https://matse.paddel.xyz/spicker

Numerik 1

Patrick Gustav Blaneck

Letzte Änderung: 7. Juni 2023

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Definition: Numerik

Lloyd Trefethen 1992:

> Numerical analysis is the study of algorithms for the problems of continuous mathematics.

„continuous mathematics“ heißt, dass reelle oder komplexe Zahlen beteiligt sind, in Abgrenzung zur diskreten Mathematik. Dies umfasst die Analysis und Teile der linearen Algebra.

Die *Numerik* beschäftigt sich mit der Entwicklung von (effizienten) Berechnungsmethoden, da viele mathematische Objekte zwar wohldefiniert sind, aber nicht endlich berechenbar.

Beispiel: Auswertung der Exponentialfunktion

Zu berechnen sei $e^{\frac{1}{2}}$, wie Exponentialfunktion bekanntermaßen wie folgt definiert ist:

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Die unendliche Summe ist nicht direkt berechenbar, daher wird ein Ersatzproblem gelöst:

$$e^x \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{x^k}{k!}$$

Dabei ist n ein neuer freier Parameter. Es gilt:

- kleines $n \implies$ eventuell zu viel vernachlässigt, Wert ungenau approximiert.
- großes $n \implies$ Berechnung aufwändig, Gewinn an Genauigkeit potentiell gering.

Ein weiteres Problem kann durch eine nicht-exakte Arithmetik aufkommen. Seien die beiden Summationsreihenfolgen $s_1(x)$ und $s_2(x)$ gegeben:

$$s_1(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \ldots + \frac{x^n}{n!}$$

$$s_2(x) = \frac{x^n}{n!} + \ldots + \frac{x^2}{2} + x + 1$$

Bei einer Floating-Point-Rechnung mit 3 Stellen Genauigkeit gilt:

n	1	2	3	4	5
$s_1(0.5)$	1.5	1.62	1.64	1.64	1.64
$s_2(0.5)$	1.5	1.62	1.65	1.65	1.65

Die Summationsreihenfolge beeinflusst also das Ergebnis.

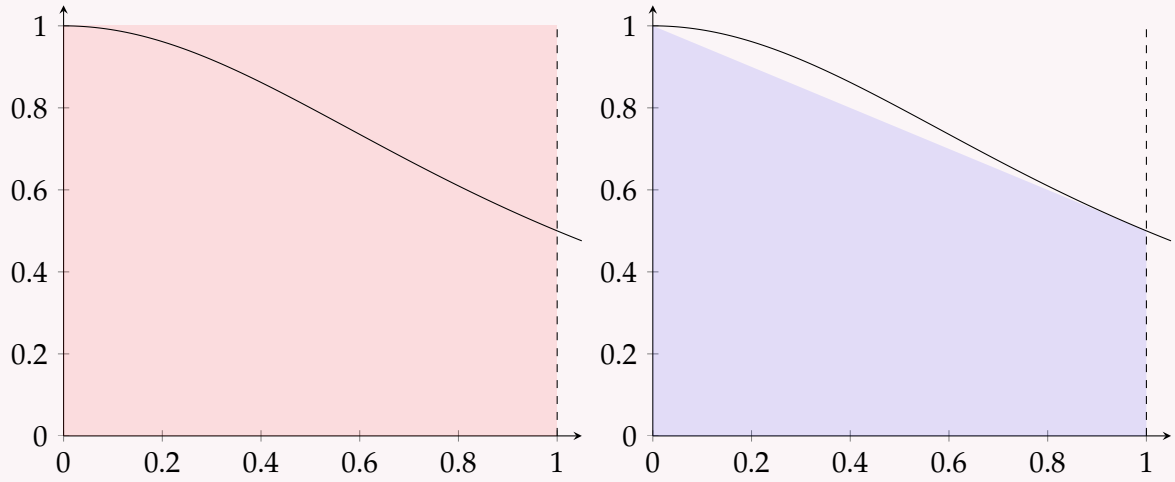
Ein Abbruch bei $n = 4$ ist für $x = 1/2$ angemessen.

Beispiel: Rechteckregel und Trapezregel

Zu approximieren sei die Funktion

$$f(x) = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} \, \mathrm{d}\, x$$

Rechteckregel und *Trapezregel* approximieren diese Funktion wie folgt:



TO DO

Definition: Numerische Simulation

Numerische Simulation beschreibt die Verhaltensvorhersage eines physikalischen Systems durch mathematische Modelle und numerische Verfahren.

Numerische Simulationen sind z.B. anwendbar in physikalischen Systemen (beliebige Bauteile) und daher sehr wichtig für die Produktentwicklung in der Industrie.

Das Vorgehen ist wie folgt:

- virtueller Prototyp: vollständige Analyse durch numerische Simulation
- davon ausgehend: endgültige Auslegung der Konstruktion
- am Ende: Validierung durch einen realen Prototypen

In der Regel spart numerische Simulation Geld und Zeit.

2 Lineare Gleichungssysteme - Direkte Löser I

2.1 Einleitung

Definition: Lineares Gleichungssystem

Betrachten wir allgemein ein System von m Gleichungen für n Unbekannte, so erhalten wir:

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & & & & & & & \vdots \\ a_{m1}x_1 & + & a_{m2}x_2 & + & \cdots & + & a_{mn}x_n & = & b_m \end{array}$$

Es gilt:

- Unbekannte dürfen nur linear auftreten,
- $a_{ij} \in \mathbb{R}$ gegebene Koeffizienten,
- $b_i \in \mathbb{R}$ gegebene rechte Seite,
- $x_j \in \mathbb{R}$ gesuchte Unbekannte

Zur Abkürzung benutzt man die Matrix-Vektor-Schreibweise

$$Ax = b$$

mit Systemmatrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

rechter Seite

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m,$$

Vektor der Unbekannten

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

und Matrix-Vektor-Produkt

$$Ax = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ a_{m1}x_1 & + & a_{m2}x_2 & + & \cdots & + & a_{mn}x_n \end{pmatrix}$$

Bonus: Lösbarkeit von linearen Gleichungssystemen

Sei ein lineares Gleichungssystem mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $x \in \mathbb{R}^n$ gegeben.

Dann gilt:

- $m \neq n \implies$ (in der Regel) entweder keine Lösung oder unendlich viele,
- $m = n \implies$ eindeutig lösbar, falls A regulär[a] ist.

[a] $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *regulär*, falls $\det(A) \neq 0$ bzw. *singulär*, falls $\det(A) = 0$.

Bonus: Wiederholung Matrizen

Es gilt:

- $\det(A) \neq 0 \iff$ Spalten $s_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix}$, $j = 1, \ldots, n$ sind linear unabhängig.
- $\det(A) \neq 0 \iff$ Zeilen $z_i = \begin{pmatrix} a_{i1} & \cdots & a_{in} \end{pmatrix}$, $i = 1, \ldots, n$ sind linear unabhängig.
- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär $\iff \operatorname{rang}(A) = n$
- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ singulär $\iff \operatorname{rang}(A) < n$
- $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ definiert eine lineare Abbildung $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ durch $x \to Ax$.
- Jede lineare Abbildung $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ ist als Matrix darstellbar.
- Matrizenmultiplikation ist nur bei passender Dimension möglich.
- In der Regel ist Matrizenmultiplikation nicht kommutativ (also $AB \neq BA$).
- $(AB)^T = B^T A^T$
- $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n} \implies \det(AB) = \det(A)\det(B) \implies$ sind A, B regulär, dann auch AB
- Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär, so existiert die Inverse $A^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

- für A, B regulär ist $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

Definition: Matrixnorm

Ist $\|\cdot\|$ eine Norm auf $\mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, dann definiert

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

eine *Matrixnorm* auf $\mathbb{R}^{n\times n}$.

Eine Matrixnorm erfüllt analog zur Vektornorm die folgenden Bedingungen:

1. $\|A\| = 0 \iff x = 0$ (Definitheit)
2. $\|\alpha A\| = \alpha\|A\| \quad \forall A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \forall \alpha \in \mathbb{R}$ (absolute Homogenität)
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\| \quad \forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (Subadditivität oder Dreiecksungleichung)

Eine Matrixnorm hängt von der benutzten Vektornorm ab und heißt deshalb die von der Vektornorm *induzierte Matrixnorm*.

Eine Vektornorm und die induzierte Matrixnorm sind kompatibel, d.h.

$$\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$$

Für induzierte Matrixnormen gilt

$$\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$$

Auf $\mathbb{R}^{n\times n}$ sind alle Matrixnormen äquivalent.

Definition: Spektralnorm

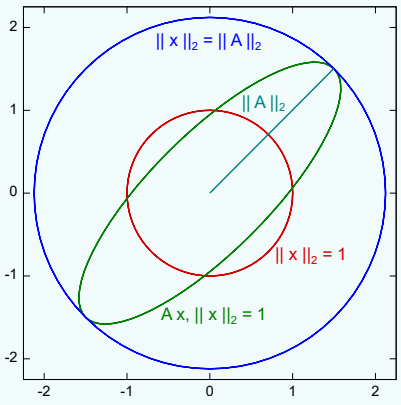
Für $\|\cdot\|_2$ erhält man als induzierte Matrixnorm die *Spektralnorm*

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$$

wobei der *Spektralradius* $\rho(B)$ der betragsgrößte Eigenwert von B ist.

Anschaulich entspricht die Spektralnorm damit dem größtmöglichen Streckungsfaktor, der durch die Anwendung der Matrix auf einen Vektor der Länge Eins entsteht.

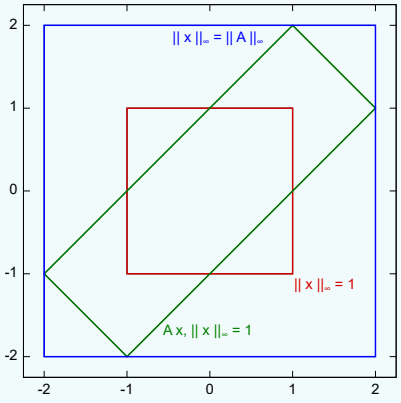
Eine äquivalente Definition der Spektralnorm ist der Radius der kleinsten Sphäre, die den Einheitskreis nach Transformation durch die Matrix umfasst.



Definition: Zeilensummennorm

Für $\|\cdot\|_\infty$ erhält man als induzierte Matrixnorm die *Zeilensummennorm*

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



Anschaulich entspricht die Zeilensummennorm dem größtmöglichen Streckungsfaktor, der durch die Anwendung der Matrix auf einen Vektor mit *betragsmaximalen Eintrag Eins* entsteht.

Für die Zeilensummennorm gilt die namensgebende Darstellung:

$$\|A\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty=1} \max_{i=1,\dots,n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| = \max_{i=1,\dots,n} \max_{\|x\|_\infty=1} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

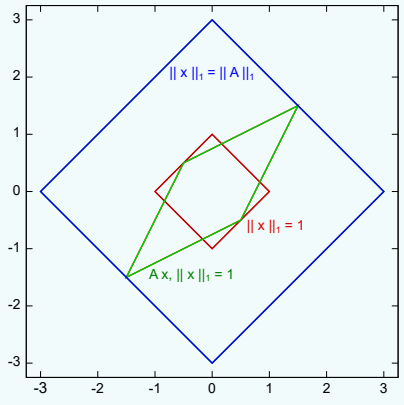
Hierbei wurde genutzt, dass die Summe innerhalb der Betragsstriche für festes i genau dann maximal wird, wenn $x_j = \operatorname{sign}(a_{ij})$ für alle j ist.

Die Berechnung der Zeilensummennorm erfolgt also durch die Ermittlung der Betragssumme jeder Zeile und dann durch Auswahl des Maximums dieser Werte.

Definition: Spaltensummennorm

Für $\|\cdot\|_1$ erhält man als induzierte Matrixnorm die *Spaltensummennorm*

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



Anschaulich entspricht die Spaltensummennorm dem größtmöglichen Streckungsfaktor, der durch die Anwendung der Matrix auf einen Vektor mit *Betragssumme Eins* entsteht.

Für die Spaltensummennorm gilt die namensgebende Darstellung:

$$\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \sum_{i=1}^{n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

Hierbei wurde genutzt, dass die Summe innerhalb der Betragsstriche für festes i für einen der Einheitsvektoren $x = \pm e_j$ mit $j = 1, \dots, n$ maximal wird.

Die Berechnung der Spaltensummennorm erfolgt also durch die Ermittlung der Betragssumme jeder Spalte und dann durch Auswahl des Maximums dieser Werte.

Definition: Frobeniusnorm

Die *Frobeniusnorm*

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{spur}(A^T A)}, \quad \text{spur}(A^T A) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2$$

ist *nicht induziert*, erfüllt aber

$$\|AB\|_F \leq \|A\|_F \cdot \|B\|_F$$

und ist wegen

$$\|Ax\|_2 \leq \|A\|_F \cdot \|x\|_F \quad \forall x$$

mit der Vektornorm $\|\cdot\|_2$ verträglich.

$\|A\|_F$ ist eine obere Schranke für $\|A\|_2$, aber deutlich einfacher zu berechnen.

Die Frobeniusnorm entspricht damit der euklidischen Norm eines Vektors der Länge $m \cdot n$, in dem alle Einträge der Matrix untereinander notiert sind.

2.2 Gaußelimination

Definition: Gaußelimination

Die *Gaußelimination* ist ein wichtiges Verfahren zum Lösen von linearen Gleichungssystemen und beruht darauf, dass Äquivalenztransformationen zwar das Gleichungssystem ändern, aber die Lösung erhalten.

Dies erlaubt es, jedes eindeutig lösbare Gleichungssystem auf Dreiecksgestalt zu bringen, an der die Lösung durch sukzessive Elimination der Unbekannten leicht ermittelt oder die Lösungsmenge abgelesen werden kann.

Die Anzahl der benötigten Operationen ist bei einer $n \times n$-Matrix von der Größenordnung n^3.

In seiner Grundform ist der Algorithmus aus numerischer Sicht anfällig für Rundungsfehler, aber mit kleinen Modifikationen (Pivotisierung) stellt er für allgemeine lineare Gleichungssysteme das Standardlösungsverfahren dar.

Algorithmus: Gaußelimination

Ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$ mit n Gleichungen und n Unbekannten $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}^T$ und rechter Seite $b = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}^T$ hat die Form:

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

Der Algorithmus zur Berechnung der Variablen x_i lässt sich in zwei Etappen einteilen:

1. Vorwärtselimination,
2. Rückwärtseinsetzen (Rücksubstitution).

Im ersten Schritt wird das Gleichungssystem auf Dreiecksgestalt gebracht. Dreiecksgestalt heißt, dass pro Zeile mindestens eine Variable weniger auftritt, also mindestens eine Variable *eliminiert* wird. Wir erhalten:

$$\begin{array}{ccccccccc} \tilde{a}_{11}x_1 & + & \tilde{a}_{12}x_2 & + & \cdots & + & \tilde{a}_{1n}x_n & = & \tilde{b}_1 \\ & & \tilde{a}_{22}x_2 & + & \cdots & + & \tilde{a}_{2n}x_n & = & \tilde{b}_2 \\ & & & & \ddots & + & \vdots & = & \vdots \\ & & & & & & \tilde{a}_{nn}x_n & = & \tilde{b}_n \end{array}$$

Zum Erreichen der Dreiecksgestalt werden elementare Zeilenumformungen benutzt, mit Hilfe derer das Gleichungssystem in ein neues transformiert wird, welches aber dieselbe Lösungsmenge besitzt.

