l(v) = \infty, v \in V \setminus \{s\}$
- **für** $e = (u, v) \in E$ **tue**
 - wenn** $l(v) > l(u) + w(u, v)$ **dann**
 - $l(v) = l(u) + w(u, v)$
 - $p(v) = u$
- Ende**
- Ende**

Algorithmus 15: Moore-Bellmann-Ford

22.29 Beispiel. Betrachte den Graphen:



mit Startknoten a.

Tabelle 2.: Iteration 1

Kante	$l(a), \dots, l(e)$					$p(b), \dots, p(e)$			
(a, b)	0	1	∞	∞	∞	a	-	-	-
(a, c)			4	∞	∞	a	-	-	
(b, d)			4	-1	∞	a		c	
(c, e)			4		5	a		c	
(d, c)			0		5	d		c	
(d, e)					2			d	

Tabelle 3.: Iteration 2

Kante	$l(a), \dots, l(e)$					$p(b), \dots, p(e)$			
(a, b)	0	1	0	-1	2	a	d	b	d
(a, c)									
(b, d)									
(c, e)									
(d, c)					1			c	
(d, e)									

Keine Veränderung mehr ab der 3. Iteration.

22.30 Satz. Der Moore-Bellman-Ford Algorithmus 15 arbeitet korrekt mit Aufwand $\mathcal{O}(m \cdot n)$, $m = |E|$, $n = |V|$.

Beweis. Bezeichne zu jedem Zeitpunkt:

$$R = \{v \in V \mid l(v) < \infty\}$$

$$F = \{(u, v) \in E \mid u = p(v)\}$$

Zeige zu erst:

- a) $l(v) \geq l(u) + w(u, v)$, $(u, v) \in E$
- b) (R, F) ist ein azyklischer Graph
- c) (R, F) ist ein gerichteter Baum mit Wurzel s , d.h jeder Knoten in R ist über genaue einen Weg von s aus erreichbar.

a) Bei $p(v) = u$ gilt:

$$l(v) = l(u) + w(u, v)$$

Danach wird $l(u)$ höchstens verkleinert.

b) Angenommen: Es gibt einen Zyklus $\pi = v_0, v_1, \dots, v_{r-1}, v_r$ mit $v_0 = v_r$
 Ohne Beschränkung der Allgemeinheit entstanden durch Setzen von $p(v_r) = v_{r-1}$
 \implies Davor galt:

$$l(v_0) = l(v_r) > l(v_{r-1}) + w(v_{r-1}, v_r)$$

Wegen a) gilt:

$$l(v_{i+1}) \geq l(v_i) + w(v_i, v_{i+1}), i = 0, \dots, r-2$$

$$\begin{aligned} \implies \sum_{i=1}^r w(v_{i-1}, v_i) &= \left(\sum_{i=1}^{r-1} w(v_{i-1}, v_i) \right) + w(v_{r-1}, v_r) \\ &< \sum_{i=1}^r (l(v_i) - l(v_{i-1})) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Widerspruch dazu, dass es keine negativen Zyklen gibt.

c) $x \in R \setminus \{s\} \implies p(x) = R$ Gehe von Blättern zu Wurzel dann folgt c)
 $a, b, c \implies l(y)$ ist mindestens die Länge des (eindeutigen) s-y-Wegs in (R, F)
 Behauptung: Nach k Iterationen ist $l(y)$ auch die maximale Länge eines kürzesten s-y-Wegs in G mit maximal k Kanten.

Zeige durch Induktion:

◇ IV $k = 1$ klar

◇ $k - 1 \rightarrow k$ Sei

$$\pi = s, v_1, \dots, v_r, x, y$$

ein kürzester s-y-Weg in G mit höchstens k Kanten und $r \leq k - 2$.

Dann folgt aus Lemma 22.23:

- $\pi' = s, v_1, \dots, v_r, x$ ist ein kürzester s-k-Weg mit k-1 Kanten
- $l(x) \leq w(\pi')$
-

$$\begin{aligned} l(y) &\leq l(x) + w(x, y) \\ &\leq w(\pi') + w(x, y) \\ &= w(\pi) \end{aligned}$$

Wir haben gezeigt: $w(\pi) = \delta(s, y)$, wobei π der eindeutige Weg in (R, T) mit maximal k Kanten.

Daraus folgt die Behauptung.

Aufwand: Trivial. □

Die letzte Frage dieses Kapitels: Algorithmus für das Alle-Paare-kürzeste-Wege Problem lässt eine naive Antwort zu. Diese lautet: Wende Dijkstra oder Moore-Belmann-Ford auf jede Quelle an. Das Resultat ist jedoch, dass man keine brauchbaren Datenstrukturen mehr hat. Demnach gibt es folgenden Algorithmus:
Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei $V = \{1, \dots, n\}$

Daten: Gewichteter Digraph $G = (V, E, w)$, $V = \{1, \dots, n\}$ ohne negative Zyklen

Ergebnis: Matrizen $[l_{i,j}]_{i,j=1}^n, [p_{i,j}]_{i,j=1}^n$

Algorithmus 16: Floyd-Warshall

22.31 Satz. Der Algorithmus 16 arbeitet korrekt, mit Aufwand $\mathcal{O}(n^3)$, $n = |V|$

Beweis.

22.32 Notation. Im Iterationsschritt j_0 ist $l_{ik}^{(j_0)}$ die Länge eines kürzesten i-k-Weges im von $\{1, \dots, j_0\}$ aufgespannten Teilgraphen mit Endkante $(p_{ik}^{(j_0)}, k)$. □

23. Netzwerkflussprobleme

23.33 Beispiel. Ausgehend von einer Bananenplantage s sollen alle geernteten Bananen zum Lagerhaus t transportiert werden. Für den Transport stehen Straßen mit r_1, \dots, r_p $\frac{kg}{n}$ Transportkapazität zu den Seehäfen A_1, \dots, A_p zu Verfügung. Von den Zielhäfen B_1, \dots, B_q stehen Transportkapazitäten von d_1, \dots, d_q $\frac{kg}{n}$ zum Supermarkt t bereit. Die Transportkapazität zwischen den Seehäfen werden mit $c(A_i, A_j)$, $1 \leq i \leq p$, $1 \leq j \leq p$ bezeichnet.

Fragen:

- Ist es möglich, alle Transportkapazitäten auszuschöpfen?
- Falls nein, was ist die maximal mögliche Transportkapazität?
- Wie sollen die Bananenladungen aufgeteilt werden?

Konstruiere einen gewichteten Digraph $G = (V, E, w)$ mit

- $V = \{s, A_1, \dots, A_p, B_1, \dots, B_q, t\}$
- $E = \{(s, A_i), (A_i, B_j), (B_j, t); 1 \leq i \leq p, 1 \leq j \leq q\}$
- $w(e) = \begin{cases} r_i & , e = (s, A_i) \\ c(A_i, B_j) & , e = (A_i, B_j) \\ d_j & , e = (B_j, t) \end{cases}$

23.34 Definition. Ein *Netzwerk* ist ein Tupel $N = (V, E, c, s, t)$ bestehend aus

- einem gewichteten Digraphen $G = (V, E, c)$
- einer *Kapazitätsfunktion* $c: E \rightarrow R_{\geq 0}$
- einer Quelle $s \in V$ mit $pre(s) = \emptyset$
- einer Senke $t \in V$ mit $post(t) = \emptyset$

Ein Fluss $f: E \rightarrow R_{\geq 0}$ ist eine Funktion, die folgende Bedingungen erfüllt:

a) *Kapazitätsbedingung:*

$$f(v, w) \leq c(v, w)$$

b) *Kirchhoffsches Gesetz:*

$$\sum_{u \in pre(v)} f(u, v) = \sum_{w \in post(v)} f(v, w)$$

für alle $v \in V \setminus \{s, t\}$.