Ausreichend sind zwei Arten von elementaren Zeilenumformungen:

1. Eine Zeile oder das Vielfache einer Zeile zu einer anderen Zeile addieren.
2. Zwei Zeilen vertauschen.

Das Verfahren besteht dann darin, angefangen in der ersten Spalte mit Umformungen der ersten Art durch geschicktes Dazuaddieren der ersten Zeile alle Einträge bis auf den ersten zu Null zu machen. Dies wird dann in der so modifizierten zweiten Spalte fortgesetzt, wobei diesmal Vielfache der zweiten Zeile zu den folgenden Zeilen addiert werden und so weiter.

Dieser Schritt funktioniert nur, wenn das Diagonalelement der aktuellen Spalte nicht Null ist. In so einem Fall ist die zweite Art der Zeilenumformung nötig, da durch eine Zeilenvertauschung ein Nichtnulleintrag auf der Diagonale erzeugt werden kann. Mit Hilfe dieser beiden Arten von Umformungen ist es möglich, jedes lineare Gleichungssystem auf Dreiecksgestalt zu bringen.

Im zweiten Schritt des Verfahrens, dem Rückwärtseinsetzen, werden ausgehend von der letzten Zeile, in der nur noch eine Variable auftaucht, die Variablen ausgerechnet und in die darüberliegende Zeile eingesetzt.

Beispiel: Gaußelimination

TO DO

2.3 LU-Zerlegung

Definition: Frobeniusmatrix

Eine Matrix ist eine *Frobeniusmatrix*, wenn sie die folgenden drei Eigenschaften aufweist:

- auf der Hauptdiagonale stehen nur Einsen,
- in höchstens einer Spalte stehen unter der Hauptdiagonale beliebige Einträge,
- alle anderen Einträge sind Null.

Frobeniusmatrizen haben stets eine Determinante vom Wert 1 und sind somit invertierbar. Ihre inverse Matrix wird gebildet, indem das Vorzeichen aller Einträge außerhalb der Hauptdiagonalen gewechselt wird.

Frobeniusmatrizen treten bei der Beschreibung des Gaußschen Eliminationsverfahrens als Darstellungsmatrizen der Gaußelimination auf.

Wird eine Matrix von links mit einer Frobeniusmatrix multipliziert, dann wird ein skalares Vielfaches einer bestimmten Zeile zu einer oder mehreren darunter liegenden Zeilen addiert. Dies entspricht einer der Elementaroperationen des Gaußschen Eliminationsverfahrens (neben der Operation der Vertauschung von Zeilen und der Multiplikation einer Zeile mit einem skalaren Vielfachen).

Beispiel: Frobeniusmatrix

Sei zunächst

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad a_{11} \neq 0$$

a_{21} wird eliminiert, indem von der zweiten Zeile $\frac{a_{21}}{a_{11}}$-mal Zeile 1 abgezogen wird.

Das kann als Matrixmultiplikation geschrieben werden. Es folgt mit

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -l_{21} & 1 \end{pmatrix} :$$

$$FA = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} a_{11} + a_{21} & -\frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} + a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} \end{pmatrix}$$

Analog folgt für die Elimination der k-ten Spalte $A^{(k-1)} \to A^{(k)}$ im allgemeinen Fall:

$$A^{(k)} = F_k A^{(k-1)}, \quad F_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -l_{k+1k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -l_{nk} & & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

mit

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

Bonus: LU-Zerlegung (Motivation)

Die Gaußelimination liefert für ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$

$$A \to A^{(1)} \to \ldots \to A^{(n-1)} = U$$

$$b \to b^{(1)} \to \ldots \to b^{(n-1)}$$

Sie liefert für ein zweites lineares Gleichungssystem $Ax' = b'$ für identisches A ein gleiches U.

Diesen doppelten Aufwand kann man sich sparen mithilfe der *LU-Zerlegung* sparen.

Definition: LU-Zerlegung

Sind alle $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, so erzeugt die Gaußelimination eine *LU-Zerlegung*

$$A = LU$$

von A, wobei L eine unter Dreiecksmatrix mit Diagonale 1 und U eine obere Dreiecksmatrix ist.

Hat man für A einmal eine Gaußelimination durchgeführt, so kennt man L und U.

$LUx = b$ ist sehr leicht zu lösen:

1. löse $Ly = b$, dann $Ux = y$
2. x ist die gesuchte Lösung, da $b = Ly = LUx = Ax$
3. $Ux = y$ kann durch Rückwärtseinsetzen gelöst werden, da U obere Dreiecksmatrix
4. $Ly = b$ kann durch Vorwärtseinsetzen gelöst werden, da L untere Dreiecksmatrix

Der Aufwand der LU-Zerlegung ist wie folgt:

- $Ax = b$ mit Gaußelimination $\approx \frac{2}{3}n^3$,
- L, U bestimmen mit Gaußelimination $\approx \frac{2}{3}n^3$,
- $LUx = b$ lösen $\approx 2n^2$
- $\implies$ ist L, U bekannt, so ist die Lösung für verschiedene b „günstig“ zu erhalten

Da wir wissen, dass auf der Hauptdiagonalen von L 1en sind, brauchen diese nicht explizit gespeichert zu werden. Der Rest von L, U „passt“ in den Speicherbereich von A. A selbst brauchen wir dann nicht mehr, da $Ax = b \iff LUx = b$ ist.

Beispiel: LU-Zerlegung

TODO

Definition: Permutationsmatrix

Eine *Permutationsmatrix* ist eine quadratische Matrix, bei der genau ein Eintrag pro Zeile und Spalte gleich 1 ist und alle anderen Einträge gleich 0 sind.

Der Zeilentausch der Gaußelimination der Zeilen i und j kann dargestellt werden durch die Identitätsmatrix I mit den Zeilen i und j vertauscht.

PA tauscht die Zeilen i und j, AP tauscht die Spalten i und j.

Für Permutationen gilt:

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

Bonus: LU-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen (Idee)

Sei A regulär, $A^{(k-1)} = F_{k-1} \dots F_1 A$ mit Hilfe der Gaußelimination erzeugt und $a_{kk}^{(k-1)} = 0$.

Dann gibt es in der k-ten Spalte unterhalb der Diagonalen immer mindestens ein Element $a_{ik}^{(k-1)}$ mit $a_{ik}^{(k-1)} \neq 0$ und $i > k$, d.h. ein erfolgreicher Zeilentausch ist immer möglich.

Bevor F_k die k-te Spalte eliminiert, muss eventuell getauscht werden. Damit erhalten wir:

$$U = F_{n-1} P_{n-1} \cdot \ldots \cdot F_1 P_1 A$$

wobei U eine obere Dreiecksmatrix ist und P_i Permutationsmatrizen oder $P_i = I$[a].

Es gilt:

$$A = \tilde{L} U \quad \Longleftrightarrow \quad U = \tilde{L}^{-1} A, \quad \tilde{L} = (F_{n-1} P_{n-1} \cdot \ldots \cdot F_1 P_1)^{-1}$$

$\tilde{L}$ ist in der Regel *keine* untere Dreiecksmatrix.

Wir erhalten ein L in entsprechender Dreiecksgestalt durch:

$$PA = LU \quad \Longleftrightarrow \quad U = L^{-1} PA, \quad P = P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_1$$

[a] was auch eine Permutation ist.

Definition: LU-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär, so gibt es Permutationen P_k, $k = 1, \dots, n-1$ so, dass mit $P = P_1 \cdot \ldots \cdot P_n$ gilt:

$$PA = LU$$

wobei L eine untere Dreiecksmatrix mit $\operatorname{diag}(L) = 1$ und U eine obere Dreiecksmatrix ist.

Tauscht man vorab die Zeilen in A entsprechend P, so sind alle $a_{kk}^{k-1} \neq 0$, d.h. $PA = LU$.

Die Permutation P ist nicht vorher bekannt, sondern ergibt sich erst während der LU-Zerlegung.

Beispiel: LU-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen

Gegeben sei eine reguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{4\times 4}$:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \\ 8 & 8 & 0 & 0 \\ 4 & 6 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

Führen Sie eine LU-Zerlegung auf A durch.

$$k = 1: \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \\ 8 & 8 & 0 & 0 \\ 4 & 6 & 2 & 4 \end{pmatrix} \xrightarrow{j_1=2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 8 & 8 & 0 & 0 \\ 4 & 6 & 2 & 4 \end{pmatrix} \to \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ 4 & 4 & -8 & 0 \\ 2 & 4 & -2 & 4 \end{array}\right)$$

$$k = 2: \quad \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ 4 & 4 & -8 & 0 \\ 2 & 4 & -2 & 4 \end{array}\right) \xrightarrow{j_2=3} \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 4 & 4 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 4 & -2 & 4 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 4 & 4 & -8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 6 & 4 \end{array}\right)$$

$$k = 3: \quad \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 4 & 4 & -8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 6 & 4 \end{array}\right) \xrightarrow{j_3=3} \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 4 & 4 & -8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 6 & 4 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{c|ccc} 2 & 1 & 2 & 0 \\ \hline 4 & 4 & -8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 3 & 1 \\ \hline 2 & 1 & 2 & 2 \end{array}\right)$$

Damit erhalten wir:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 4 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad p = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Definition: LU-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen (Praxis)

Es gilt:

$$Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad PAx = Pb \quad \Longleftrightarrow \quad LUx = Pb$$

Implementiert werden drei Routinen:

1. LU-Zerlegung mit Permutation durch Gaußelimination liefert L, U und P
2. löse $Ly = Pb$ durch Vorwärtseinsetzen
3. löse $Ux = y$ durch Rückwärtseinsetzen

Es gilt $P = P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_1$ wobei P_k die k-te Zeile mit einer Zeile $j_k > k$ vertauscht.

Deshalb können alle P_k in einem einzigen ganzzahligen Vektor

$$p = \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ \vdots \\ j_{n-1} \end{pmatrix}$$

abgespeichert werden.

L wird im freiwerdenden Teil von A gespeichert. Insgesamt ergibt sich für einen Eliminationsschritt:

- suche j_k
- tausche komplette Zeile im 2D-Array, in dem ursprünglich A abgelegt ist
- eliminiere k-te Spalte wie üblich

Code: LU-Zerlegung für beliebige reguläre Matrizen (Praxis)

TODO

2.4 Cholesky-Zerlegung

Definition: Cholesky-Zerlegung

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit. Dann kann A wie folgt zerlegt werden:

- *rationale Cholesky-Zerlegung*
$$A = \tilde{L} D \tilde{L}^T$$
  - $\tilde{L}$ untere Dreiecksmatrix mit $\text{diag}(L) = 1$
  - D Diagonalmatrix mit positiven Diagonalelementen
- *Cholesky-Zerlegung*
$$A = L L^T$$
  - L untere Dreiecksmatrix

Die Cholesky-Zerlegung basiert auf der Gaußelimination mit zusätzlicher Multiplikation mit F_k^T, was zunächst einen höheren Aufwand erwarten lässt. F_k^T eliminiert aber nur die entsprechende Zeile und hat sonst keinen Einfluss, d. h. es ist nichts weiter zu tun als 0 in die Matrix einzutragen.

Alle $A^{(k)}$ sind symmetrisch, weshalb nur eine Hälfte der Koeffizienten berechnet werden muss.

Definition: Cholesky-Zerlegung (Praxis)

Für die praktische Durchführung der Cholesky-Zerlegung wird in der Regel eine andere Form benutzt, die gar nicht an Gauß erinnert.

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit mit $A = LL^T$,

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Der k-te Schritt des Cholesky-Verfahrens besteht aus:

1. Berechne k-te Spalte:
$$l_{kk} = \sqrt{a_{kk}^{(k)}}$$
$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{l_{kk}}$$
   - $i = k+1, \ldots, n$
2. Berechne $A^{(k+1)}$:
$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} l_{jk}$$
   - $i = k+1, \ldots, n$
   - $j = k+1, \ldots, i$

Ist $A = LL^T$ bekannt, so verfährt man zur Lösung von $Ax = b$ wie üblich:

$$Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad LL^T x = b \quad \Longleftrightarrow \quad Ly = b, L^T x = y$$

- $Ly = b$ wird durch Vorwärtseinsetzen gelöst.
- $L^T x = y$ wird durch Rückwärtseinsetzen gelöst.

Beispiel: Cholesky-Zerlegung

Gegeben sei eine spd Matrix $A \in \mathbb{R}^{4\times 4}$:

$$A = \begin{pmatrix} 9 & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -27 & -9 & 99 & * \\ 18 & -27 & -27 & 121 \end{pmatrix}$$

Führen Sie eine Cholesky-Zerlegung auf A durch.

$k = 1$:

$$\begin{pmatrix} 9 & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -27 & -9 & 99 & * \\ 18 & -27 & -27 & 121 \end{pmatrix} \xrightarrow{l_{11}=\sqrt{a_{11}^{(1)}}} \begin{pmatrix} \sqrt{9} & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -27 & -9 & 99 & * \\ 18 & -27 & -27 & 121 \end{pmatrix} \xrightarrow{l_{i1}=\frac{a_{i1}^{(1)}}{l_{11}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -9 & -9 & 99 & * \\ 6 & -27 & -27 & 121 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-l_{i1}l_{j1}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & 0 & -9 & 6 \\ \hline 0 & 9-0^2 & * & * \\ -9 & -9-(-9)\cdot 0 & 99-(-9)^2 & * \\ 6 & -27-6\cdot 0 & -27-6\cdot(-9) & 121-6^2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -9 & -9 & 18 & * \\ 6 & -27 & 27 & 85 \end{array}\right)$$

$k = 2$:

$$\left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 9 & * & * \\ -9 & -9 & 18 & * \\ 6 & -27 & 27 & 85 \end{array}\right) \xrightarrow{l_{22}=\sqrt{a_{22}^{(2)}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & \sqrt{9} & * & * \\ -6 & -9 & 18 & * \\ 9 & -27 & 27 & 85 \end{array}\right) \xrightarrow{l_{i2}=\frac{a_{i2}^{(2)}}{l_{22}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 18 & * \\ 9 & -9 & 27 & 85 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-l_{i2}l_{j2}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & -3 & -9 \\ \hline -6 & -3 & 18-(-3)^2 & * \\ 9 & -9 & 27-(-9)\cdot(-3) & 85-(-9)^2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 9 & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

$k = 3$:

$$\left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 9 & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right) \xrightarrow{l_{33}=\sqrt{a_{33}^{(3)}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & \sqrt{9} & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right) \xrightarrow{l_{i3}=\frac{a_{i3}^{(3)}}{l_{33}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{a_{ij}^{(4)}=a_{ij}^{(3)}-l_{i3}l_{j3}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & 0 \\ \hline 9 & -9 & 0 & 4-0^2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

$k = 4$:

$$\left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & * \\ 9 & -9 & 0 & 4 \end{array}\right) \xrightarrow{l_{44}=\sqrt{a_{44}^{(4)}}} \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & * \\ 9 & -9 & 0 & \sqrt{4} \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{c|ccc} 3 & * & * & * \\ 0 & 3 & * & * \\ -6 & -3 & 3 & * \\ 9 & -9 & 0 & 2 \end{array}\right)$$

Damit erhalten wir:

$$A = LL^T, \quad L = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ -6 & -3 & 3 & 0 \\ 9 & -9 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

3 Fehlerbetrachtung

Definition: Gut gestelltes Problem

Praktisch alle Aufgabenstellungen der numerischen Mathematik lassen sich als (eventuell sehr kompliziertes) Nullstellenproblem schreiben:

- gegeben ist eine Funktion g und Eingabedaten x
- suche y mit $g(x, y) = 0$

Folgende Eigenschaften sollte ein solches Problem sinnvollerweise erfüllen:

- *Existenz*: es sollte Lösungen geben
- *Eindeutigkeit*: zu jedem x sollte es genau ein y geben
- *Stetige Abhängigkeit*:[a] der Lösung y von den Eingabedaten x, d. h.

$$x' \to x \quad \Longrightarrow \quad y' = f(x') \to f(x) = y$$

Gilt für das Problem $g(x, y) = 0$ Existenz, Eindeutigkeit und stetige Abhängigkeit, so nennt man das Problem *gut gestellt* („well posed“), ansonsten *schlecht gestellt* („ill posed“).