Der *Wert* des Flusses ist:

$$flow(f) = \sum_{w \in post(s)} f(s, w)$$

Der *maximale Fluss* von N wird bezeichnet als:

$$MaxFlow(N) = \max\{flow(f) \mid f \text{ ist Fluss für } N\}$$

Eine Flussfunktion f wird *optimal* genannt, falls

$$flow(f) = MaxFlow(N)$$

ist.

Ein *Schnitt* für N ist eine Knotenmenge $S \subset V$ mit $s \in S, t \notin S$.

Die *Kapazität* eines Schnittes ist gegeben durch:

$$cap(S) = \sum_{v \in S, w \in post(v) \setminus S} c(v, w)$$

Die *minimale Schnittkapazität* von N ist:

$$MinCut(N) = \min\{cap(S) \mid S \text{ ist Schnitt für } N\}$$

23.35 Lemma. Sei S ein Schnitt für $N = (V, E, c, s, t)$. Dann gilt für jeden Fluss f , dass

$$\begin{aligned} flow(f) &= \sum_{w \in post(v) \setminus S} f(v, w) - \sum_{u \in pre(v)} f(u, v) \\ flow(f) &\leq cap(S) \end{aligned}$$

Beweis. Rechne:

$$\begin{aligned}
 \text{flow}(f) &= \sum_{w \in \text{post}(s)} f(s, w) \\
 &= \sum_{v \in S} \left(\sum_{w \in \text{post}(v)} f(v, w) - \sum_{u \in \text{pre}(v)} f(u, v) \right) \\
 &= \sum_{w \in \text{post}(v)} f(v, w) - \sum_{u \in \text{pre}(v) \setminus S} f(u, v)
 \end{aligned}$$

Für die nächste Behauptung können wir ebenfalls nachrechnen:

$$\begin{aligned}
 \text{flow}(f) &= \sum_{w \in \text{post}(v) \setminus S} f(v, w) - \sum_{u \in \text{pre}(v) \setminus S} f(u, v) \\
 &\leq \sum_{w \in \text{post}(v) \setminus S} c(v, w) \\
 &= \text{cap}(S)
 \end{aligned}$$

□

23.36 Satz (Max-Flow-Min-Cut Theorem). Sei $N = (V, E, c, s, t)$ ein Netzwerk, dann gilt:

$$\text{MaxFlow}(N) = \text{MinCut}(N)$$

Beweis. Zu zeigen: Es gibt einen Schnitt für den die Gleichheit gilt.

Idee: Gegeben sei ein Fluss f mit $\text{flow}(f) = \text{MaxFlow}(N)$, konstruiere einen Schnitt S mit $\text{flow}(f) = \text{cap}(S)$.

Daten: Netzwerk N , Fluss f mit $\text{flow}(f) = \text{MaxFlow}(N)$.

Ergebnis: S mit $\text{flow}(f) = \text{cap}(S)$

• $S = \{s\}$

• solange $x \in S, y \in V \setminus S$ existieren mit $\begin{cases} f(x, y) < c(x, y) & , \text{ falls } (x, y) \in E \\ 0 < f(y, x) & , \text{ falls } (y, x) \in E \end{cases}$

dann **true**

| $S = S \cup \{y\}$

Ende

Behauptung Das Resultat S des Algorithmus ist ein Schnitt von N

Beweis. Zu Zeigen: $t \notin S$

Angenommen: $t \in S, v_r = t$

\implies Es gibt $v_{r-1} \in S$ mit $f(v_{r-1}, v_r) < c(v_{r-1}, v_r)$.

Iterativ: Es gibt einen ungerichteten Weg π mit $v_0 = s, v_r = t$

Definiere für $i = 0, \dots, r-1$:

$$\varepsilon_i = \begin{cases} c(e) - f(e) & , \text{ falls } e = (v_i, v_{i+1}) \in E, e^{-1} = (v_{i+1}, v_i) \notin E \\ f(e^{-1}) & , \text{ falls } e \notin E, e^{-1} \in E \\ \max\{c(e) - f(e), f(e^{-1})\} & , \text{ falls } e \in E, e^{-1} \in E \end{cases}$$

Beobachte: $\varepsilon_i > 0$

$$\varepsilon = \min_{\leq i \leq r-1} \varepsilon_i > 0 \quad (23.1)$$

Zeige: Es gib einen Fluss f^* in N mit $flow(f^*) = flow(f) + \varepsilon$

Konstruiere:

$$f^*(e) = \begin{cases} f(e) + \varepsilon & , \text{ falls } e = (v_i, v_{i+1}) \in E, e^{-1} \notin E \\ f(e) - \varepsilon & , \text{ falls } e = (v_{i+1}, v_i) \in E, e^{-1} \notin E \\ f(e) + \varepsilon & , \text{ falls } e = (v_i, v_{i+1}), e^{-1} \in E \text{ und } c(e) - f(e) > f(e^{-1}) \\ f(e) - \varepsilon & , \text{ falls } e = (v_{i+1}, v_i), e^{-1} \in E \text{ und } c(e) - f(e) \leq f(e^{-1}) \\ f(e) & , \text{ sonst} \end{cases}$$

Bemerke:

- Kapazitätsbedingung bleibt erfüllt.
- Kirchffsches Gesetz bleibt erfüllt, da f^* weiterhin ein Fluss ist.

Das heißt:

$$\begin{aligned} flow(f^*) &= \sum_{v \in post(s)} f^*(s, v) \\ &= \sum_{v \in pre(t)} f^*(v, t) \\ &= \sum_{v \in pre(t) \setminus \{v_{r-1}\}} f^*(v, t) + f^*(v_{r-1}, t) \\ &= flow(f) + \varepsilon \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch dazu, dass $flow(f) = MaxFlow(N) \implies S$ ist ein Schnitt. \square

S ist ein Schnitt in N mit:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= c(x, y) \\ f(y, x) &= 0 \end{aligned}$$

für alle $x \in S, y \in V \setminus S \implies flow(f) = cap(S)$ nach Kirchoff. \square

Wir formalisieren nun weiter:

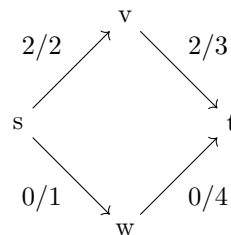
23.37 Definition. Sei f ein Fluss im Netzwerk $N = (V, E, c, s, t)$. Eine Kante $e = (x, y) \in E$ heißt *Vorwärtskante*, falls $f(e) < c(e)$. Eine Kante $e^{-1}(y, x) \in E$ heißt *Rückwärtskante*, falls $f(e^{-1}) > 0$. Der *Restgraph* für f ist der Digraph $G' = (V, E')$ mit

$$E' = \{(x, y) \in V \times V \mid (x, y) \text{ ist Vorwärts- oder Rückwärts-Kante}\}$$

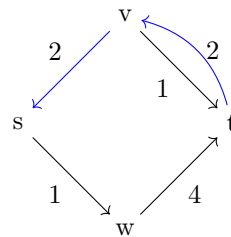
$c(e) - f(e)$ bzw. $f(e^{-1})$ heißen *Restkapazitäten*. Ein *augmentierender Weg* ist ein s - t -Weg im Restgraphen.

Im vorherigen Beweis haben wir einen solchen augmentierenden Weg konstruiert.

23.38 Beispiel. Betrachte



Der Restgraph mit Restkapazitäten ist:



Blau: Rückwärtskante, Rot: Vorwärtskante

Der Beweis von Satz 23.36 gibt uns außerdem einen Algorithmus, wie wir, für einen nicht-optimalen Fluss, ein Fluss mit höheren Wert finden können. Idee: Benutze dies um einen optimalen Fluss zu finden.

Daten: Netzwerk $N = (V, E, c, s, t)$
Ergebnis: Fluss f mit $\text{flow}(f) = \text{MaxFlow}(N)$

- $f(e) = 0, e \in E$
- Suche einen augmentierenden Weg von s nach t
- **wenn** *keiner existiert* **dann**
| stop
- **Ende**
- Berechne ε (23.1)
- Augmentiere f um ε , gehe zu 2

Algorithmus 17: Ford-Fulkerson

23.39 Bemerkung. Im Falle von irrationalen Kapazitäten muss der Algorithmus nicht notwendigerweise terminieren (Beweis durch Gegenbeispiel)

23.40 Satz (Integral-Flow-Theorem). Sei $N = (V, E, c, s, t)$ ein Netzwerk mit ganzzahligen Kapazitäten. Dann terminiert der Algorithmus 18 nach maximal $\sum_{e \in E} c(e)$ Augmentierungsschritten mit einem ganzzahligen, optimalen Fluss.

Beweis. Betrachte:

Ganzzahlig: Wir starten mit $f(e) = 0, e \in E$. Die Restkapazitäten im Algorithmus und somit auch ε sind zu jedem Zeitpunkt ganzzahlig.

Optimal: Der Algorithmus terminiert, falls kein augmentierender Weg mehr gefunden werden kann. Der Beweis des Max-Flow-Min-Cut-Theorem zeigt, dass dies den maximalen Fluss impliziert.

Anzahl Schritte Im schlimmsten Fall wird pro Iteration der Fluss von genau einer Kante um 1 erhöht \implies Behauptung \square

Es gibt eine Möglichkeit, die Laufzeit des Algorithmus zu verbessern, indem man immer den kürzesten augmentierenden Weg wählt. Dies bringt uns zum nächsten Algorithmus:

Daten: Netzwerk $N = (V, E, c, s, t)$

Ergebnis: Fluss f mit $\text{flow}(f) = \text{MaxFlow}(N)$

- $f(e) = 0, e \in E$
- Suche einen kürzesten augmentierenden Weg von s nach t
- **wenn keiner existiert dann**
| stop
- **Ende**
- Berechne ε (23.1)
- Augmentiere f um ε und gehe zu 2

Algorithmus 18: Edmonds-Karp

23.41 Beispiel. Betrachte

23.42 Lemma. Sei $(f_0, \pi_0), (f_1, \pi_1) \dots$ die Folge von Flüssen f_i mit zugehörigen augmentierenden Weg π_i , die vom Edmonds-Karps-Algorithmus 19 erzeugt wird. Dann gilt:

$$|\pi_i| \leq |\pi_{i+1}| \text{ für alle } i$$

und falls $e = (v, w)$ in π_i und $e^{-1} = (w, v)$ in $\pi_j, i < j$ dann gilt:

$$|\pi_i| + 2 \leq |\pi_j|$$

Beweis. Sei $l_i(x, y)$ die Länge des kürzesten x-y-Wegs im Restgraphen von $f_i \implies |\pi_i| = e_i(s, t)$

Behauptung 1 $l_{i+1}(s, v) \geq l_i(s, v)$ für alle $v \in V$

Falls $l_{i+1}(s, v) = \infty$ ist Behauptung 1 trivial.

Sonst: v ist von s im Restgraphen von f_{i+1} erreichbar, d.h.

$$\infty > l_{i+1}(s, v) = r$$

Sei also $\pi = s, v_1, \dots, v_r$ ein kürzester Weg von s nach $v = v_r$ im Restgraphen von f_{i+1} .

Behauptung 2 $l_i(s, v_{j+1}) \leq l_i(s, v_j) + 1, 1 \leq j < r$

Beweis. Behauptung 2

- *Fall 1* (v_j, v_{j+1}) hat eine Kante im Restgraphen $f_i \rightarrow$ trivial
- *Fall 2* $(v_j, v_{j+1}) = e$ ist keine Kante im Restgraphen von f_i .
 $\implies e^{-1} = (v_{j+1}, v_j)$ ist Kante im Restgraphen von f_i
 \implies Der Flusswert von e^{-1} muss sich von f_i zu f_{i+1} verändert haben.
 $\implies (v_{j+1}, v_j)$ liegt auf π_i
 $\implies l_i(s, v_{j+1}) = l_i(s, v_j) - 1 \leq l_i(s, v_j) + 1$

□

Beweis. Behauptung 1. Rechne:

$$\begin{aligned} l_i(s, v) &= l_i(s, v_r) \\ &\leq l_i(s, v_{r-1}) + 1 \\ &\leq \dots \\ &\leq l_i(s, s) + r \\ &= l_{i+1}(s, v) \end{aligned}$$

Behauptung 1 impliziert 1. mit $v = t$.

□

Behauptung 3 $l_{i+1}(v, t) \geq l_i(v, t)$ für alle i

Beweis Analog zu Behauptung 1.

Nun können wir alles zusammenführen und rechnen:

$$\begin{aligned} |\pi_j| &= l_j(s, t) \\ &= l_j(s, w) + 1 + l_j(v, t) \\ &\geq l_i(s, w) + 1 + l_i(v, t) \\ &= l_i(s, v) + l_i(v, t) + 2 \\ &= |\pi_i| + 2 \end{aligned}$$

□

23.43 Satz. Der Algorithmus von Edmonds-Karp 19 terminiert nach höchstens $\frac{m \cdot n}{2}$ Augmentierungsschritten, $m = |E|, n = |V|$.

Beweis. Sei $(f_0, \pi_0), (f_1, \pi_1), \dots$ die vom Algorithmus erzeugte Folge von Flussfunktionen f_i und zugehörigen augmentierenden Wegen π_i im Restgraphen von f_i .

Beobachte 1: In jedem Augmentierungsschritt wird mindestens eine Kante $e \in (v, w)$ in π_i voll ausgeschöpft:

- e Vorwärtskante im Restgraph zu f_i

$$f_i(e) < c(e) \rightarrow f_{i+1}(e) = c(e)$$

- e Rückwärtskante im Restgraph zu f_i

$$f_i(e) > 0 \rightarrow f_{i+1}(e) = 0$$

$\implies e$ ist im $i + 1$ Schritt nicht im Restgraph.

Beobachte 2: In Augmentierungsschritt $f_k \rightarrow f_{k+1}$ kann e nur in π_k vorkommen und voll ausgeschöpft werden, falls $e^{-1} = (w, v)$ im Weg $\pi_j, i < j < k$ vorgekommen ist.

$$\implies |\pi_i| \leq |\pi_j| - 2 \leq |\pi_k| - 4$$

Also: Falls e in $\pi_{i_0}, \dots, \pi_{i_e}$ voll ausgeschöpft wird, gibt es j_0, \dots, j_{e-1} so, dass

- $i_0 < j_0 < i_1 < j_1 < \dots < j_{e-1} < i_e$
- e^{-1} kommt in $\pi_{j_0}, \dots, \pi_{j_{e-1}}$ vor
- $1 \leq |\pi_{i_0}| \leq \dots \leq |\pi_{i_k}| - 4l$

Beobachte: π_{i_k} ist eine kürzester Weg im Restgraphen von f_{i_k}

$\implies \pi_{i_k}$ ist einfach

$\implies |\pi_{i_k}| < n$

$\implies l < \frac{n}{4}$ für jede Kante

\implies maximal $2m \frac{n}{4} = \frac{m \cdot n}{2}$ Augmentierungsschritte

□

23.44 Bemerkung. Dies beweist die Existenz einer Lösung des Netzwerkflussproblems für Kapazitäten in $R_{\geq 0}$.

23.45 Korollar. Für $m = |E|, n = |V|$, ist der Aufwand des Edmonds-Karp Algorithmus $\mathcal{O}(m^2 n)$.

Beweis. Ein kürzeste-Wege-Problem pro Schritt lösbar in $\mathcal{O}(m)$ mit Breitensuche. □

Numerische Lösung linearer Gleichungssysteme

Motivation

Für $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ bezeichnen wir \mathbb{K}^n den Vektorraum der \mathbb{K} -wertigen Vektoren

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, x_i \in \mathbb{K}, i = 1, \dots, n$$

und mit $\mathbb{K}^{m \times n}$ den Vektorraum der \mathbb{K} -wertigen Matrizen

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix}, a_{i,j} \in \mathbb{K}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$$

In vielen Anwendungen in Physik, Ökonomie, Life Sciences, Informatik, etc. müssen lineare Gleichungssysteme gelöst werden, also System der Form:

$$Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, x, b \in \mathbb{R}^n$$

Hierbei ist n oft sehr groß.