Müssen schlecht gestellte Probleme behandelt werden, so approximiert man sie in der Regel durch gut gestellte Ersatzprobleme (Regularisierung), wobei die Approximationseigenschaften genau kontrolliert werden müssen.

[a] Stetige Abhängigkeit garantiert, dass (hinreichend) kleine Störungen der Eingabedaten nur kleine Veränderungen der Ergebnisse verursachen.

Beispiel: Gut gestelltes Problem

- Ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$ ist äquivalent zu:

  $$g(x, y) = 0, \quad x = (A, b), \quad g(x, y) = Ay - b$$

  Wir erhalten:

  $$y = f(x) = A^{-1}b, \quad x = (A, b), \quad \det(A) \neq 0$$

- Die größere der beiden Nullstellen von $t^2 + 2pt - q = 0$, $p, q > 0$ ist gegeben durch:

  $$t_2 = -p + \sqrt{p^2 + q}$$

  d. h. das Nullstellenproblem ist äquivalent zu:

  $$g(x, y) = 0, \quad x = (p, q), \quad g(x, y) = y - (-p + \sqrt{p^2 + q})$$

  Wir erhalten:

  $$y = f(x) = -p + \sqrt{p^2 + q}, \quad x = (p, q)^T, \quad p, q > 0$$

Beide Funktionen sind stetig, so dass beide Probleme gut gestellt sind.

3.1 Fehlergrößen

Definition: Fehler

Sei ein gut gestelltes Problem

$$y = f(x), \quad f : X \to Y$$

gegeben mit:

- x bekannt
- X und Y sind Vektorräume mit Normen $\|\cdot\|_X$ bzw. $\|\cdot\|_Y$

Zur numerischen Behandlung wird f durch ein (diskretes, endliches) Problem $\hat{f}$ ersetzt, das anschließend in Floating-Point-Arithmetik als $\tilde{f}$ implementiert wird.

Wir kennen also:

- $f(x) = y$:
  - x sind *exakte Eingabedaten*
  - f ist ein *gut gestelltes Problem*
  - y ist die *exakte Lösung*
- $\hat{f}(x) = \hat{y}$:
  - x sind exakte Eingabedaten
  - $\hat{f}$ ist das *Ersatzproblem*
  - $\hat{y}$ ist die *exakte Lösung des Ersatzproblems*
- $\tilde{f}(\tilde{x}) = \tilde{y}$:
  - $\tilde{x}$ sind Eingabedaten in *Floating-Point-Darstellung*
  - $\tilde{f}$ ist die *Floating-Point-Implementierung des Ersatzproblems*
  - $\tilde{y}$ ist das *Ergebnis des in Floating-Point-Arithmetik durchgeführten Ersatzproblems*

Die Qualität eines Approximationsverfahrens wird dadurch bestimmt, wie weit $\tilde{y}$ von y abweicht. Um diese Abweichung quantitativ zu fassen, werden die folgenden Fehlergrößen definiert:

- *Fehler*:
$$e := \tilde{y} - y$$
- *absoluter Fehler*:
$$e_a := \|\tilde{y} - y\|_Y$$
- *relativer Fehler*:
$$e_r := \frac{\|\tilde{y} - y\|_Y}{\|y\|_Y}, \quad \|y\|_Y \neq 0$$

Definition: Gemischtes Fehlerkriterium

In numerischen Verfahren versucht man den Fehler zu kontrollieren und dabei (wenn möglich) unter eine vom Benutzer vorgegebene Schranke ϵ zu drücken.

Der relative Fehler ist eigentlich aussagekräftiger, kann aber bei kleinen Absolutwerten von y eine unnötig hohe Genauigkeit erzwingen. Deshalb benutzt man in der Praxis häufig ein Kriterium, das beide Fehlerarten kombiniert.

Seien ϵ_a und ϵ_r gegebene Schranken für den absoluten bzw. relativen Fehler.

Beim *gemischten Fehlerkriterium* versucht man eine Approximation $\tilde{y}$ von y zu finden, mit

$$\|\tilde{y} - y\|_Y \leq \epsilon_a + \|y\|_Y \epsilon_r$$

Es gilt:

- Ist der exakte Absolutwert $\|y\|_Y$ sehr klein, dann dominiert ϵ_a und

$$e_a = \|\tilde{y} - y\|_Y \lesssim \epsilon_a$$

- Ist der exakte Absolutwert $\|y\|_Y$ sehr groß, dann dominiert $\|y\|_Y \epsilon_r$ und

$$\|\tilde{y} - y\|_Y \lesssim \|y\|_Y \epsilon_r \quad \Longleftrightarrow \quad e_r = \frac{\|\tilde{y} - y\|_Y}{\|y\|_Y} \lesssim \epsilon_r$$

3.2 Fehlerquellen

3.2.1 Floating-Point-Darstellung von Zahlen

Definition: Fließkommazahl

Eine *Fließkommazahl* zur Basis b hat die Darstellung

$$v \cdot m \cdot b^e$$

Dabei ist:

- $b \in \mathbb{N}$ die *Basis*
- $v = \pm 1$ das *Vorzeichen*
- m die *Mantisse*, ein b-adischer Bruch

$$m = m_{-k} \dots m_{-1} m_0 . m_1 \dots m_l \quad \Longleftrightarrow \quad m = \sum_{i=-k}^{l} m_i \cdot b^{-i}$$

  mit Ziffern $m_i \in \{0, 1, \dots, b-1\}$ und Stellenzahl $k + l + 1$
- $e \in \mathbb{Z}$ der *Exponent*

In dieser Form sind Fließkommadarstellungen einer Zahl nicht eindeutig, denn durch Änderung des Exponenten erhält man z. B.

- $-43\,210\,000$
- $-43.21 \cdot 10^6$
- $-4.321 \cdot 10^7$

Die *normalisierte Darstellung*

$$m = \pm(m_0 . m_1 \dots m_l) \cdot b^e \quad \Longleftrightarrow \quad m = \pm \left(\sum_{i=0}^{l} m_i b^{-i} \right) \cdot b^e, \quad m_0 \neq 0$$

ist für Zahlen $\neq 0$ eindeutig.

Definition: Maschinengenauigkeit

Jede reelle Zahl $x \in \mathbb{R}$ kann als normalisierte Fließkommazahl zur Basis b mit unendlich langer Mantisse dargestellt werden.

Durch Runden erzeugt man aus x eine Fließkommazahl $\tilde{x}$ mit Stellenzahl $l + 1$. Dazu wird in der Regel dasjenige $\tilde{x}$ ausgewählt, das x am nächsten liegt (*nearest Rundung*.)

Betrachten wir normierte Fließkommazahlen zur Basis b mit Mantissenlänge l, so bezeichnet

$$\epsilon_M := \frac{1}{2} b^{-l}$$

die *Maschinengenauigkeit*.

Es gilt:

- ϵ_M ist der maximale relative Fehler, der bei der Umwandlung einer rellen Zahl (bei nearest Rundung) entstehen kann.
- ϵ_M hängt nur von der Basis und der Mantissenlänge, nicht aber vom Exponenten ab.

3.2.2 Eingabefehler, Kondition

Definition: Eingabefehler

Wegen der Umwandlung der Eingabedaten x in Floating-Point-Darstellung $\tilde{x}$ tritt der *Eingabefehler* immer auf und wird deshalb auch als *unvermeidbarer Fehler* bezeichnet:

$$f(\tilde{x}) - f(x)$$

Die Größe dieses Fehleranteils hängt davon ab, wie empfindlich das Originalproblem f auf Störungen in den Eingabedaten reagiert. Der Eingabefehler ist im Wesentlichen nicht änderbar.

Definition: Kondition

Sei $f : X \to Y$. Die kleinsten Konstanten $\varkappa_a$, $\varkappa_r$ mit

$$\|f(x') - f(x)\|_Y \leq \varkappa_a \|x' - x\|_X$$

$$\frac{\|f(x') - f(x)\|_Y}{\|f(x)\|_Y} \leq \varkappa_r \frac{\|x' - x\|_X}{\|x\|_X}$$

und

$$\|x' - x\|_X \leq \delta$$

heißen *absolute Kondition* bzw. *relative Kondition* von f in x und hängen von den benutzten Normen, x und δ ab.

Die Konditionszahlen beschreiben, wie stark f Störungen in x schlimmstenfalls verstärkt.

Kleine Konditionszahlen deuten auf ein gut konditioniertes, große auf ein schlecht konditioniertes Problem hin.

Gut gestellte aber schlecht konditionierte Probleme können sich genauso verhalten wie schlecht gestellte Probleme.

Werden die Störungen in x durch die Umwandlung in ein Floating-Point-Format verursacht, d.h. $x' = \tilde{x}$, so gilt:

$$e_r(x) = \frac{\|\tilde{x} - x\|_X}{\|x\|_X} \leq \epsilon_M$$

bzw.

$$e_r(y) = \frac{\|\tilde{y} - y\|_Y}{\|y\|_Y} \leq \varkappa_r \frac{\|\tilde{x} - x\|_X}{\|x\|_X} \leq \varkappa_r \epsilon_M$$

also

$$e_r(y) \quad \text{falls} \quad \varkappa_r \leq \frac{\epsilon_r}{\epsilon_M}$$

d. h. eine sinnvolle Berechnung von $f(x)$ (relativer Fehler unterhalb ϵ_r) ist nur möglich, wenn die Kondition $\varkappa_r$ in Abhängigkeit von der Maschinengenauigkeit ϵ_M eine gewisse Grenze nicht überschreitet.

Bonus: Konditionszahlen herleiten

Für stetig differenzierbares f kann man relativ einfach obere Schranken für die Konditionszahlen herleiten. Wir betrachten zunächst den einfachen Fall $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Nach dem Mittelwertsatz gilt:

$$f(x') = f(x) + f'(\zeta)(x' - x), \quad \zeta \in [\min(x, x'), \max(x, x')]$$

und damit:

$$|f(x') - f(x)| = |f'(\zeta)||x' - x| \leq \max_{\zeta \in [\min(x,x'),\max(x,x')]} |f'(\zeta)||x' - x|$$

Für alle x' mit $|x' - x| \leq \delta$ gilt:

$$[\min(x, x'), \max(x, x')] \in [x - \delta, x + \delta]$$

und somit:

$$\zeta \in [\min(x, x'), \max(x, x')] \quad \Longrightarrow \quad |\zeta - x| \leq \delta$$

Damit erhalten wir schließlich die Abschätzungen:

$$\varkappa_a \leq \max_{|\zeta - x| \leq \delta} |f'(\zeta)|$$

$$\varkappa_r \leq \frac{|x|}{|f(x)|} \max_{|\zeta - x| \leq \delta} |f'(\zeta)|$$

Definition: Fehlerfortpflanzungsformeln der differentiellen Fehleranalyse

Da die Abschätzung des Maximums oft recht aufwändig ist, ersetzt man sie häufig durch eine einfachere Näherung.

Für zweimal stetig differenzierbares f folgt aus der Taylor-Entwicklung von f um x

$$f(x') = f(x) + f'(x)(x' - x) + R, \quad \mathcal{O}(|x' - x|^2)$$

Für kleine $|x' - x|$ vernachlässigt man das Restglied R und erhält Näherung (Linearisierung)

$$f(x') \approx f(x) + f'(x' - x)$$

Somit ist

$$|f(x') - f(x)| \approx |f'(x)||x' - x|$$

und damit

$$\varkappa_a \approx |f'(x)|$$

Analog erhält man für die Verstärkung des relativen Fehlers:

$$\varkappa_r \approx \frac{|x|}{|f(x)|}|f'(x)|$$

Diese Näherungen bezeichnet man als *Fehlerfortpflanzungsformeln der differentiellen Fehleranalyse*.

Für allgemeines $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ mit Normen $\|\cdot\|_X$ bzw. $\|\cdot\|_Y$ als Vektornormen und $\|\cdot\|_{X,Y}$ als zugehörige Matrixnorm geht man analog vor und erhält:

$$\varkappa_a \approx \|f'(x)\|_{X,Y}, \quad \varkappa_r \approx \frac{\|x\|_X}{\|f(x)\|_Y}\|f'(x)\|_{X,Y}$$

3.2.3 Verfahrensfehler

Definition: Verfahrensfehler

Beim *Verfahrensfehler* wird das in exakter Arithmetik gerechnete Ersatzproblem $\hat{f}$ mit dem Originalproblem f für den selben Input $\tilde{x}$ verglichen:

$$\hat{f}(\tilde{x}) - f(\tilde{x})$$

Die Größe dieses Fehleranteils hängt von der Qualität des Ersatzproblems ab.

Definition: Diskretisierungsparameter

In der Regel hängen Qualität und Aufwand des Ersatzproblems von einem *Diskretisierungsparameter* $h > 0$ ab.

Ein vernünftig gewähltes Ersatzproblem geht für $h \to 0$ in das Originalproblem über, d. h. der Verfahrensfehler geht für $h \to 0$ gegen 0 und der Aufwand in der Regel gegen unendlich.

Das genaue Verhalten des Verfahrensfehlers wird im Einzelfall für jedes Ersatzproblem separat untersucht, insbesondere das asymptotische Verhalten für $h \to 0$ (*Konvergenzuntersuchung*).