24. Vektoren- und Matrixnormen

Im folgendem werden wir uns damit beschäftigen, ob lineare Gleichungssysteme gut oder schlecht konditioniert sind, d.h kann man stabile Algorithmen zur Lösung solcher Systeme zur Lösung angeben.

24.1 Definition. Sei X ein \mathbb{K} -Vektorraum. Eine Abbildung $\|\bullet\|: X \rightarrow (0, \infty)$ heißt *Norm* auf X , falls:

- a) $\|x\| > 0$ für alle $x \in X \setminus \{0\}$
- b) $\|\alpha \cdot x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$ für alle $\alpha \in \mathbb{R}, x \in X$
- c) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, für alle $x, y \in X$

24.2 Bemerkung. Jede Norm induziert auch einen Distanzbegriff, den durch die Norm induzierte Metrik

$$\text{dist}(x, y) = \|x - y\|$$

Wegen $x = x - 0$ kann $\|x\|$ deshalb als Distanz zum Nullpunkt aufgefasst werden, welche von der gewählten Norm abhängt.

24.3 Beispiel. Normen:

- Für $X = \mathbb{K}^n$
 - Betragssummennorm: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
 - Euklidische Norm: $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$
 - Maximumsnorm: $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$
 - Schatten p-Norm- $\|x\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i|^p}$
- Für $X = \mathbb{K}^{m \times n}$
 - Spaltensummennorm: $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{i,j}|$
 - Zeilensummennorm: $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{i,j}|$
 - Frobeniusnorm $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{i,j}|^2}$

Für $A = \begin{bmatrix} 2 & -3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ gilt:

$$\|A\|_1 = 4, \|A\|_\infty = 5, \|A\|_F = \sqrt{15}$$

24.4 Satz. Alle Normen auf \mathbb{K}^n sind äquivalent, d.h für zwei Normen $\|\cdot\|_a, \|\cdot\|_b$ auf \mathbb{K}^n gilt:

$$\underline{c}\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq \bar{c}\|x\|_a$$

für $\underline{c}, \bar{c} > 0$, unabhängig von x .

Beweis. Es genügt die Behauptung für $\|\cdot\|_a = \|\cdot\|_\infty$ und $\|\cdot\|_b$ beliebig zu zeigen. Wegen:

$$x - y = \sum_{i=1}^n (x_i - y_i) e_i$$

gilt:

$$\begin{aligned}
 ||x| - |y|| &\leq \|x - y\| \\
 &= \left\| \sum_{i=1}^n (x_i - y_i) e_i \right\| \\
 &\leq \sum_{i=1}^n \|(x_i - y_i) e_i\| \\
 &= \sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \|e_i\| \\
 &\leq \|x - y\|_\infty \sum_{i=1}^n \|e_i\|
 \end{aligned}$$

Also ist $\|\bullet\|: \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine Lipschitz-stetige Funktion mit Konstante 1.
 $\Rightarrow \|\bullet\|$ nimmt auf jeder kompakten Menge sowohl Minimum \underline{c} als auch Maximum \bar{c} an. Insbesondere auch auf:

$$S^{n-1} = \{x \in \mathbb{K}^n : \|x\|_\infty = 1\}$$

$$\Rightarrow 0 < \underline{c} \leq \bar{c}$$

$$\Rightarrow \underline{c} \leq \left\| \frac{x}{\|x\|_\infty} \right\| \leq \bar{c}$$

$$\Rightarrow \underline{c}\|x\|_\infty \leq \|x\| \leq \bar{c}\|x\|_\infty$$

□

24.5 Korollar. Analog für Matrizen.

24.6 Beispiel. Für $x \in \mathbb{K}^n$

$$\|x\|_\infty^2 = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \leq n \max |x_i|^2 = n \cdot \|x\|_\infty^2$$

$$\Rightarrow \|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\|_\infty$$

Die deutet darauf hin, dass im Unendlichdimensionalen nicht alle Normen äquivalent sind.

Da Matrizen miteinander multipliziert werden können, können Normen auf Matrizen spezielle Eigenschaften haben, die diese Eigenschaft widerspiegeln.

24.7 Definition. Eine Matrixnorm $\|\bullet\|_M$ heißt *submultiplikativ*, falls

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

für alle $A, B \in \mathbb{K}^{n \times n}$.

Eine Matrixnorm $\|\cdot\|_M$ auf $\mathbb{K}^{n \times n}$ heißt *verträglich* mit einer Vektornorm $\|\cdot\|_V$ auf \mathbb{K}^n , falls:

$$\|Ax\|_V \leq \|A\|_M \cdot \|x\|_V$$

für alle $A \in \mathbb{K}^{n \times n}, x \in \mathbb{K}^n$.

24.8 Beispiel. • $\|A\| = \max |a_{i,j}|$ ist nicht submultiplikativ auf $\mathbb{K}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \implies \|A\| = 1$$

jedoch

$$A^2 = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \implies \|A^2\| = 2 \neq 1 = \|A\|^2$$

- Die Frobenius Norm ist submultiplikativ und mit der Euklidischen Norm verträglich (Übung)

24.9 Definition. Sei $\|\cdot\|_V$ eine Vektornorm auf \mathbb{K}^n , dann ist

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_V}{\|x\|_V} = \max \|Ax\|_V$$

eine Norm auf $\mathbb{K}^{n \times n}$, die von $\|\cdot\|_V$ induzierte Matrixnorm.

24.10 Beispiel. Die Spaltensummennorm ist von $\|\cdot\|_1$ und die Zeilensummennorm ist von $\|\cdot\|_\infty$ induziert.

24.11 Lemma. Die von $\|\cdot\|_V$ induzierte Matrixnorm ist submultiplikativ und ist mit $\|\cdot\|_V$ verträglich. Ist $\|\cdot\|_M$ eine mit $\|\cdot\|_V$ verträgliche Matrixnorm so gilt:

$$\|A\| \leq \|A\|_M$$

für alle $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$.

Beweis. Unterteile:

Submultiplikativität $A = 0$ oder $B = 0 \implies$ klar.

Seien $A, B \neq 0$:

$$\begin{aligned} \|AB\| &= \sup_{x \neq 0} \frac{\|ABx\|_V}{\|x\|_V} \\ &= \sup_{Bx \neq 0} \frac{\|ABx\|_V}{\|x\|_V} \\ &= \sup_{Bx \neq 0} \left(\frac{\|ABx\|_V}{\|x\|_V} \frac{\|Bx\|_V}{\|Bx\|_V} \right) \\ &\leq \left(\sup_{Bx \neq 0} \frac{\|ABx\|_V}{\|x\|_V} \right) \left(\sup_{Bx \neq 0} \frac{\|Bx\|_V}{\|x\|_V} \right) \\ &= \|A\| \cdot \|B\| \end{aligned}$$

Verträglichkeit $A = 0$ oder $x = 0$ klar.

Seien $A \neq 0, x \neq 0$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\|Ax\|_V}{\|x\|_V} &\leq \sup \frac{\|Ax\|_V}{\|x\|_V} = \|A\| \\ &= \text{Behauptung.} \end{aligned}$$

Rechne nun:

$$\|A\| = \sup \frac{\|Ax\|_V}{\|x\|_V} \leq \|A\|_M$$

da $\|Ax\|_V \leq \|A\|_M \|x\|_v$

□

24.12 Bemerkung. Mit den offensichtlichen Modifikationen gelten die Definitionen über Submultiplikativität und Verträglichkeit auch für rechteckige Matrizen.

25. Kondition linearer Gleichungssysteme

25.13 Wiederholung. Die Kondition beschreibt, wie sehr Fehler in den Eingangsdaten eines Problems verstärkt oder gedämpft werden und sich auf einen Fehler der Ausgangsdaten übertragen.

Zum Lösen von $Ax = b$, A invertierbar, bezeichnen wir Δb als einen Eingangsfehler in b .

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

Für ein verträgliches Matrix-Vektorraum-Paar gilt dann:

$$\|\Delta x\| = \|A^{-1}\Delta b\| \leq \|A^{-1}\| \|\Delta b\|$$

und

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta b\|}{\|x\|} \leq \|A^{-1}\| \|A\| \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

25.14 Definition. Der Faktor

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

wird als *Kondition* der Matrix A bezüglich der Matrixnorm $\|\bullet\|_M$ bezeichnet.

25.15 Beispiel. Betrachte

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-3} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow A^{-1} \approx \begin{bmatrix} -1.001 & 1.001 \\ 1.001 & -0.001 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \|A\|_\infty = 2$$

$$\|A^{-1}\|_\infty \approx 2$$

$$\Rightarrow \text{cond}_\infty(A) \approx 4$$

A ist also bezüglich $\|\bullet\|_\infty$ gut konditioniert.

26. LR-Zerlegung

Man betrachte das Lösen von linearen Gleichungssystemen

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \dots & a_{n,n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

mittels Gauss-Elimination. Im i-ten Schritt:

$$\left[\begin{array}{cccccc|c} [cccc|c]* & \dots & \dots & \dots & * & * & \\ 0 & * & \dots & \dots & * & * & \\ \vdots & 0 & a_{i,i}^{(i)} & \dots & a_{i,n}^{(i)} & b_i^{(i)} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & a_{n,i}^{(i)} & \dots & a_{n,n}^{(i)} & b_n^{(i)} & \end{array} \right] \begin{array}{l} | \cdot (-\tau_{i+1}^{(i)}) \\ \vdots \\ \leftarrow + \\ \vdots \\ \leftarrow + \end{array} \begin{array}{l} | \cdot (-\tau_n^{(i)}) \\ \vdots \\ \leftarrow + \end{array} \quad \tau_j^{(i)} = \frac{a_{j,i}^{(i)}}{a_{i,i}^{(i)}}$$

Die Elimination im i-ten Schritt lässt sich als Matrix-Matrix-Produkt darstellen:

$$L_i[A_i|b_i] = [A_{i+1}|b_{i+1}]$$

wobei

$$L_i = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & -\tau_{i+1}^{(i)} & & 1 \\ & & -\tau_n^{(i)} & & 1 \end{bmatrix}$$

In der Matrix-Schreibweise ist der Gauss-Algorithmus also als

$$L_{n-1} \cdot L_{n-2} \cdot \dots \cdot L_1[A|b] = [A_n|b_n] = [R|c] = \begin{bmatrix} * & \dots & * \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & * \end{bmatrix}$$

darstellbar, wobei R eine *obere Dreiecksmatrix* ist.

Insbesondere folgt aus

$$L_{n-1} \cdot \dots \cdot L_1 A = R,$$

dass

$$A = L_1^{-1} \cdot \dots \cdot L_{n-1}^{-1} R = LR$$

ist.

26.16 Lemma. Es gilt:

$$\text{a) } L_i = I - l_i e_i^t = I - \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tau_{i+1}^{(i)} \\ \vdots \\ \tau_n^{(i)} \end{bmatrix}$$

$$\text{b) } L_i^{-1} = I + l_i e_i^t = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -\tau_{i+1}^{(i)} & 1 \\ & & -\tau_n^{(i)} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{c) } L = I + l_1 e_1^t + l_2^t e_2 + \dots + l_{n-1} e_{n-1}^t = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \tau_2^{(1)} & 1 & & & \\ \tau_3^{(1)} & \tau_3^{(2)} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \tau_n^{(1)} & \tau_n^{(2)} & \dots & \tau_n^{n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

Beweis. Nacheinander:

a) Durch hinschreiben.

b) Rechne:

$$(I - l_i e_i^t)(I + l_i e_i^t) = [\dots 1 \dots] \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix} = 0$$

c) Zeige per Induktion über i, dass: $L_1^{-1} \dots L_i^{-1} = I + l_1 e_1^t + \dots + l_i e_i^t$

◇ IV $i \equiv 1$ aus b.

◇ IS $i \rightarrow i+1$

$$\begin{aligned} L_1^{-1} \dots L_i^{-1} L_{i+1}^{-1} &= (I + l_1 e_1^t + \dots + l_i e_i^t)(I + l_{i+1} e_{i+1}^t) \\ &= I + l_1 e_1^t + l_2 e_2^t + \dots + l_i e_i^t + l_{i+1} e_{i+1}^t \end{aligned}$$

□

Wir können L also direkt aus den im Gauss-Algorithmus vorkommenden Größen zusammensetzen. Der Algorithmus bricht ab, wenn eins der Pivotelemente null wird.

26.17 Satz. Falls kein Pivotelement null wird, bestimmt der Gauss-Algorithmus neben der Lösung x von $Ax = b$ eine LR-Zerlegung $A = LR$ in eine obere Dreiecksmatrix R und eine normierte, untere Dreiecksmatrix L .

26.18 Beispiel. Betrachte den Gauss-Algorithmus angewandt auf:

$$\begin{aligned}
 A &= \left[\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 4 & 7 & -2 & -3 \\ 2 & 5 & 8 & \leftarrow + & \\ 3 & 6 & 10 & \leftarrow + & \end{array} \right] \\
 &\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 4 & 7 & -2 & -3 \\ 0 & -3 & -6 & \leftarrow + & \\ 0 & -6 & -11 & \leftarrow + & \end{array} \right] \\
 &\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 4 & 7 & -2 & -3 \\ 0 & -3 & -6 & -2 & -6 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \right] = R \qquad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

26.19 Bemerkung. In der Praxis werden die ursprünglichen Einträge der Matrix A durch die modifizierten Einträge $a_{i,j}^{(k)}$ überschrieben. Die Matrix L lässt sich sukzessive in die nicht mehr benötigten untere Hälfte von A schreiben. Man spricht von "in place"-Algorithmen, die keinen zusätzlichen Speicher benötigen.

Mit Hilfe der LR-Zerlegung wollen wir im folgenden das Lösen von linearen Gleichungssystemen ermöglichen.