Beispiel: Diskretisierungsparameter

- Die LU-Zerlegung zum Lösen linearer Gleichungssysteme liefert in *endlich* vielen Schritten die exakte Lösung, d.h. es kann $\hat{f} = f$ benutzt werden, weshalb der Verfahrensfehler hier 0 ist.
- Für das Originalproblem
$$f(x) = e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$
benutzen wir das Ersatzproblem
$$\hat{f}(x) = \sum_{k=0}^{n_h} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \ldots + \frac{x^{n_h}}{n_h!}, \quad n_h = \left\lfloor \frac{1}{h} \right\rfloor$$
Mit $h \to 0$ gilt $n_h \to \infty$, also auch
$$\hat{f}(x) \to f(x)$$
- Für das Originalproblem
$$f(x) = \int_0^1 g(t)\,\mathrm{d}\,t, \quad g \text{ stetig}$$
benutzen wir als Ersatzproblem einmal die linksseitige Rechteckregel
$$\hat{f}_1(g) = \sum_{k=0}^{n_h-1} \frac{1}{n_h} \cdot g\left(\frac{k}{n_h}\right), \quad n_h = \left\lfloor \frac{1}{h} \right\rfloor$$
bzw. die Trapezregel
$$\hat{f}_2(g) = \sum_{k=0}^{n_h-1} \frac{1}{2n_h} \cdot \left(g\left(\frac{k}{n_h}\right) + g\left(\frac{k+1}{n_h}\right)\right), \quad n_h = \left\lfloor \frac{1}{h} \right\rfloor$$
Mit $h \to 0$ gilt $n_h \to \infty$, also auch
$$\hat{f}_1(x) \to f(x) \quad \text{und} \quad \hat{f}_2(x) \to f(x)$$

3.2.4 Akkumulierter Rundungsfehler, Floating-Point-Arithmetik

Definition: Akkumulierter Rundungsfehler

Das Ersatzproblem $\hat{f}$ besteht aus einer endlichen Anzahl von Elementaroperationen (Additionen, Multiplikationen etc.), die bei der Floating-Point-Implementierung $\tilde{f}$ durch ihre Floating-Point-Äquivalente ersetzt werden.

Jede Floating-Point-Operation erzeugt in der Regel Rundungsfehler, die sich akkumulieren.

Die Größe dieses Fehleranteils hängt davon ab, wie robust das Ersatzproblem auf eine Floating-Point-Implementierung reagiert:

$$\tilde{f}(\tilde{x}) - \hat{f}(\tilde{x})$$

Zu einem Ersatzproblem kann es mehrere Floating-Point-Implementierung geben, die mathematisch äquivalent (d.h. in exakter Arithmetik identisch) sind, aber unterschiedliche Floating-Point-Ergebnisse liefern.

Definition: Lokaler Fehler

Der *lokale Fehler* entsteht durch das Runden des Ergebnisses bei der i-ten Floating-Point-Operation $\tilde{f}_i$, da bei der Ersatzproblem-Operation $\hat{f}_i$ derselbe Input $\tilde{x}$ benutzt wird:

$$\tilde{f}_i(\tilde{x}_{i-1}) - \hat{f}_i(\tilde{x}_{i-1})$$

Für die erste Operation gilt:

$$\tilde{x}_1 - \hat{x}_1 = \tilde{f}_1(\tilde{x}) - \hat{f}_1(\tilde{x})$$

Definition: Fehlerverstärkung

Der Term

$$\hat{f}_2(\tilde{x}_1) - \hat{f}_2(\hat{x}_1)$$

beschreibt die *Fehlerverstärkung* des Fehlers $\tilde{x}_1 - \hat{x}_1$ aus dem ersten Schritt.

Alle weiteren Schritte verlaufen analog.

In jedem Schritt wird also der vorherige Fehler verstärkt und ein neuer lokaler Fehler hinzuaddiert. Deswegen bezeichnet man diesen Fehlertyp als *akkumulierten Rundungsfehler*.

Falls Rundungsfehler das Ergebnis stark verfälschen (d. h. der akkumulierte Fehler sehr groß ist) nennt man eine Implementierung *instabil*, ansonsten ist sie *stabil*. Stabile Implementierungen sind also robust gegenüber Rundungsfehlereffekten.

Ein hoher akkumulierter Rundungsfehler kann durch eine „günstigere“ Floating-Point-Implementierung des Ersatzproblems verändert werden (Summationsreihenfolgen, Vermeidung von Auslöschungen, etc.).

4 Lineare Gleichungssysteme - Direkte Löser II

4.1 Fehlerbetrachtung für lineare Gleichungssysteme

Definition: Konditionszahl einer Matrix

Sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf $\mathbb{R}^n$, A regulär und $\|\Delta A\| < 1/\|A^{-1}\|$, wobei die durch $\|\cdot\|$ induzierte Matrixnorm benutzt wird.

Dann ist $\tilde{A}$ regulär und es gilt

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\varkappa(A)}{1 - \varkappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \cdot \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}\right)$$

mit $\varkappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$.

$\varkappa(A)$ heißt *Konditionszahl der Matrix* A und hat folgende Eigenschaften:

- $\varkappa$ hängt von der verwendeten Norm ab
- ist $\alpha\|B\|' \leq \|B\| \leq \beta\|B\|'$ so gilt $\alpha^2\varkappa'(B) \leq \varkappa(B) \leq \beta^2\varkappa'(B)$, d.h. die Äquivalenz der Normen überträgt sich
- $\varkappa(A) \geq 1$, denn $1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leq \|A^{-1}A\| = \varkappa(A)$
- $\varkappa(A) = \varkappa(A^{-1})$
- $\varkappa(AB) \leq \varkappa(A)\varkappa(B)$

$\|\Delta A\|$ ist üblicherweise sehr viel kleiner als $\|A\|$, d. h. der Zähler der Gleichung oben dominiert, so dass der Eingangsfehler im wesentlichen mit $\varkappa(A)$ verstärkt wird. Daher sollte $\varkappa(A)$ so klein wie möglich sein.

Definition: Vorkonditioniertes System

$\varkappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$ ist wegen $\|A^{-1}\|$ in der Regel nicht berechenbar.

Generell sollte man vor der Berechnung versuchen, die Kondition des Problems zu verbessern.

Betrachte $Ax = b$ und U, V regulär:

$$Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad \underbrace{UAV}_{\tilde{A}}\underbrace{V^{-1}x}_{\tilde{x}} = \underbrace{Ub}_{\tilde{b}}$$

$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ heißt *vorkonditioniertes System*.

Beispiel: Vorkonditioniertes System

Ein optimales, aber nicht praktikables, vorkonditioniertes System für $Ax = b$ ist z. B.:

$$U = A^{-1}, V = I \quad \Longrightarrow \quad \tilde{A} = I \quad \Longrightarrow \quad \varkappa(\tilde{A}) = 1$$

$$Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad \underbrace{UAV}_{\tilde{A}}\underbrace{V^{-1}x}_{\tilde{x}} = \underbrace{Ub}_{\tilde{b}} \quad \Longleftrightarrow \quad Ix = A^{-1}b$$

Bonus: Äquilibrieren

In der Praxis werden für U bzw. V Näherungen für A^{-1} gesucht, die billig zu berechnen sind.

Ein einfacher Ansatz ist Skalieren von Zeilen und Spalten. Dafür können

- Zeilen skaliert werden:

$$U = \begin{pmatrix} u_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_n \end{pmatrix}, \quad V = I$$

- Spalten skaliert werden:

$$U = I, \quad V = \begin{pmatrix} v_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & v_n \end{pmatrix}$$

- Zeilen und Spalten skaliert werden:

$$U = \begin{pmatrix} u_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_n \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} v_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & v_n \end{pmatrix}$$

Eine vernünftige Skalierung sollte erfüllen:

- alle Gleichungen sollten Koeffizienten gleicher Größenordnung haben $\implies$ Zeilen gleicher Norm
- alle Unbekannten sollten mit gleichem Gewicht auftauchen $\implies$ Spalten gleicher Norm

Spalten bzw. Zeilen auf gleiche Norm bringen nennt man *Äquilibrieren*.

Spalten und Zeilen gleichzeitig zu äquilibrieren ist sehr aufwendig, deswegen werden in der Regel entweder Zeilen oder Spalten äquilibriert.

Beispiel: Äquilibrieren

TODO

Definition: Verfahren von Prager-Oettli

Wir betrachten dabei das folgende Szenario:

- A und b sind nur bis auf Störungen B bzw. c bekannt
- $Ax = b$ ist also mit „gewisser Unschärfe“ gegeben
- für vorgelegte Näherungslösung $\tilde{x}$ soll *Plausabilitätsprüfung* durchgeführt werden

Für $x \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ seien

$$|x| = \begin{pmatrix} |x_1| \\ \vdots \\ |x_n| \end{pmatrix}, \quad |A| = \begin{pmatrix} |a_{11}| & \cdots & |a_{1n}| \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |a_{n1}| & \cdots & |a_{nn}| \end{pmatrix}$$

Ist $\det(A) \neq 0$ und $\tilde{x}$ eine Näherungslösung von $Ax = b$ mit *Residuum*

$$\tilde{r} = b - A\tilde{x}$$

sowie

$$B \in \mathbb{R}^{n \times n}, c \in \mathbb{R}^n, \quad \forall i, j : b_{ij} \geq 0, c_i \geq 0$$

mit

$$|\tilde{r}| \leq B|\tilde{x}| + c$$

Dann gibt es $|\Delta A| \leq B$ und $|\Delta b| \leq c$ so, dass $\tilde{x}$ exakte Lösung von

$$(A + \Delta A)\tilde{x} = b + \Delta b$$

ist.[a]

- kennt man B, c so ist $\tilde{x}$ exakte Lösung eines gestörten Ausgangsproblems
- über B, c weiß man auch, wie weit das gestörte Problem höchstens vom Ausgangsproblem entfernt ist
- sind B, c komponentenweise klein, ist $\tilde{x}$ eine gute Näherung von x

[a] Die Ungleichheitszeichen sind jeweils komponentenweise anzuwenden.

Beispiel: Verfahren von Prager-Oettli

TODO

4.2 LU-Zerlegung mit Pivot-Strategie

Definition: LU-Zerlegung mit Pivot-Strategie

Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär. Es lässt sich zeigen, dass eine LU-Zerlegung die geringste Kondition (und damit die geringste Fehleranfälligkeit) hat, wenn die *betragsgrößten Elemente* der Spalte nach einem Schritt der Zerlegung auf die Diagonale sind.

Das heißt nach jedem Zeilentausch gilt:

$$|\tilde{a}_{kk}^{(k-1)}| \geq |\tilde{a}_{ik}^{(k-1)}| \quad \forall i > k$$

Dieses Verfahren nennt sich *Spalten-Pivot-Suche*.

Beispiel: LU-Zerlegung mit Pivot-Strategie

TODO

4.3 Orthogonale Transformationen

Bonus: Orthonormalität

$Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt *orthonormal*, falls die Spaltenvektoren q_i paarweise senkrecht stehen und Länge 1 haben, d. h.

$$\langle q_i, q_j \rangle = \delta = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Sind $Q, \tilde{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ orthonormal, dann gilt:

1. $QQ^T = Q^TQ = I \quad \Longleftrightarrow \quad Q^{-1} = Q^T$
2. $\varkappa_2(Q) = 1$
3. $Q\tilde{Q}$ ist orthonormal

4.3.1 Verfahren von Givens

Definition: Spaltentransformation mithilfe von Drehungen und Spiegelungen

Es gilt:

- Spaltentransformation auf Vielfaches des Einheitsvektors ist Elementaroperation bei der Matrixzerlegung
- für orthonormales Q ist $\varkappa_2(Q) = 1$ (minimal) und damit $\varkappa_2(U) \leq \varkappa_2(A)$
- Drehungen und Spiegelungen sind orthonormal
- im $\mathbb{R}^2$ können Spalten mit Drehungen und Spiegelungen eliminiert werden

Bonus: Verfahren von Givens (Idee)

TODO Grafik von Folie 202/203

Sei ein Vektor u gegeben mit

$$u = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_{i-1} & u_i & u_{i-1} & \cdots & u_n \end{pmatrix}^T \in \mathbb{R}^n$$

Die Eliminierung des Eintrags u_j mithilfe des Eintrags u_i erfolgt dann wie folgt:[a]

- sei $w = \sqrt{u_i^2 + u_j^2}$ mit $j > i$
  - $w = 0$: setze $Q_{ij} = I$
  - $w \neq 0$: setze

$$Q_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & & & s & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & -s & & & c & & \\ & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \pm\frac{u_i}{w}, \quad s = \pm\frac{u_j}{w}$$

- dann ist Q_{ij} orthonormal und es werden nur u_i und u_j verändert:

$$Q_{ij}u = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_{i-1} & \pm w & u_{i+1} & \cdots & u_{j-1} & 0 & u_{j-1} & \cdots & u_n \end{pmatrix}^T$$

[a] später ist wird ein Eintrag u_{ij} mithilfe des zugehörigen Diagonalelements u_{ii} eliminiert.

Definition: Verfahren von Givens

In der Praxis wird das *Givens-Verfahren* wie folgt durchgeführt:

- Analog zur LU-Zerlegung:[a]

$$Ax = b, \quad A = QR \quad \Longleftrightarrow \quad Qy = b, \quad Rx = y$$

- Elimination des Koeffizienten an Position i, j:
  - alle vorhergehenden Koeffizienten sind schon eliminiert ($A \to \tilde{A}$)
  - benutze Q_{ij} mit geeignetem c bzw. s:

$$c = \pm\frac{u_i}{w} = \pm\frac{u_i}{\sqrt{u_i^2 + u_j^2}}, \quad s = \pm\frac{u_j}{w} = \pm\frac{u_j}{\sqrt{u_i^2 + u_j^2}}$$

  - $Q_{ij}\tilde{A}$ verändert nur die i-te und die j-te Zeile von $\tilde{A}$:[b]

$$\tilde{a}_{jk} \to c \cdot \tilde{a}_{jk} + s \cdot \tilde{a}_{ik}, \quad \tilde{a}_{ik} \to -s \cdot \tilde{a}_{jk} + c \cdot \tilde{a}_{ik}$$

  - Q_{ij} eliminiert $\tilde{a}_{ij}$, d.h. $\tilde{a}_{ij} \to 0$
  - Q_{ij} ist durch reelle Zahl (Drehwinkel) ρ_{ij} definiert
  - wähle Vorzeichen so, dass $c \geq 0$, d.h. $\rho_{ij} \in [-\pi/2, \pi/2]$
  - speichere $\rho_{ij} = s$ an der Stelle von $\tilde{a}_{ij}$
  - wir erhalten untere Dreiecksmatrix mit Drehwinkeln ρ_{ij} aus denen Matrizen Q_{ij} rekonstruiert werden können
- Lösen von $Qy = b$:
  - Es gilt

$$y = Q^T b = Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_1 b = Q_{nn-1} \cdot \ldots \cdot Q_{21} b$$

  - betrachte ρ_{ij} in Eliminationsreihenfolge und rekonstruiere Q_{ij} über

$$s = \rho_{ij}, \quad c = \sqrt{1 - s^2}$$

  - führe Matrix-Vektor-Produkte aus[c]
- Auflösen von $Rx = y$ erfolgt durch Rückwärtseinsetzen

Der Aufwand des Verfahrens von Givens ist etwa viermal höher als der einer LU-Zerlegung.

[a] Handhabung von Q ist komplizierter, da Q keine untere Dreiecksmatrix.
[b] Bei der LU-Zerlegung wurde nur eine Zeile verändert.
[c] Dabei verändert $Q_{ij}v$, $v \in \mathbb{R}^n$ nur v_i und v_j.