1 Berechne $A = LR$

2 Löse $Ax = LRx = b$ durch

- Löse $Ly = b$ mittels Vorwärtssubstitution
- Löse $Rx = y$ mittels Rückwärtssubstitution

Daten: LR-Zerlegung $A = LR$ invertierbar, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$

Ergebnis: Lösung x von $Ax = b$

für $i \leftarrow 1$ **bis** n **tue**

$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{i,j} y_j$

Ende

für $i \leftarrow n$ **bis** 1 **tue**

$x_i = \frac{1}{R_{i,i}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^n R_{i,j} x_j \right)$

Ende

Algorithmus 19: Vorwärts- und Rückwärtssubstitution

26.20 Beispiel. Löse $Ax = b$ mit A aus Beispiel 26.18:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ & -3 & -6 \\ & & 1 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Vorwärtssubstitution:

$$Ly = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = b \implies \begin{cases} y_1 = 1 \\ y_2 = 1 - 2 = -1 \\ y_3 = 1 - 3 - 2 \cdot (-1) = 0 \end{cases}$$

Rückwärtssubstitution:

$$Rx = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ & -3 & -6 \\ & & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = y \implies \begin{cases} x_3 = 0 \\ x_2 = \frac{1}{-3}(-1 - (-6)0) = \frac{1}{3} \\ x_1 = 1(1 - \frac{4}{3} - 7 \cdot 0) = -\frac{1}{3} \end{cases}$$

26.21 Bemerkung. Die LR-Zerlegung und Vorwärts- und Rückwärtssubstitution sind zum klassischen Gauss-Algorithmus äquivalent, es werden sogar die genau gleichen Operationen durchgeführt. Die LR-Zerlegung kann jedoch für andere rechte Seiten wieder verwendet werden.

Aufwand: Anzahl der Multiplikationen im i-ten Schritt:

$$n - i + (n - i)(n - i) = (n - i)^2 + n - i$$

Also

$$\sum_{i=1}^{n-1} ((n - i)^2 + n - i) = \sum_{i=1}^{n-1} (i^2 + i) = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

Multiplikationen zur Berechnung der LR-Zerlegung. Der Aufwand der Substitutionen beträgt: $\mathcal{O}(n^2)$.

Daraus resultiert ein Gesamtaufwand zum Lösen eines linearen Gleichungssystem von: $\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$. Der Aufwand im Speicher ist $\mathcal{O}(n^2)$.

27. LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung

27.22 Beispiel. Fortsetzung von Beispiel 25.15

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-3} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, b = [1/2] \implies x = \begin{bmatrix} 1.001001 \\ 0.998999 \end{bmatrix}$$

Löse in dreistelliger Arithmetik, mit kleiner Störung in der rechten Seite:

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 1 & 1.01 \\ 1 & 1 & 2.01 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{c} | -1000 \\ \leftarrow \end{array} \right]_+ \rightarrow \begin{bmatrix} 0.001 & 1 & 1.01 \\ 0 & -999 & -1010 \end{bmatrix}$$

$$\implies \begin{cases} x_2 = -1010 \oslash (-999) = 1.01 \\ x_1 = (1.01 \ominus (1 \oslash 1.01)) \oslash 0.001 = 0 \end{cases}$$

Der Algorithmus muss also instabil sein.

Grund: Das Inverse des Pivot-Elements (1000) ist sehr groß und verstärkt den Fehler

27.23 Definition. Sei $1 \leq i < j \leq n$

$$T^{\{i,j\}} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & 0 & & 1 & & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & 1 & & & \\ & & 1 & & & & 0 & & \\ & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

heißt Transpositionsmatrix.

Eine Permutationsmatrix ist das Produkt mehrerer Transpositionsmatrizen.

27.24 Lemma. Sei $T^{\{i,j\}}$ eine Transpositionsmatrix. Es gilt:

- a) Multiplikation von links mit $T^{\{i,j\}}$ vertauscht i-te und j-te Zeile.
- b) Multiplikation von rechts mit $T^{\{i,j\}}$ vertauscht i-te und j-te Spalte.
- c) $T^{\{i,j\}}$ ist symmetrisch.
- d) $(T^{\{i,j\}})^2 = I$

Ist P eine Permutationsmatrix, so gilt: $P^T P = I$

Beweis. a-d sind elementar. Letzter Punkt: Übung. □

Umsetzung: Anstatt im i-ten Schritt des Gauss-Algorithmus

$$A_i \rightarrow L_i A_i = A_{i+1}$$

zu berechnen, berechnen wir:

$$A_i \rightarrow L_i P_i A_i = A_{i+1} \quad (27.1)$$

27.25 Lemma. Sei $1 \leq i < j \leq n$ und $P_i = T^{\{i,k\}}$ mit $i < k \leq n$. Dann gilt: $P_i L_j = \tilde{L}_j P_i$, wobei \tilde{L}_j und L_j bis auf ein Vertauschen der $\tau_k^{(j)}$ und $\tau_i^{(j)}$ gleich sind.

Beweis. Durch nachrechnen. Also:

$$\tilde{L}_j = P_i L_j P_i$$

□

27.26 Satz. Sei A nicht singulär. Dann bestimmt der Gauss-Algorithmus mit Spaltenpivotisierung eine Zerlegung der Matrix $PA = \tilde{L}R$, wobei R die obere Dreiecksmatrix A_n , $P = P_{n-1} \dots P_1$ eine Permutationsmatrix und $\tilde{L} = \tilde{L}_1^{-1} \dots \tilde{L}_{n-1}^{-1}$ eine untere Dreiecksmatrix ist mit:

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{n-1} &= L_{n-1} \\ \tilde{L}_{n-2} &= P_{n-1} L_{n-2} P_{n-1} \\ &\dots \\ \tilde{L}_1 &= P_{n-1} P_{n-2} \dots P_2 P_1 L_1 P_2 \dots P_{n-2} P_{n-1} \end{aligned}$$

Beweis. Falls der Algorithmus nicht zusammenbricht:

$$\begin{aligned} R = A_n &= L_{n-1} P_{n-1} A_{n-1} \\ &= L_{n-1} P_{n-1} L_{n-2} P_{n-2} A_{n-2} \\ &= L_{n-1} L_{n-2} P_{n-1} P_{n-2} L_{n-3} P_{n-3} A_{n-3} \\ &\dots \\ &= L_{n-1} \dots \tilde{L}_1 P_{n-1} \dots P_1 A \\ &= \tilde{L}^{-1} \cdot P \end{aligned}$$

Sollte der Algorithmus abbrechen, folgt, dass ein Pivot-Element null wird. Daraus folgt, dass die Determinante von der Restmatrix null ist. Demnach ist auch die Determinante von der Matrix A null. Das ist ein Widerspruch dazu, dass A invertierbar ist. \square

27.27 Beispiel. Wir betrachten die $PA = \tilde{L}R$ Zerlegung.

$$\begin{aligned} &\left[\begin{array}{cccc|c|c} 1 & 1 & 0 & 2 & | -\frac{1}{2} & | -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 2 & -1 & \leftarrow + & \\ -1 & 0 & -\frac{1}{8} & -5 & \leftarrow + & \\ 1 & -7 & 9 & 10 & \leftarrow + & \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{8} & -3 \\ 0 & -8 & 9 & 8 \end{array} \right] \xrightarrow{P_2} \\ &\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 0 & 2 & \\ 0 & -8 & 9 & 8 & | \frac{1}{8} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{8} & -3 & \leftarrow + \\ 0 & 0 & 2 & -2 & \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & -8 & 9 & 8 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \end{array} \right] \xrightarrow{P_3} \\ &\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 0 & 2 & \\ 0 & -8 & 9 & 8 & \\ 0 & 0 & 2 & -2 & | -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \leftarrow + \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & -8 & 9 & 8 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right] = R \\ &PA = \left[\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & -7 & 9 & 10 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -\frac{1}{8} & -5 \end{array} \right] L = \left[\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ \frac{1}{2} & 1 & & \\ -1 & -\frac{1}{8} & 1 & \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{array} \right] \rightarrow \tilde{L} = \left[\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ 1 & 1 & & \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 & \\ -1 & -\frac{1}{8} & \frac{1}{2} & 1 \end{array} \right] \end{aligned}$$

27.28 Bemerkung. Um \tilde{L} zu bekommen, berechne zuerst L , und wende dann die Transpositionsmatrizen P_j auf die i -te Spalte an.