Beispiel: Verfahren von Givens

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{3\times 3}$:

$$A = \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie das R der QR-Zerlegung nach dem Verfahren von Givens.

$$\tilde{A} := A = \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Eliminieren von $\tilde{a}_{21}$:

$$u = \begin{pmatrix} 15 \\ -20 \end{pmatrix} \implies \tilde{Q}_{21} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

$$c = \frac{u_1}{\|u\|_2} = \frac{15}{\sqrt{15^2 + (-20)^2}} = \frac{3}{5}, \quad s = \frac{-20}{\|u\|_2} = \frac{-20}{\sqrt{15^2 + (-20)^2}} = -\frac{4}{5}$$

$$\tilde{Q}_{21} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & -4/5 \\ 4/5 & 3/5 \end{pmatrix} \implies Q_{21} = \begin{pmatrix} c & s & 0 \\ -s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & -4/5 & 0 \\ 4/5 & 3/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{A} := Q_{21}A = \begin{pmatrix} 3/5 & -4/5 & 0 \\ 4/5 & 3/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 & -25 & 25 \\ -4/5 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Eliminieren von $\tilde{a}_{31}$:[a]

$$u = \begin{pmatrix} 25 \\ 0 \end{pmatrix} \implies \tilde{Q}_{31} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

$$c = \frac{u_1}{\|u\|_2} = \frac{25}{\sqrt{25^2 + 0^2}} = 1, \quad s = \frac{0}{\|u\|_2} = \frac{0}{\sqrt{25^2 + 0^2}} = 0$$

$$\tilde{Q}_{31} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \implies Q_{31} = \begin{pmatrix} c & 0 & s \\ 0 & 1 & 0 \\ -s & 0 & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

$$\tilde{A} := Q_{31}Q_{21}A = IQ_{21}A = \begin{pmatrix} 25 & -25 & 25 \\ -4/5 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Eliminieren von $\tilde{a}_{32}$:

$$u = \begin{pmatrix} 20 \\ -15 \end{pmatrix} \implies \tilde{Q}_{32} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

$$c = \frac{u_1}{\|u\|_2} = \frac{20}{\sqrt{20^2 + (-15)^2}} = \frac{4}{5}, \quad s = \frac{-15}{\|u\|_2} = \frac{-15}{\sqrt{20^2 + (-15)^2}} = -\frac{3}{5}$$

$$\tilde{Q}_{32} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4/5 & -3/5 \\ 3/5 & 4/5 \end{pmatrix} \implies Q_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c & s \\ 0 & -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4/5 & -3/5 \\ 0 & 3/5 & 4/5 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{A} := Q_{32}Q_{31}Q_{21}A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4/5 & -3/5 \\ 0 & 3/5 & 4/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 25 & -25 & 25 \\ 0 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 & -25 & 25 \\ -4/5 & 25 & -25 \\ 0 & -3/5 & 25 \end{pmatrix} =: R$$

[a] Das Element ist bereits eliminiert, daraus folgt direkt $Q_{31} = I$. Der Übung halber wird der Schritt aber trotzdem gemacht.

Bonus: Verfahren von Givens (stabilisierte Variante)

Für $|s| \approx 1$ liefert $c = \sqrt{1-s^2}$ sehr schlechte Werte für c durch Auslöschung. Deswegen benutzt man folgende stabilisierte Variante, um die Informationen zu den Drehmatrizen zu speichern:

- es sei α der Drehwinkel, $c = \cos(\alpha)$ und $s = \sin(\alpha)$
- wähle freies Vorzeichen wieder so, dass $c \geq 0$, d. h. $\alpha \in [-\pi/2, \pi/2]$
- Fallunterscheidung:
  1. $\alpha \in [-\pi/4, \pi/4]$:
     - hier gilt:
     $$|s| \leq \frac{\sqrt{2}}{2} \leq c$$
     - Auslöschungen wegen $|s| \leq \sqrt{2}/2 < 0.8$ bei $c = \sqrt{1-s^2}$ unkritisch
     - wir speichern:
     $$\rho = s$$
     - c und s berechnen sich durch
     $$s = \rho, \quad c = \sqrt{1-s^2}$$
  2. $\alpha \in (-\pi/2, -\pi/4) \cup (\pi/4, \pi/2)$:
     - hier gilt:
     $$|s| > \frac{\sqrt{2}}{2} > c > 0$$
     - Auslöschungen wegen $0 < c < \sqrt{2}/2 < 0.8$ bei $|s| = \sqrt{1-c^2}$ unkritisch
     - damit günstiger c statt s abzuspeichern
     - c legt nur den Betrag von s fest, das Vorzeichen muss separat behandelt werden
     - um zusätzlich diesen Fall vom vorherigen zu unterscheiden benutzen wir:[a]
     $$\rho = \frac{\operatorname{sign}(s)}{c}$$
     - c und s berechnen sich durch
     $$c = \frac{1}{\rho}, \quad s = \operatorname{sign}(\rho) \cdot \sqrt{1-c^2}$$
  3. $\alpha \in \{-\pi/2, \pi/2\}$:
     - hier gilt:
     $$s = \pm 1, \quad c = 0$$
     - wir speichern:
     $$\rho = s$$
     - c und s berechnen sich durch
     $$s = \rho, \quad c = \sqrt{1-s^2} = 0$$

[a] Der Fall ist unterscheidbar, da $|p| = 1/c > 2/\sqrt{2} = \sqrt{2} > 1$, sonst ist $\rho \leq 1$.

4.3.2 Verfahren von Householder

Bonus: Verfahren von Householder (Idee)

Sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gegeben. Wir versuchen die erste Spalte $a = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{n1} \end{pmatrix}^T$ von A auf einen Einheitsvektor $\pm\|a\|_2 e_1$ zu spiegeln.[a]

a legt die Spiegelebene E_a fest, da E_a senkrecht auf v steht mit

$$v = a - \|a\|_2 e_1$$

Um ein beliebiges x an E_a zu spiegeln, wird:

- der Anteil von x senkrecht E_a bestimmt:

$$p = w\langle w, x\rangle, \quad w = \frac{v}{\|v\|_2}$$

- p zweimal von x subtrahiert:

$$x' = x - 2p = x - 2w\langle w, x\rangle = x - 2ww^T x = \underbrace{(I - 2ww^T)}_{Q_+} x = Q_+ x$$

Insgesamt ist eine Spiegelung an der Spiegelebene E_a also eine lineare Abbildung mit Matrix:

$$Q_+ = I - 2ww^T, \quad w = \frac{v}{\|v\|_2}, \quad v = a - \|a\|_2 e_1$$

bzw. für die Spiegelung auf $-\|a\|_2 e_1$:

$$Q_- = I - 2ww^T, \quad w = \frac{v}{\|v\|_2}, \quad v = a + \|a\|_2 e_1$$

Betrachten wir $Q_1 = Q_+$ bzw. $Q_1 = Q_-$ zu $a = a_1$. Es gilt:

- Q_1 mit $\|w\|_2 = 1$ definiert eine Spiegelung an der Hyperebene $\langle w, x\rangle = 0$
- $Q_1 = Q_1^T = Q_1^{-1} \implies Q_1$ orthonormal $\implies \varkappa_2(Q_1) = 1$

Multiplizieren beider Seiten von $Ax = b$ mit Q_1 ergibt:

$$Q_1 A = Q_1 b, \quad Q_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

Wiederholung auf die jeweilige $(n-1)\times(n-1)$-Untermatrix ergibt schließlich

$$Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_1 Ax = Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_1 b \quad \text{mit} \quad Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_1 A = R$$

Damit ist auch

$$A = QR, \quad Q = (Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_1)^{-1} = Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_{n-1}$$

[a] Zunächst wird nur $+\|a\|e_1$ betrachtet. Negatives Vorzeichen funktioniert analog.

Definition: Verfahren von Householder

In der Praxis wird das *Householder-Verfahren* wie folgt durchgeführt:

- Analog zum LU- und Givens-Verfahren:[a]

$$Ax = b, \quad A = QR \quad \Longleftrightarrow \quad Qy = b, \quad Rx = y \quad \Longleftrightarrow \quad Rx = Q^T b$$

- Betrachte $A = \begin{pmatrix} a_1 & \dots & a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
- Berechnen und Speichern der Q_i am Beispiel von Q_1:
  - berechne $\|a_1\|_2$ und speichere Ergebnis zwischen
  - bestimme

$$v = a_1 \mp \|a_1\|_2 e_1 = \begin{pmatrix} a_{11} \mp \|a_1\|_2 \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix}$$

  - v unterscheidet sich nur in der erste Komponente von der ersten Spalte der Ausgangsmatrix $\Longrightarrow$ speichere v über erste Spalte
  - wähle freies Vorzeichen, so dass Auslöschungen vermieden werden:

$$a_{11} < 0 \quad \Longrightarrow \quad - \quad \Longrightarrow \quad Q_1 a_1 = \|a_1\|_2 e_1$$

$$a_{11} \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad + \quad \Longrightarrow \quad Q_1 a_1 = -\|a_1\|_2 e_1$$

  - für Q_1 brauchen wir auch $\|v\|_2$:

$$\begin{aligned} \|v\|_2^2 &= (\mp |a_{11} \mp \|a_1\|_2)^2 + a_{21}^2 + \dots + a_{n1}^2 \\ &= \|a_1\|_2^2 + 2|a_{11}|\|a_1\|^2 + \underbrace{a_{11}^2 + a_{21}^2 + \dots + a_{n1}^2}_{\|a_1\|_2^2} \\ &= 2(\|a_1\|_2^2 + |a_{11}|\|a_1\|_2) \end{aligned}$$

- die Produkte $Q_1 z$ werden wie folgt effizient berechnet:
  - betrachte

$$Q_1 z = \left(I - \frac{2}{\|v\|_2^2} v v^T \right) z = z - \frac{2}{\|v\|_2^2} v \underbrace{v^T z}_{\langle v, z \rangle} = z - \frac{2\langle v, z \rangle}{\|v\|_2^2} v$$

  - berechne zuerst $\langle v, z \rangle$ und dann

$$\alpha = \frac{2\langle v, z \rangle}{\|v\|_2^2}$$

  - schließlich ist

$$Q_1 z = z - \alpha v$$

- Speicherproblem:
  - v belegt ganze Spalte ab Diagonalelement abwärts
  - auf Diagonale sollte aber $\pm\|a_1\|_2$ stehen
  - speichere Diagonale in seperatem Vektor ab

[a] $Q = (Q_{n-1} \cdot \dots \cdot Q_1)^{-1} = Q_1 \cdot \dots \cdot Q_{n-1}$

Beispiel: Householder-Verfahren

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{3\times 3}$:

$$A = \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie das R der QR-Zerlegung nach dem Verfahren von Householder.

$$\tilde{A} := A = \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Spalte $\tilde{a}_1$ transformieren:

$$\|\tilde{a}_1\|_2 = \sqrt{15^2 + (-20)^2 + 0^2} = 25$$

$$v = \tilde{a}_1 \mp \|\tilde{a}_1\|_2 e_1 \overset{25>0}{=\!\Longrightarrow} + \begin{pmatrix} 15 \\ -20 \\ 0 \end{pmatrix} + 25 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 40 \\ -20 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Q_1 = I - \frac{2}{\|v\|_2^2} vv^T = I - \frac{2}{40^2 + (-20)^2 + 0^2} \begin{pmatrix} 40 \\ -20 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 40 & -20 & 0 \end{pmatrix} = \ldots = \begin{pmatrix} -3/5 & 4/5 & 0 \\ 4/5 & 3/5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$$

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -3/5 & 4/5 & 0 \\ 4/5 & 3/5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 15 & 1 & 11 \\ -20 & 32 & -23 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -25 & 25 & -25 \\ 0 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Gespeichert als: $\left(\begin{array}{c|cc} 40 & 25 & -25 \\ -20 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{array}\right)$, $d = \begin{pmatrix} -25 \\ * \\ * \end{pmatrix}$

$$\tilde{A} := Q_1 A = \begin{pmatrix} -25 & 25 & -25 \\ 0 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix}$$

Spalte $\tilde{a}_2$ transformieren:

$$\|\tilde{a}_2\|_2 = \sqrt{20^2 + (-15)^2} = 25$$

$$v = \tilde{a}_2 \mp \|\tilde{a}_2\|_2 e_1 \overset{20>0}{=\!\Longrightarrow} + \begin{pmatrix} 20 \\ -15 \end{pmatrix} + 25 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 45 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{Q}_2 = I - \frac{2}{\|v\|_2^2} vv^T = I - \frac{2}{45^2 + (-15)^2} \begin{pmatrix} 45 \\ -15 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 45 & -15 \end{pmatrix} = \ldots = \begin{pmatrix} -4/5 & 3/5 \\ 3/5 & 4/5 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{Q}_2 = \begin{pmatrix} -4/5 & 3/5 \\ 3/5 & 4/5 \end{pmatrix} \Longrightarrow Q_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -4/5 & 3/5 \\ 0 & 3/5 & 4/5 \end{pmatrix}$$

$$Q_2 Q_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -4/5 & 3/5 \\ 0 & 3/5 & 4/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -25 & 25 & -25 \\ 0 & 20 & -5 \\ 0 & -15 & 35 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c|c} -25 & 25 & -25 \\ \hline 0 & -25 & 25 \\ \hline 0 & 0 & 25 \end{array}\right) := R$$

Gespeichert als: $\left(\begin{array}{c|c|c} 40 & 25 & -25 \\ \hline -20 & 45 & 25 \\ \hline 0 & -15 & * \end{array}\right)$, $d = \begin{pmatrix} -25 \\ -25 \\ 25 \end{pmatrix}$

5 Iterative Löser für lineare Gleichungssysteme

5.1 Grundlagen

Definition: Iteratives Verfahren

Unter einem *iterativem Verfahren* versteht man ein Verfahren zur schrittweisen Annäherung an die Lösung einer Gleichung unter Anwendung eines sich wiederholenden Rechengangs.

Ein allgemeines iteratives Verfahren funktioniert wie folgt:

- starte mit Anfangsnäherung x_0 von x
- erzeuge Folge von Näherungen

$$x_0 \to x_1 \to \ldots \to x_k \to \ldots$$

  so lange bis x_k nahe genug an x liegt

Erzeugung von x_k:

- benutzt man zur Berechnung von x_{k+1} nur den direkten Vorgänger x_k, so heißt das Verfahren *einstufig*, sonst *mehrstufig*
- wir betrachten nur einstufige Verfahren, d. h.

$$x_{k+1} = \Phi_k(x_k)$$

  mit *Verfahrensvorschrift* $\Phi_k : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$
- ist $\Phi_k = \Phi$, d. h. wird in jedem Schritt die selbe Vorschrift benutzt, so heißt das Verfahren *stationär*, sonst *instationär*

Definition: Fehler und Residuum

Ist $x_{k+1} = \Phi_k(x_k)$ ein iteratives Verfahren zur Lösung von $Ax = b$, dann sind der *Fehler* e_k und das *Residuum* r_k im k-ten Schritt gegeben durch:[a]

$$e_k = x - x_k = A^{-1} r_k$$

$$r_k = b - Ax_k = Ae_k$$

Von einem guten Verfahren Φ_k erwartet man, dass e_k für große k klein wird und zwar unabhängig vom Startwert x_0.

Φ_k heißt *konvergent*, falls $\lim_{k\to\infty} e_k = 0$ für alle $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

[a] $Ae_k = A(x - x_k) = Ax - Ax_k = b - Ax_k = r_k$

5.2 Lineare stationäre Verfahren

Bonus: Residueniteration mit Vorkonditionierer (Idee)

Für ein Φ gilt:

$$e_k = x - x_k = A^{-1} r_k$$

d. h. aus x_k und r_k kann x durch

$$x = x_k + A^{-1} r_k$$

bestimmt werden.

Aber:

- A^{-1} ist unbekannt
- A^{-1} zu Berechnen ist genauso aufwendig wie das Lösen des Ausgangsproblems $Ax = b$

Die Idee ist nun A^{-1} durch ein M^{-1} mit $M \approx A$ zu ersetzen, welches aber „einfach“ berechenbar ist.

Definition: Residueniteration mit Vorkonditionierer

Die *Residueniteration* mit *Vorkonditionierer* M ist gegeben durch

$$x_{k+1} = x_k + M^{-1} r_k$$

M wird *Vorkonditionierer* genannt, da

$$x_{k+1} = x_k + M^{-1} r_k = x_k + M^{-1} A e_k = x_k + M^{-1} A (x - x_k)$$

Mit $M^{-1} A \approx I$ folgt

$$x_{k+1} \approx x_k + k - x_k = x$$

In der Praxis wird das Verfahren wie folgt durchgeführt:

- Berechne pro Schritt:[a]
  - $r_k = b - A x_k$
  - löse $M p_k = r_k$, d.h. $p_k = M^{-1} r_k$
  - $x_{k+1} = x_k + p_k$

[a] Der Aufwand besteht im Matrix-Vektor=Produkt Ax_k und dem Invertieren von M, wobei M aber einfach invertierbar sein soll.

Definition: Stationäres lineares Iterationsverfahren (Einstufig)

Ein *einstufiges, stationäres lineares Iterationsverfahren* ist gegeben durch

$$x_{k+1} = \Phi(x_k) = B x_k + d$$

wobei B die *Iterationsmatrix* und d der *Iterationsvektor* ist.

Bonus: Residueniteration mit Vorkonditionierer als einstufiges, stationäres lineares Iterationsverfahren

Bringen wir die Formel für die Residueniteration mit Vorkonditionierer M in die Standardform, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + M^{-1} r_k \\ &= x_k + M^{-1} A e_k \\ &= x_k + M^{-1} A (x - x_k) \\ &= x_k + M^{-1} (b - A x_k) \\ &= x_k + M^{-1} b - M^{-1} A x_k \\ &= x_k - M^{-1} A x_k + M^{-1} b \\ &= \underbrace{(I - M^{-1} A)}_{B} x_k + \underbrace{M^{-1} b}_{d} \\ &= B x_k + d \\ &= \Phi(x_k) \end{aligned}$$

Damit ist die Residueniteration mit Vorkonditionierer M ein Spezialfall eines einstufigen, stationären linearen Iterationsverfahrens.

Definition: Fixpunkteigenschaft

Alle Residueniterationen $\Phi(x)$ mit Vorkonditionierer M besitzen die *Fixpunkteigenschaft*:

$$x = \Phi(x) \quad \Longleftrightarrow \quad Ax = b$$

Definition: Konvergenz

Für *Konvergenz* muss gelten:[a]

$$e_k \xrightarrow{k\to\infty} 0, \quad \forall x_0 \in \mathbb{R}^n \quad \Longleftrightarrow \quad B^k e_0 \xrightarrow{k\to\infty} 0, \quad \forall e_0 \in \mathbb{R}^n$$

Sei $\|\cdot\|$ eine belieblige Vektornorm auf $\mathbb{R}^n$ und $\|\cdot\|_M$ eine beliebige Matrixnorm auf $\mathbb{R}^{n\times n}$. Für

$$x_{k+1} = \Phi(x_k) = Bx_k + d$$

gilt dann[b]

$$\lim_{k\to\infty} \|e_k\| = 0 \quad \forall e_0 \in \mathbb{R}^n \quad \Longleftrightarrow \quad \lim_{k\to\infty} \|B^k\|_M = 0$$

Für den Spektralradius $\rho(A) = \max\{|\lambda|\}$ (betragsgrößter Eigenwert) gilt:

- $\rho(A) \leq \|A\|$ für alle induzierten Matrixnormen
- $\forall \epsilon > 0$ existiert eine induzierte Matrixnorm mit $\rho(A) \leq \|A\| \leq \rho(A) + \epsilon$
- Für jede Matrixnorm gilt

$$\rho(A) = \lim_{k\to\infty} \|A^k\|^{\frac{1}{k}}$$

Sei A regulär, $x_{k+1} = \Phi(x_k) = Bx_k + d$. Φ *konvergiert* genau dann, wenn $\rho(B) < 1$.

Φ konvergiert monoton, wenn $\|B\| < 1$.

Je nach Matrixnorm kann $\|B\| \geq 1$ gelten, obwohl $\rho(B) < 1$. Das Verfahren konvergiert hier auch, aber nicht notwendig monoton.

[a] Wir erkennen, dass das d in $\Phi(x)$ die Konvergenz nicht beeinflusst. Es stellt nur die Fixpunkteigenschaft sicher.
[b] Die Konvergenz des Verfahrens ist also unabhängig von der benutzten Matrix- und Vektornorm.

Beispiel: Konvergenz

TODO

Definition: Jacobi-Verfahren (Gesamtschritt-Verfahren)

Das *Jacobi-Verfahren* ist ein lineares, stationäres Iterationsverfahren. Die Matrix A des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ wird hierzu in einer Diagonalmatrix D, eine strikte untere Dreiecksmatrix E und eine strikte obere Dreiecksmatrix F zerlegt, so dass gilt:

$$A = D - E - F$$

Ausführlich heißt das:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{D} - \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{nn-1} & 0 \end{pmatrix}}_{E} - \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{F}$$

Die komponentenweise Iterationsvorschrift lässt sich dann folgendermaßen für den kompletten Vektor darstellen (wir benutzen $M = D$):

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} + M^{-1} r^{(k)} \\ &= x^{(k)} + D^{-1} \left(b - (D - E - F) x^{(k)} \right) \\ &= x^{(k)} + D^{-1} \left(b + (E + F)\, x^{(k)} \right) - x^{(k)} \\ &= D^{-1} \left(b + (E + F) x^{(k)} \right) \end{aligned}$$

Wegen

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{22}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

erhalten wir komponentenweise

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \ldots, n$$

Wir erhalten die Iterationsmatrix bzw. -vektor

$$B_J = I - M^{-1} A = I - D^{-1}(D - E - F) = D^{-1}(E + F), \quad d_J = M^{-1} b = D^{-1} b$$

Beispiel: Jacobi-Verfahren (Gesamtschritt-Verfahren)

Gegeben sei eine Matrix A, ein Vektor b und ein Startpunkt $x^{(0)}$:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Führen Sie das Jacobi-Verfahren für drei Iterationen aus.

Es gilt die komponentenweise Iterationsvorschrift:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \ldots, n$$

Für $i = 1$:

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - \sum_{j \neq 1} a_{1j} x_j^{(k)} \right) = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} x_2^{(k)} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - 3x_2^{(k)} \right) = \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(k)}$$

Für $i = 2$:

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - \sum_{j \neq 2} a_{2j} x_j^{(k)} \right) = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} x_1^{(k)} \right) = \frac{1}{2} \left(3 - (-1) x_1^{(k)} \right) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(k)}$$

Die Iterationen sind dann wie folgt:

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \to x^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(0)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot 0 \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 3/2 \end{pmatrix} \to x^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(1)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$$

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix} \to x^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(2)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{7}{2} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot (-\frac{7}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -17/8 \\ 5/8 \end{pmatrix}$$

Definition: Diagonaldominante Matrix

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *streng diagonaldominant*, falls die Beträge ihrer Diagonalelemente a_{ii} jeweils größer sind als die Summe der Beträge der restlichen jeweiligen Zeileneinträge a_{ij}, d.h.

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad \forall i = 1, \ldots, n$$

Bei einigen Verfahren zum Lösen von Gleichungssystemen (z. B. Gauß-Seidel-, Jacobi-Verfahren) bietet die Diagonaldominanz der Systemmatrix, ein hinreichendes Kriterium für die Konvergenz des Verfahrens.

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *schwach diagonaldominant*, falls die Beträge ihrer Diagonalelemente a_{ii} jeweils größer oder gleich der Summe der Beträge der restlichen jeweiligen Zeileneinträge a_{ij} sind, d.h.

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

Reelle, symmetrische, schwach diagonaldominante Matrizen mit nichtnegativen Diagonaleinträgen sind positiv semidefinit (spd).

Definition: Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschritt-Verfahren)

Das *Gauß-Seidel-Verfahren* ist ein lineares, stationäres Iterationsverfahren. Gegeben ist ein lineares Gleichungssystem in n Variablen mit den n Gleichungen

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ & & & & & \vdots & \\ a_{n1}x_1 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

Um dieses zu lösen, wird ein Iterationsverfahren durchgeführt. Gegeben sei ein Näherungsvektor $x^{(k)}$ an die exakte Lösung. Nun wird die k-te Gleichung nach der k-ten Variablen x_k aufgelöst, wobei die vorher berechneten Werte des aktuellen Iterationsschritts mit verwendet werden, im Gegensatz zum Jacobi-Verfahren, bei dem nur die Werte des letzten Iterationsschrittes verwendet werden.

Das heißt für den $(k+1)$-ten Iterationsschritt:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \dots, n$$

Das Ergebnis der Rechnung ist ein neuer Näherungsvektor $x^{(k+1)}$ für den gesuchten Lösungsvektor x. Wiederholt man diesen Vorgang, gewinnt man eine Folge von Werten, die sich dem Lösungsvektor im Falle der Konvergenz immer mehr annähern:

$$x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots \to x$$

Wir erhalten die Iterationsmatrix bzw. -vektor (wir verwenden $M = D - E$)

$$B_{GS} = I - M^{-1}A = I - (D-E)^{-1}(D-E-F) = (D-E)^{-1}F, \quad d_{GS} = M^{-1}b = (D-E)^{-1}b$$

Ist A spd, so konvergiert das Gauß-Seidel-Verfahren.[a]

[a] Die Konvergenz ist monoton in der Norm $\|\cdot\|_A$.

Beispiel: Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschritt-Verfahren)

Gegeben sei eine Matrix A, ein Vektor b und ein Startpunkt $x^{(0)}$:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Führen Sie das Gauß-Seidel-Verfahren für drei Iterationen aus.

Es gilt die komponentenweise Iterationsvorschrift:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \ldots, n$$

Für $i = 1$:

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - \underbrace{\sum_{j<1} a_{1j} x_j^{(k+1)}}_{=0} - \sum_{j>1} a_{1j} x_j^{(k)} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - 3x_2^{(k)} \right) = \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(k)}$$

Für $i = 2$:

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - \sum_{j<2} a_{2j} x_j^{(k+1)} - \underbrace{\sum_{j>2} a_{2j} x_j^{(k)}}_{=0} \right) = \frac{1}{2} \left(3 - (-1) x_1^{(k+1)} \right) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(k+1)}$$

Die Iterationen sind dann wie folgt:

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \to x^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(0)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot 0 \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 7/4 \end{pmatrix}$$

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 7/4 \end{pmatrix} \to x^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(1)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{7}{4} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -17/8 \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot (-\frac{17}{8}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -17/8 \\ 7/16 \end{pmatrix}$$

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -17/8 \\ 7/16 \end{pmatrix} \to x^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} x_2^{(2)} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{7}{16} \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} x_1^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5/32 \\ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot (-\frac{5}{32}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5/32 \\ 91/64 \end{pmatrix}$$

Definition: Satz von Stein und Rosenberg

Die Iterationsmatrizen vom Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren sind gegeben durch

$$B_J = D^{-1}(E+F), \quad B_{GS} = (D-E)^{-1}F$$

Sei $A = D - E - F$, D invertierbar, $E + F > 0$ (komponentenweise) und $\rho(B_J) < 1$. Dann gilt:

$$\rho(B_{GS}) < \rho(B_J)$$

Für allgemeines A gibt es Gegenbeispiele mit:

- Jacobi konvergent, Gauß-Seidel nicht
- Gauß-Seidel konvergent, Jacobi nicht
- Jacobi schneller als Gauß-Seidel
- Gauß-Seidel schneller als Jacobi

Definition: Nachiteration

Je besser M die Matrix A approximiert desto schneller konvergiert die Residueniteration.

Wir betrachten einen direkten Löser, wie z.B. die LU-Zerlegung. Wegen Rundungsfehlern wird eine ungenaue Zerlegung $\tilde{L}\tilde{U} \approx A$ bestimmt und $\tilde{x}$ mit $A\tilde{x} \approx b$ berechnet.

Wir erzeugen eine lineare stationäre Iteration mit $M = \tilde{L}\tilde{U}$, die sogenannte *Nachiteration*, die die Qualität von $\tilde{x}$ verbessert.

In der Praxis wird das Verfahren wie folgt durchgeführt:

1. Bestimme mit LU-Zerlegung $\tilde{x}$, $\tilde{L}$, $\tilde{U}$
2. Setze $x_0 = \tilde{x}$
3. Wiederhole, bis $\frac{\|p_k\|}{\|x_{k+1}\|} < \epsilon$:
   a) $r_k = b - A\tilde{x}_k$
   b) $p_k = M^{-1}r_k$, d. h. $\tilde{L}\tilde{U}p_k = r_k$
   c) $x_{k+1} = x_k + p_k$

Ohne Rundungsfehler wäre $M = LU = A$ und $M^{-1} = A^{-1}$ d.h. nach einem Schritt hätten wir die exakte Lösung.

Mit Rundungsfehlern können wir das nicht erwarten, aber trotzdem ist in der Regel

$$B = I - M^{-1}A = I - (\tilde{L}\tilde{U})^{-1}A$$

nahe an der Nullmatrix und damit $\rho(B) \ll 1$, d.h. der Iterationsprozess sollte sehr schnell konvergieren.

Eine schlechte Konvergenz ist ein Indikator für schlechte Kondition des Ausgangsproblems $Ax = b$.

r_k liegt nahe bei 0, d.h. Fehler durch Auslöschung spielen eventuell eine große Rolle, deswegen wird r_k oft in höherer Genauigkeit berechnet.

Ein r_k mit hoher Genauigkeit führt dazu, dass eine Iteration ausreicht.

Ein r_k mit leicher Genauigkeit wie LU-Zerlegung lohnt sich ebenfalls, da die Stabilitätseigenschaften verbessert werden.

Beispiel: Nachiteration

Gegeben sei eine Matrix A ein Vektor b, eine ungenaue Zerlegung $\tilde{L}\tilde{U} \approx A$ mit:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{U} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie die Näherungslösung x_0 für $Ax_0 \approx b$ und führen Sie eine Nachiteration durch.