27.29 Beispiel. Betrachte

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-3} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow x = \begin{bmatrix} 1.001001 \\ 0.998999 \end{bmatrix}$$

in 3-stelliger Arithmetik wie zuvor.

$$\left[\begin{array}{cc|c} 0.001 & 1 & 1.01 \\ 1 & 1 & 2.01 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2.01 \\ 0.001 & 1 & 1.01 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2.01 \\ 0 & -0.999 & 1.01 \end{array} \right] \Rightarrow \begin{cases} x_2 = 1.01 \boxminus (-0.999) = 1.01 \\ x_1 = (2.01 \boxminus 1.01) = 1 \end{cases}$$

27.30 Bemerkung. Die Spaltenpivotisierung reicht in der Praxis meistens aus. Eine stabilere Idee ist die totale Pivotisierung. Hierbei werden Zeilen und Spalten so permutiert, dass das betragsmäßig größte Element von A_i im i -ten Schritt das Pivot-Element ist. Der Aufwand ist jedoch nicht mehr vernachlässigbar.

28. Cholesky-Zerlegung

In der Praxis sind viele Matrizen symmetrisch, positiv definit.

28.31 Definition. Eine symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *positiv definit*, falls

$$x^t A x > 0 \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n \setminus 0 \quad (28.1)$$

28.32 Lemma. Eine positiv definite symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist invertierbar.

Beweis. Angenommen: A ist nicht invertierbar.

\Rightarrow Es gibt $x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$ so, dass $Ax = 0$

$\Rightarrow x^t A x = 0$

Dies ist schon ein Widerspruch zu (28.1) □

Betrachte eine Matrix

$$A = \left[\begin{array}{c|c} A_{1,1} & A_{1,2} \\ \hline A_{2,1} & A_{2,2} \end{array} \right] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

mit $1 \leq p \leq n-1$ und das lineare Gleichungssystem:

$$Ax = \left[\begin{array}{c|c} A_{1,1} & A_{1,2} \\ \hline A_{2,1} & A_{2,2} \end{array} \right] \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (28.2)$$

Falls $A_{1,1}$ invertierbar ist, können wir eine "Block"-Gauss-Elimination durchführen:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & b_1 & \\ A_{21} & A_{22} & b_2 & \end{array} \right] \xrightarrow{\left[\begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & b_1 & \\ 0 & A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} & b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1 & \end{array} \right]_+} \left[\begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & b_1 & \\ 0 & A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} & b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1 & \end{array} \right]$$

28.33 Definition. Sei $S := A_{22} - A_{11}^{-1}A_{12}$ dann ist S das Schurkomplement von A bezüglich A_{11} . Falls S invertierbar ist gilt:

$$\begin{aligned}x_2 &= S^{-1}(b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1) \\x_1 &= A_{11}^{-1}(b_1 - A_{12}x_2)\end{aligned}$$

28.34 Lemma. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch, positiv definit. Dann ist A_{11} dies ebenfalls und somit invertierbar. Das Schurkomplement S bezüglich A_{11} ist wohldefiniert und symmetrisch, positiv definit.

Beweis. Zeige:

A spd: Da A spd gilt:

$$0 \leq \begin{bmatrix} x_1^t & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^t & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{11}x_1 \\ A_{21}x_1 \end{bmatrix} = x_1^t A_{11} x_1$$

mit Gleichheit genau dann, wenn $x_1 = 0 \implies A_{11}$ ist spd und S wohldefiniert.

S symmetrisch :

$$\begin{aligned}S^t &= (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^t \\&= A_{22}^t - A_{12}^t A_{11}^{-t} A_{21}^t \\&= A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \\&= S\end{aligned}$$

S positiv definit: Für x_2 beliebig setze $x_1 = -A_{11}^{-1}A_{12}x_2$:

$$\begin{aligned}0 &\leq \begin{bmatrix} x_1^t & x_2^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\&= \begin{bmatrix} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 \end{bmatrix} \\&= \begin{bmatrix} 0 \\ -A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}x_2 + A_{22}x_2 \end{bmatrix} \\&= \begin{bmatrix} 0 \\ Sx_2 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

mit Gleichheit genau dann, wenn $x_2 = 0$ und $x_1 = 0 \implies S$ ist positiv definit und symmetrisch. \square

28.35 Satz. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und symmetrisch, positiv definit. Dann existiert eine *Cholesky-Zerlegung* $A = LL^t$, wobei $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine untere Dreiecksmatrix ist.

Beweis. Per Induktion. \square

28.36 Korollar. A hat eine Cholesky-Zerlegung genau dann, wenn A spd ist.

Beweis. Übung. \square

28.1. Berechnung der Cholesky-Zerlegung

Wir suchen Zahlen $l_{i,j}$ so, dass :

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{n,1} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \dots & a_{n,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & l_{22} & \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & l_{n,n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \dots & l_{n,1} \\ & l_{22} & & \vdots \\ & & \ddots & \\ & & & l_{n,n} \end{bmatrix}$$

Also:

$$\begin{aligned} a_{11} &= l_{11}^2 \implies l_{11} = \sqrt[2]{a_{11}} \\ a_{21} &= l_{21}l_{11} \implies l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}} \\ &\vdots \implies \vdots \\ a_{22} &= l_{21}^2 + l_{22}^2 \implies l_{22} = \sqrt[2]{a_{22} - l_{21}^2} \\ a_{32} &= l_{31}l_{21} + l_{32}l_{22} \implies l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}l_{21}}{l_{22}} \end{aligned}$$

Allgemein:

$$\left. \begin{aligned} l_{j,j} &= \sqrt[2]{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{j,k}^2} & j &= 1, \dots, n \\ l_{i,j} &= \frac{1}{l_{j,j}} \left(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k} l_{j,k} \right) & j &< i \leq n \end{aligned} \right\} \quad (28.3)$$

28.37 Bemerkung. Es muss $l_{jj} \neq 0$ gelten, da anderenfalls ein Widerspruch zur Existenzaussage über die Cholesky-Zerlegung besteht.

28.38 Korollar. Werden die Vorzeichen der Diagonalelemente der Cholesky-Faktoren eindeutig festgelegt, dann ist die Cholesky-Zerlegung eindeutig.

Aufwand: (28.3) sagt, dass zur Berechnung von $l_{i,j}$, j Multiplikationen bzw. Divisionen / Wurzeln benötigt werden. Der Gesamtaufwand beträgt demnach:

$$\sum_{j=1}^n (n-j+1)j = \frac{1}{6}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

Dies ist circa doppelt so schnell wie die LR-Zerlegung.

Graphenbasierte Löser

Motivation

Betrachte die Temperatur in einem Raum, modelliert durch $\Omega = (0,1)^2$. Die Temperatur in jedem Punkt im Raum kann als Funktion $u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ aufgefasst werden. Gegeben sei außerdem eine Wärmequelle, modelliert als $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ im Raum und eine Temperatur der Wände von $u(x) = 0, x \in \partial\Omega = (\{0,1\} \times [0,1]) \cup ([0,1] \times \{0,1\})$. Nach einer gewissen (unendlichen) Zeit wird die Temperatur ein Gleichgewicht annehmen, welches die Lösung einer *partiellen Differentialgleichung*

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = f(x) & x \in \Omega \\ u(x) = 0 & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (28.1)$$

geschrieben werden.