Es gilt:

$$\tilde{L}\tilde{U}x_0 \approx b \quad \Longrightarrow \quad \tilde{L}y_0 = b, \quad \tilde{U}x_0 = y_0$$

$$\tilde{L}y_0 = b \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{U}x_0 = y_0 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad x_0 = \begin{pmatrix} 5/2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es gilt:

- $r_k = b - Ax_k$
- $\tilde{L}\tilde{U}p_k = r_k$
- $x_{k+1} = x_k + p_k$

$k = 0$:

$$r_0 = b - Ax_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5/2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{L}\tilde{U}p_0 = r_0 \quad \Longrightarrow \quad \tilde{L}z_0 = r_0, \quad \tilde{U}p_0 = z_0$$

$$\tilde{L}z_0 = r_0 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad z_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{U}p_0 = z_0 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad p_0 = \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_0 + p_0 = \begin{pmatrix} 5/2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13/4 \\ -5/2 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

Kennen wir die exakte Lösung $x = \begin{pmatrix} 4 & -3 & 2 \end{pmatrix}^T$ für $Ax = b$, dann können wir folgende Fehlerbetrachtungen durchführen:

$$e_0 = x - x_0 = \begin{pmatrix} 4 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 5/2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \|e_0\|_\infty = \frac{3}{2} = 1.5$$

$$e_1 = x - x_1 = \begin{pmatrix} 4 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 13/4 \\ -5/2 \\ 3/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \|e_1\|_\infty = \frac{3}{4} = 0.75$$

5.2.1 Relaxationsverfahren

Definition: Relaxiertes Jacobi-Verfahren

Nach dem Jacobi-Verfahren gilt:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + D^{-1}r^{(k)}$$

Fügen wir vor dem Korrekturterm einen Parameter $\omega \in \mathbb{R}$ ein und versuchen darüber die Konvergenz günstig zu beeinflussen so erhalten wir das *relaxierte Jacobi-Verfahren* J_ω

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega D^{-1}r^{(k)}$$

Wir erhalten die Iterationsmatrix bzw. -vektor analog zum Jacobi-Verfahren:

$$B_{J_\omega} = (1-\omega)I + \omega B_J = (1-\omega)I + \omega D^{-1}(E+F), \quad d_{J_\omega} = \omega d_J = \omega D^{-1}b$$

Komponentenweise gilt dann

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j^{(k)}\right), \quad i = 1,\ldots,n$$

Die Konvergenz wird durch $\rho(B_{J_\omega})$ bestimmt. Es gilt:

$$B_{J_\omega} = (1-\omega)I + \omega B_J \quad \Longrightarrow \quad \lambda_i(B_{J_\omega}) = 1 - \omega + \omega\lambda_i(B_J)$$

Ist $\omega \in (0,1]$, und konvergiert das Jacobi-Verfahren, dann konvergiert auch das relaxierte Jacobi-Verfahren.

Wähle ω so, dass $\rho(B_{J_\omega})$ möglichst klein ist, d. h. ω_{opt} ist die Lösung von

$$\max_{i=1,\ldots,n} |1 - \omega + \omega\lambda_i(B_J)| \to \min$$

Hat B_J reelle Eigenwerte $-1 < \lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_n < 1$, so ist $\rho(B_{J_\omega})$ minimal für [a]

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{2 - \lambda_1 - \lambda_n}$$

[a] Die Eigenwerte λ_i sind in der Regel nicht bekannt, sie werden deswegen entweder abgeschätzt oder ω wird empirisch bestimmt.

Definition: SOR-Verfahren

Das *Successive Over-Relaxation*-Verfahren (Überrelaxationsverfahren) oder *SOR-Verfahren* ist ein Algorithmus der numerischen Mathematik zur näherungsweisen Lösung von linearen Gleichungssystemen.

Wendet man den Gauß-Seidel-Trick auf das relaxierte Jacobi-Verfahren an, so erhält man das SOR-Verfahren mit

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij}x_j^{(k)}\right), \quad i = 1,\dots,n$$

Für das SOR-Verfahren gilt also:

$$M_{SOR} = \frac{D-E}{\omega}$$

und damit

$$B_{SOR} = (I - \omega D^{-1}E)^{-1}((1-\omega)I + \omega D^{-1}F), \quad d_{SOR} = \omega M_{SOR}^{-1} b$$

Definition: Satz von Kahan

Es gilt

$$\rho(B_{SOR}) \geq |\omega - 1|$$

d. h. das SOR-Verfahren kann für $\omega \notin (0,2)$ *nicht konvergent* sein.

Definition: Satz von Ostrowski und Reich

Ist A spd dann konvergiert das SOR-Verfahren genau dann wenn $\omega \in (0,2)$.

Die Konvergenz ist monoton in $\|\cdot\|_A$.

5.2.2 Symmetrische Varianten

Bonus: Symmetrisches Jacobi-Verfahren

Für das Jacobi-Verfahren hatten wir:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j^{(k)}\right), \quad i = 1,\dots,n$$

Durchlaufen wir den Index i in umgekehrter Reihenfolge, so ändert sich nichts.

Das Jacobi-Verfahren ist also symmetrisch.

Definition: Symmetrisches Gauß-Seidel-Verfahren

Für das Gauß-Seidel-Verfahren hatten wir:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \ldots, n$$

Durchlaufen wir den Index i von 1 bis n, so benutzen wir für $x_i^{(k+1)}$ alle $x_j^{(k+1)}$ mit $j < i$ und erhalten die Gleichung oben.

Durchlaufen wir den Index i von n bis 1, so benutzen wir für $x_i^{(k+1)}$ alle $x_j^{(k+1)}$ mit $j > i$ und erhalten als neues Verfahren das *Rückwärts-Gauß-Seidel-Verfahren*:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k+1)} \right), \quad i = n, \ldots, 1$$

Vorkonditionierer, Iterationsmatrix und Iterationsvektor sind dann gegeben durch:

$$M_{RGS} = D - F, \quad B_{RGS} = (D - F)^{-1} E, \quad d_{RGS} = M_{RGS}^{-1} b$$

Für das *symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren (SGS)* führt man zunächst einen Gauß-Seidel Schritt und dann einen Rückwarts-Gauß-Seidel Schritt durch:

$$x^{(k)} \xrightarrow{GS} B_{GS} x^{(k)} + d_{GS} \xrightarrow{RGS} \underbrace{B_{RGS}(B_{GS} x^{(k)} + d_{GS}) + d_{RGS}}_{x^{(k+1)}}$$

$$\Longrightarrow x^{(k+1)} = \underbrace{B_{RGS} B_{GS}}_{B_{SGS}} x^{(k)} + \underbrace{B_{RGS} d_{GS} + d_{RGS}}_{d_{SGS}}$$

Damit erhalten wir:

$$B_{SGS} = (D - F)^{-1} E (D - E)^{-1} F, \quad M_{SGS} = (D - E) D^{-1} (D - F), \quad d_{SGS} = M_{SGS}^{-1} b$$

Ist A symmetrisch und $a_{ii} > 0$, $i = 1, \ldots, n$ so ist M_{SGS} spd.

5.3 Nichtstationäre Iterationen

5.3.1 Steepest-Descent-Verfahren

Definition: Steepest-Descent-Verfahren

Das *Steepest-Descent-Verfahren* generiert ausgehend von einem Startpunkt $x_0 \in \mathbb{R}^n$ eine Folge von Punkten $x_k \in \mathbb{R}^n$ gemäß der folgenden Iteration:

Starte mit x_0 gegeben, $r_0 = b - Ax_0$ und wiederhole für $M = I$:

$$p_k = M^{-1} r_k = r_k$$

$$s_k = Ap_k$$

$$\alpha_k = \frac{\langle p_k, r_k \rangle}{\langle p_k, s_k \rangle}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k s_k$$

d. h. man geht von x_k in Richtung des steilsten Abstiegs $-\nabla f(x_k)$, bis $\|e_{k+1}\|_A$ minimal wird, also die Folge zu einem stationären Punkt von f konvergiert.[a]

[a] Wählt man f entsprechend, kann damit auch die Lösung für ein $Ax = b$ gefunden werden. Siehe *Konjugierte Gradienten*.

Bonus: Vorkonditionierte Steepest-Descent-Verfahren

Im Steepest-Descent-Verfahren gilt $M = I$.

Für ein $M \neq I$ spd erhalten wir das *vorkonditionierte Steepest-Descent-Verfahren* mit:

$$x_{k+1} = Mx_k + \alpha_k r_k, \quad r_k = -\nabla f(x_k)$$

Beispiel: Steepest-Descent-Verfahren

Gegeben sei das System $Ax = b$ mit dem Startvektor x_0:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wenden Sie das Steepest-Descent-Verfahren auf das System an.

$k = 0$:

$$p_0 = r_0 = b - Ax_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$s_0 = Ap_0 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_0 = \frac{\langle p_0, r_0 \rangle}{\langle p_0, s_0 \rangle} = \frac{\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle}{\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \end{pmatrix} \rangle} = \frac{5}{14}$$

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{5}{14} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/7 \\ 5/14 \end{pmatrix}$$

$$r_1 = r_0 - \alpha_0 s_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{5}{14} \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}$$

$k = 1$:

$$p_1 = r_1 = b - Ax_1 = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5/7 \\ 5/14 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}$$

$$s_1 = Ap_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -9/14 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = \frac{\langle p_1, r_1 \rangle}{\langle p_1, s_1 \rangle} = \frac{\langle \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} \rangle}{\langle \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -9/14 \end{pmatrix} \rangle} = \frac{5}{6}$$

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 p_1 = \begin{pmatrix} 5/7 \\ 5/14 \end{pmatrix} + \frac{5}{6} \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25/28 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$r_2 = r_1 - \alpha_1 s_1 = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} - \frac{5}{6} \begin{pmatrix} 0 \\ -9/14 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/14 \\ 3/28 \end{pmatrix}$$

usw.

5.3.2 Konjugierte Gradienten

Definition: CG-Verfahren

Das *CG-Verfahren* („conjugate gradients“) bzw. das Verfahren der konjugierten Gradienten ist eine effiziente numerische Methode zur Lösung von großen linearen Gleichungssystemen der Form $Ax = b$ mit spd Systemmatrix A.

Die Idee des CG-Verfahrens besteht darin, dass für A spd das Minimieren der quadratischen Form

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle$$

äquivalent zum Lösen von $Ax = b$ ist.

Das Verfahren funktioniert wie folgt:

1. x_0 gegeben, $p_0 = r_0 = b - Ax_0$
2. Wiederhole für $k \geq 0$:

$$\alpha_k = \frac{\langle r_k, r_k\rangle}{\langle p_k, Ap_k\rangle}$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$
$$\beta_k = \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1}\rangle}{\langle r_k, r_k\rangle}$$
$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

Nach höchstens n Schritten ist $e_k = 0$.

Beispiel: CG-Verfahren

Gegeben sei das System $Ax = b$ mit dem Startvektor x_0:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wenden Sie das Konjugierte Gradienten-Verfahren auf das System an.

$k = 0$:

$$p_0 = r_0 = b - Ax_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_0 = \frac{\langle r_0, r_0 \rangle}{\langle p_0, Ap_0 \rangle} = \frac{\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle}{\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle} = \frac{5}{14}$$

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{5}{14} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/7 \\ 5/14 \end{pmatrix}$$

$$r_1 = r_0 - \alpha_0 A p_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{5}{14} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}$$

$$\beta_0 = \frac{\langle r_1, r_1 \rangle}{\langle r_0, r_0 \rangle} = \frac{\langle \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} \rangle}{\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle} = \frac{9}{196}$$

$$p_1 = r_1 + \beta_0 p_0 = \begin{pmatrix} 3/14 \\ -3/7 \end{pmatrix} + \frac{9}{196} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15/49 \\ -75/196 \end{pmatrix}$$

usw.

Definition: Vorkonditioniertes CG-Verfahren

Die Rekursionsvorschrift für $M \neq I$ ist etwas aufwendiger und liefert das *vorkonditionierte CG-Verfahren* bzw. PCG-Verfahren („preconditioned conjugate gradient“) für M, A spd:

1. x_0 gegeben, $r_o = b - Ax_0$, $p_0 = q_0 = M^{-1}r_0$
2. Wiederhole für $k \geq 0$:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \quad \alpha_k = \frac{\langle q_k, r_k \rangle}{\langle p_k, A p_k \rangle}$$

$$p_{k+1} = q_{k+1} + \beta_k p_k, \quad \beta_k = \frac{\langle q_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle q_k, r_k \rangle}$$

Als Vorkonditionierer M benutzt man unter anderem:

- $M = \text{diag}(A) = M_J$
- M aus einem symmetrischen, stationären Verfahren (z. B. symmetrisches Gauß-Seidel-Verfahren):
$$M = M_{SGS} = (D - E)D^{-1}(D - E)^T$$
- unvollständige Cholesky Zerlegung

PCG ist (neben Multigrid) *das* Verfahren für große, dünn besetzte spd Matrizen A.

5.4 Dünn besetzte Matrizen

Bonus: Problem dünn besetzter Matrizen

Bei (fast) allen Iterationsverfahren besteht der wesentliche Aufwand in einem Matrix-Vektor-Produkt und dieser ist proportional zu der Anzahl der Matrixelemente.

Bei vollbesetzten Matrizen in $\mathbb{R}^{n \times n}$ erhalten wir also $\mathcal{O}(n^2)$.

Geht man davon aus, das man höchstens n Iterationen durchführt, so erhält man wieder, wie bei den direkten Lösern, einen Gesamtaufwand von $\mathcal{O}(n^3)$.

In Anwendungen treten aber oft Gleichungssysteme auf, deren Matrix dünn besetzt ist („sparse“), d.h. die Anzahl n_{nz} der Elemente ungleich 0 ist sehr gering (deutlich unter 1%).

Berücksichtigt man bei Matrix-Vektor-Produkten die dünne Besetzungsstruktur der Matrix, so reduziert sich der Aufwand auf $\mathcal{O}(n_{nz})$. In vielen realen Anwendungen ist $n_{nz} \approx n$, so dass der Aufwand dann nur $\mathcal{O}(n)$ ist.

Dünn besetzte Matrizen werden nicht im Standardformat als zweidimensionales Array abgelegt, sondern in einem angepassten Format, das einerseits das einfache Implementieren von Matrix-Vektor-Produkten zulässt und andererseits möglichst wenig Speicherplatz benötigt.

Definition: Compressed Sparse Row

Ein gängiges Datenformat für dünn besetzte Matrizen („sparse matrices“) ist *Compressed Sparse Row (CSR)*.

Bei CSR werden nur die Nichtnullelemente der Matrix abgelegt, sowie entsprechende Indexinformationen:

- im Vektor `val` stehen alle Nichtnullelemente der Matrix in zeilenweiser Anordnung (deshalb *Compressed Sparse Row*)
- der Vektor `col_ind` enthält für jedes Element in `val` den zugehörigen Spaltenindex j
- die Einträge in `row_ind` geben an, ab dem wievielten Element in `val` jeweils eine neue Zeile beginnt (i-Index)

Beispiel: Compressed Sparse Row

Betrachten wir die Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 7 & 0 & 8 \\ 6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 4 & 5 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

In CSR werden dafür folgende Daten gespeichert:

`val`	1	7	8	6	3	2	4	5
`col_ind`	1	3	5	1	2	4	1	2
`row_ind`	1	4	6	7	9			

6 Eigenwerte

6.1 Theorie

Bonus: Wiederholung Eigenwerte

Es gilt:

- $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ hat *Eigenwerte* λ, falls

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

  d. h. falls λ Nullstelle des *charakteristischen Polynoms* p_A ist
- p_A hat Grad n,

$$p_A(\lambda) = c \cdot (\lambda - \lambda_1) \cdot \ldots \cdot (\lambda - \lambda_n), \quad \lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{C}$$

- ist $\lambda_i = \lambda_j$, $i \neq j$, so heißt λ_i *mehrfacher Eigenwert*
- $v_i \in \mathbb{R}^n$ ist Eigenvektor von A zu λ_i, falls $v_i \neq 0$, $Av_i = \lambda_i v_i$
- ist $v_i \in \mathbb{R}^n$ Eigenvektor zu λ_i, dann ist auch $c \cdot v_i$ Eigenvektor zu λ_i ($c \neq 0$)
- bei mehrfachen Eigenwerten unterscheidet man die *algebraische Vielfachheit*[a], und die *geometrische Vielfachheit*[b]
  - für beide Werte gilt der Zusammenhang:

$$1 \leq \text{ geometrische Vielfachheit } \leq \text{ algebraische Vielfachheit}$$

- ist $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär, dann haben A und TAT^{-1} die selben Eigenwerte
- besitzt A n linear unabhängige Eigenvektoren v_i mit Eigenvektoren λ_i, dann gilt

$$A = T \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} T^{-1}, \quad T = \begin{pmatrix} v_1 & \ldots & v_n \end{pmatrix}$$

  d. h. A ist *diagonalisierbar*

[a] d.h. die Vielfachheit der Nullstelle im charakteristischen Polynom p_A
[b] d.h. die Anzahl der linear unabhängigen Eigenvektoren zu dem mehrfachen Eigenwert

Definition: Satz von Gerschgorin

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

$$K = \bigcup_{i=1}^{n} K_i, \quad K_i = \{z \mid z \in \mathbb{C}, |z - a_{ii}| \leq \sum_{j\neq i} |a_{ij}|\}$$

Dann gilt für die Eigenwerte λ_i von A, dass $\lambda_i \in K$ für alle i.