28.1 Definition. Der Laplace-Operator Δ ist definiert als:

$$\Delta u(x) = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}(x_1, x_2) + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}(x_1, x_2, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}) \in \Omega$$

falls u genügend oft differenzierbar ist.

Das Ziel ist es, u zu berechnen, wenn f gegeben ist. Das Problem im Allgemeinen ist, dass (28.1) nicht von Hand lösbar ist, daher erfolgt die Lösung mit Hilfe des Computers. Dies ist generell nur approximativ möglich.

Beobachte: Für eine genügend oft differenzierbare Funktion $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, gilt

$$g'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{g(x+h) - g(x)}{h} \approx \frac{g(x) - g(x-h)}{h} \approx \frac{g(x+h) - g(x)}{h}$$

für ein kleines h . Also:

$$\begin{aligned} g''(x) &\approx \frac{g'(x+h) - g'(x)}{h} \\ &\approx \frac{\frac{g(x+h) - g(x)}{h} - \frac{g(x) - g(x-h)}{h}}{h} \\ &\approx \frac{g(x+h) - 2g(x) + g(x-h)}{h^2} \end{aligned}$$

Unsere Idee ist nun, die zweiten Ableitungen im Laplace-Operator durch diese Approximationen zu ersetzen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}(x_1, x_2) &\approx \frac{u(x_1 + h, x_2) - 2u(x_1, x_2) + u(x_1 - h, x_2)}{h^2} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}(x_1, x_2) &\approx \frac{u(x_1, x_2 + h) - 2u(x_1, x_2) + u(x_1, x_2 - h)}{h^2}\end{aligned}$$

Für eine systematische Approximation der Ableitungen führen wir ein Gitter ein. Wähle $n \in \mathbb{N}$ und eine Schrittweite $h = \frac{1}{n}$.

Wir betrachten u nur noch an den Gitterpunkten $x_{i,j}$ und suchen Approximationen $u_{i,j} \approx u(x_{i,j})$. Wir erhalten:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{h^2}(4u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1}) &= f_{i,j} = f(x_{i,j}), x_{i,j} \in \Omega \\ u_{i,j} &= 0, x_{i,j} \in \partial\Omega, \text{ also } i, j \in \{0, n\} \end{aligned} \right\} \quad (28.2)$$

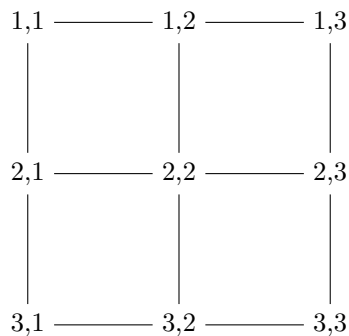
Wir erhalten also ein lineares Gleichungssystem $An = f$ mit $N = (n-1)^2$ Unbekannten. Gemäß (28.2) hat A nur fünf Einträge pro Zeile bzw. Spalte, insgesamt also $\mathcal{O}(N)$ Einträge. A ist demnach extrem dünn besetzt.

28.2 Beispiel. Sei $n = 4$. Dann ist $h = \frac{1}{4}$ und

Beobachtung: Wir haben das Lösen einer partiellen Differentialgleichung auf das Lösen eines linearen Gleichungssystems reduziert. Jedoch ist für die Lösung u von (28.1) zu erhalten, oft $1 \ll n$ nötig. Die Größe des linearen Gleichungssystems ist $\mathcal{O}(n^2) = \mathcal{O}(N)$. Das Lösen des linearen Gleichungssystems ist demnach $\mathcal{O}(N^3)$, was in der Realität praktisch nicht durchführbar ist. Dies liegt daran, dass die LR -Zerlegung von A im Allgemeinen viel mehr nicht-null Einträge hat als A .

Um die Dünnbestztheit von A besser auszunutzen, sodass die Faktoren der (modifizierten LR -Zerlegung ebenfalls dünnbestzsetzt sind betrachten wir die Systemmatrix A als Adjazentmatrix eines Graphen G_A .

28.3 Beispiel. Der Graph G_A zur Matrix aus Beispiel 28.2 ist:



29. Cholesky-Zerlegung und Graphen

Beobachtung: Da Umnummerieren von Knoten verändert einen Graphen nicht. In der zugehörigen Adjazenzmatrix müssen aber Spalten und Zeilen entsprechend permutiert werden.

Idee: Permutiere Zeilen und Spalten der Adjazenzmatrix so, dass möglichst wenig fill-in bei der Berechnung von LR - oder Cholesky-Zerlegung generiert wird. Die Matrix aus dem vorherigen Kapitel ist symmetrisch positiv definit. Die Einträge der Cholesky-Zerlegung sind dann gegeben durch:

$$l_{j,j} = \sqrt{a_{\partial(j),\partial(j)} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{j,\partial(k)}^2}$$

$$l_{i,j} = \frac{1}{l_{j,j}} \left(a_{\partial(i),\partial(j)} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,\partial(k)} l_{j,\partial(k)} \right)$$

wobei $\partial(1), \partial(2), \dots, \partial(N)$ eine Permutation ist.

Setzen wir $l_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ l_{i,i} \\ \vdots \\ l_{n,i} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^N$ und schreiben

$$A_1 = A, A_{i+1} = A_i - l_i l_i^t = [a_{l,k}^{(i)}]_{l,k=1}^N$$

Wir können l_i auch berechnen durch:

$$l_i = \frac{1}{\sqrt{a_{\partial(i),\partial(i)}^{(i)}}} \begin{bmatrix} a_{1,\partial(i)}^{(i)} \\ \vdots \\ a_{N,\partial(i)}^{(i)} \end{bmatrix} \quad (29.1)$$

Dies entspricht der sukzessiven Elimination der Zeilen und Spalten $\partial(1), \dots, \partial(N)$. Der zugehörige Graph verändert sich in dem Sinne, dass in jedem Schritt ein Knoten eliminiert wird.

29.4 Beispiel. Betrachte A aus Beispiel 28.2.

29.5 Lemma. Sei $v_i = \text{nnz}(l_i)$ die Anzahl nicht-null Einträge in l_i . Dann ist der Aufwand um die Cholesky-Zerlegung $A = LL^t$ zu bestimmen gegeben durch:

$$\Theta = \sum_{i=1}^N \frac{v_i(v_i + 3)}{2}$$

Die Anzahl nicht-null Einträge $nnz(L)$ in L ist:

$$\eta = \sum_{i=1}^N v_i$$

Beweis. (??) impliziert, dass l_i mit v_i Multiplikationen berechnet werden kann. $l_i l_i^t$ ist symmetrisch, kann also in $\frac{v_i(v_i+1)}{2}$ Multiplikationen berechnet werden.

$$\Theta = \sum_{i=1}^N \left(\frac{v_i(v_i+1)}{2} + v_i \right) = \sum_{i=1}^N \frac{v_i(v_i+3)}{2}$$

Die Formel für η folgt aus $L = [l_1 | \dots | l_N]$. □

Um v_i möglichst klein zu halten eliminieren wir nun in einer Reihenfolge.

29.6 Definition. Eine *Eliminationsreihenfolge* auf einem Graphen $G = (V, E)$ ist eine Nummerierung $\sigma: \{1, \dots, |V|\} \rightarrow V$ der Knoten. Diese führt auf einen *geordneten Graphen* $G^\sigma = (V, E, \sigma)$. Für G^σ ist das *Defizit* eines Knotens gegeben durch:

30. Nested Dissection

31. Generalized nested dissection