Beispiel: Satz von Gerschgorin

Gegeben sei eine Matrix A mit

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

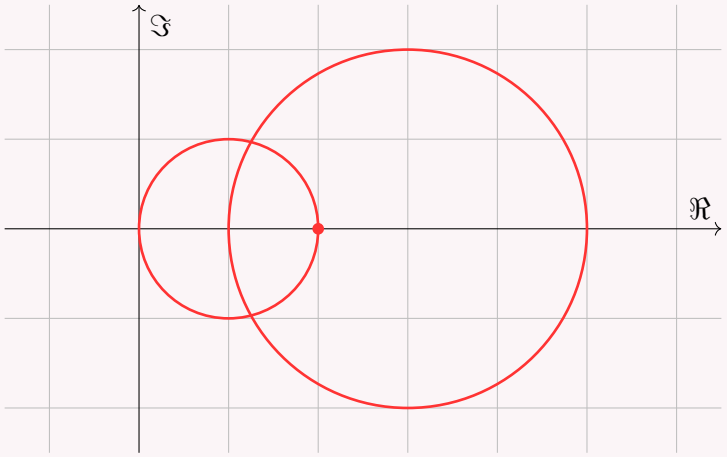
Berechnen Sie die Eigenwerte von A per Hand und wenden Sie dann den Satz von Gerschgorin auf A und A^T an.

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} 3-\lambda & 1 & 1 \\ 0 & 2-\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 1-\lambda \end{pmatrix} = \ldots = (2-\lambda)(\lambda^2 - 4\lambda + 2)$$

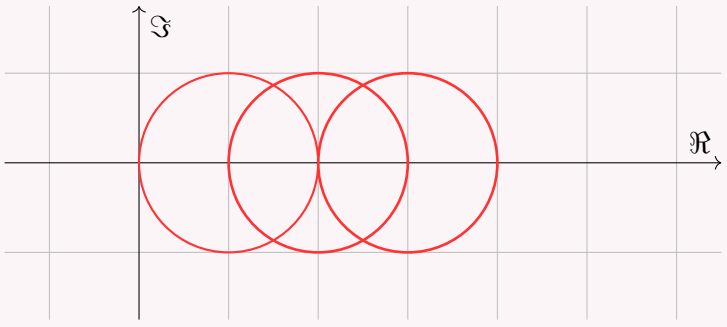
$$p(\lambda) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda_1 = 2, \quad \lambda_{2,3} = 2 \pm \sqrt{4-2} = 2 \pm \sqrt{2}$$

Nach dem Satz von Gerschgorin gilt für A bzw. A^T:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{matrix} m_1 = 3 \\ m_2 = 2 \\ m_2 = 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} r_1 = |1| + |1| = 2 \\ r_2 = |0| + |0| = 0 \\ r_3 = |1| + |0| = 1 \end{matrix}$$



$$A^T = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{matrix} m_1 = 3 \\ m_2 = 2 \\ m_2 = 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} r_1 = |0| + |1| = 1 \\ r_2 = |1| + |0| = 1 \\ r_3 = |1| + |0| = 1 \end{matrix}$$



Bonus: Eigenwertproblem als Nullstellenproblem

Ist A symmetrisch, so gelten zusätzlich folgende Aussagen:

- $\lambda_i \in \mathbb{R}, \forall i$
- es gibt n Eigenvektoren v_i, die linear unabhängig sind, d.h. A ist diagonalisierbar
- die v_i können so gewählt werden, dass sie eine Orthonormalbasis bilden:

$$\langle v_i, v_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \ldots, n$$

- $Q = \begin{pmatrix} v_1 & \ldots & v_n \end{pmatrix}$ ist eine Orthonormalmatrix und es gilt:

$$A = Q\Lambda Q^{-1} = Q\Lambda Q^T, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

  bzw.

$$\Lambda = Q^T A Q$$

- da die v_i eine Orthonormalbasis bilden, kann jeder Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ geschrieben werden als

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i v_i, \quad x_i = \langle x, v_i \rangle$$

  und

$$Ax = \sum_{i=1}^{n} x_i A v_i = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_i v_i$$

Das Eigenwertproblem ist also ein Nullstellenproblem für das Polynom p_A.

Aus der Algebra wissen wir, dass es ab Polynomgrad 5 keinen endlichen Algorithmus zur Lösung dieses Problems gibt. Numerische Algorithmen können deswegen nur iterative Verfahren sein.

6.2 Vektoriteration

Definition: Vektoriteration

Die *Vektoriteration* ist ein numerisches Verfahren zur Berechnung des betragsgrößten Eigenwertes und des dazugehörigen Eigenvektors einer Matrix.

Wir wissen bereits, dass jedes $x \in \mathbb{R}^n$ als

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i v_i, \quad x_i = \langle x, v_i \rangle$$

geschrieben werden kann. Damit gilt:

$$Ax = \sum_i \lambda_i x_i v_i \quad \Longrightarrow \quad A^k x = \sum_i \lambda_i^k x_i v_i$$

Gilt $|\lambda_1| > \cdots > |\lambda_n|$, so dominiert der Anteil $\lambda_1 x_1 v_1$ (falls $x_1 \neq 0$) in $A^k x$.

Wird x oft genug mit A multipliziert, so bleibt im wesentlichen ein Vielfaches von v_1 übrig.

Ist $|\lambda_1| > 1$, so wird $\|A^k x\|_2$ immer größer. Um die damit verbundenen numerischen Probleme zu vermeiden normalisiert man nach jeder Multiplikation mit A den neu berechneten Vektor und erhält somit die *Vektoriteration*:

1. Wähle $x^{(0)}$ mit $\|x^{(0)}\|_2 = 1$ und $x_1^{(0)} = \langle x^{(0)}, v_1 \rangle \neq 0$
2. Wiederhole:

$$y^{(k+1)} = Ax^{(k)}$$

$$x^{(k+1)} = \frac{y^{(k+1)}}{\|y^{(k+1)}\|_2}$$

$$\mu^{(k+1)} = \langle x^{(k)}, y^{(k+1)} \rangle$$

Ist A symmetrisch mit $\lambda_1 > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$. Dann ist die Vektoriteration

$$\mu^{(k)} \xrightarrow{k\to\infty} \lambda_1, \quad x^{(k)} \xrightarrow{k\to\infty} \operatorname{sign}(x_1^{(0)}) v_1$$

falls $x_1^{(0)} = \langle x^{(0)}, v_1 \rangle \neq 0$ ist.

Beispiel: Vektoriteration

Gegeben seien eine Matrix A und ein Startvektor $x^{(0)}$ mit:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad x^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wenden Sie die Vektoriteration an und berechnen Sie den betragsgrößten Eigenwert und den Eigenvektor.

$k = 1$:

$$y^{(1)} = Ax^{(0)} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x^{(1)} = \frac{y^{(1)}}{\|y^{(1)}\|_2} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.89 \\ 0.45 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mu^{(1)} = \langle x^{(0)}, y^{(1)} \rangle = \langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rangle = 2$$

$k = 2$:

$$y^{(2)} = Ax^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x^{(2)} = \frac{y^{(2)}}{\|y^{(2)}\|_2} = \frac{1}{\sqrt{\frac{42}{5}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{42}} \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.77 \\ 0.62 \\ 0.15 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mu^{(2)} = \langle x^{(1)}, y^{(2)} \rangle = \frac{1}{5} \langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rangle = 2.8$$

...

$k = 15$:

$$x^{(15)} \approx \begin{pmatrix} 0.3793 \\ 0.6061 \\ 0.5968 \\ 0.3641 \end{pmatrix}, \quad \mu^{(15)} \approx 3.6177$$

6.3 Jacobi-Verfahren

Definition: Jacobi-Verfahren (Eigenwerte)

Die Idee des *Jacobi-Verfahrens* besteht darin, das jeweils betragsgrößte Außerdiagonalelement mit Hilfe einer Givens-Rotation auf 0 zu bringen, und sich auf diese Art mehr und mehr einer Diagonalmatrix anzunähern.

Es ergibt sich die Iterationsvorschrift:

1. $A^0 = A$
2. Wiederhole:

$$A^{(k+1)} = {Q^{(k)}}^T A^{(k)} Q^{(k)} = \underbrace{Q_k^T \cdot \ldots \cdot Q_1^T}_{{Q^{(k)}}^T} A^{(0)} \underbrace{Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k}_{Q^{(k)}}$$

Q_k wird wie folgt bestimmt:

- suche das betragsgrößte Nebendiagonalelement $a_{i_0 j_0}^{(k-1)}$ von A^{k-1}
- dabei kann $j_0 > i_0$ angenommen werden, da alle Matrizen A^{k-1} symmetrisch sind
- bestimme Q_k so, dass $a_{i_0 j_0}^{(k)} = 0$, also

$$Q_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & & & s & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & -s & & & & c & \\ & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

mit

$$\alpha = \frac{a_{j_0 j_0} - a_{i_0 i_0}}{2 a_{i_0 j_0}} \quad \Longrightarrow \quad c = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha^2}{1+\alpha^2}}}, \quad s = \frac{\operatorname{sign}(\alpha)}{2c\sqrt{1+\alpha^2}}$$

Dann ist (λ_i Eigenwerte, v_i Eigenvektoren)

$$\operatorname{diag}(A^{(k)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(k)} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} = \Lambda$$

$$Q^{(k)} \approx \begin{pmatrix} v_1 & \ldots & v_n \end{pmatrix}$$

Beispiel: Jacobi-Verfahren

Gegeben sei die Matrix A mit:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}$$

Führen Sie das Jacobi-Verfahren für eine Iteration aus und berechnen Sie die Eigenwerte (näherungsweise).

$$A = A^{(0)} = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 3 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad i_0 = 1, \quad j_0 = 2$$

Damit gilt:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

mit

$$\alpha = \frac{a_{j_0 j_0} - a_{i_0 i_0}}{2a_{i_0 j_0}} = \frac{a_{22} - a_{11}}{2a_{12}} = \frac{3-3}{2 \cdot 4} = 0$$

$$\Longrightarrow \quad c = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha^2}{1+\alpha^2}}} = \sqrt{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad s = \frac{\operatorname{sign}(\alpha)}{2c\sqrt{1+\alpha^2}} = \frac{1}{2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{1}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Longrightarrow \quad Q_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad A^{(1)} = Q_1^T A^{(0)} Q_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \ldots = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix}$$

Damit erhalten wir die Eigenwerte und dazugehörigen Eigenvektoren:

$$\lambda_1 = -1, \quad v_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\lambda_2 = 7, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

6.4 QR-Verfahren, Hessenberg-Transformation, Shift-Technik

Definition: QR-Verfahren (singuläre Matrizen)

Mit Givens- bzw. Householder-Transformationen können wir eine *reguläre Matrix* A in $A = QR$ zerlegen, wobei Q orthonormal und R eine obere Dreiecksmatrix ist.

Eine analoge Zerlegung ist auch für *singuläres* A möglich:

- Falls eine Spalte inklusive des Diagonalelements gleich 0 ist, benutzt man als Dreh- bzw. Spiegelmatrix $Q_k = I$.
- Auf der Diagonalen der oberen Dreiecksmatrix R trägt man entsprechend eine 0 ein.
- Wir zerlegen eine beliebige quadratische Matrix A in $A = QR$ und betrachten

$$RQ = Q^T QRQ = Q^T AQ$$

- Da $Q^T = Q^{-1}$ ist, gilt

$$RQ = Q^{-1} AQ$$

  d. h. RQ und $A = QR$ haben die selben Eigenwerte.
- Wir bauen daraus wie üblich eine Iteration auf und erhalten das *QR-Verfahren*:
  1. Starte mit $A^{(0)} = A$
  2. Wiederhole:
     a) Zerlege

$$A^{(k)} = Q_k R_k$$

     b) Berechne

$$A^{(k+1)} = R_k Q_k$$

Bei symmetrischem A konvergieren die $A^{(k)}$ wie bei Jacobi gegen die Diagonalmatrix Λ und die Spalten von $Q^{(k)}$ können wieder als Approximationen der Eigenvektoren benutzt werden.

Definition: Hessenberg-Form

Eine (obere) *Hessenbergmatrix* ist eine quadratische Matrix $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$, deren Einträge unterhalb der ersten Nebendiagonalen gleich Null sind, also $h_{ij} = 0$ für alle $i > j + 1$:

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \cdots & h_{2n} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \cdots & h_{3n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & h_{nn-1} & h_{nn} \end{pmatrix}$$

Analog definiert man die untere Hessenbergmatrix als eine quadratische Matrix, deren Transponierte eine obere Hessenbergmatrix ist.

Ist nur von einer Hessenbergmatrix die Rede, ist meist eine obere Hessenbergmatrix gemeint.

Eine Matrix, die sowohl eine untere als auch eine obere Hessenbergmatrix ist, ist eine Tridiagonalmatrix.

Bonus: Hessenberg-Form und QR-Verfahren

Der Aufwand beim QR-Verfahren entspricht pro Schritt im wesentlichen einer Householder-Zerlegung ($\approx \frac{4}{3}n^3$) und ist damit extrem hoch.

Für das QR-Verfahren bringt die Hessenberg-Form folgenden Vorteil:

Bei der QR-Zerlegung einer Hessenberg-Matrix muss pro Spalte nur das Subdiagonalelement eliminiert werden, was jeweils mit einer einzigen Givens-Rotation erledigt werden kann, so dass der Gesamtaufwand nur noch $\approx n^2$ statt $\approx \frac{4}{3}n^3$ ist.

Hat $A^{(k)}$ Hessenberg-Form und wurde mit Givens-Matrizen in $A^{(k)} = Q_k R_k$ zerlegt, so hat sowohl Q_k als auch $A^{(k+1)} = R_k Q_k$ wieder Hessenberg-Form.

Ist A symmetrisch, so vereinfacht sich das ganze nochmals:

- Die Hessenberg-Transformierte H ist wegen $H = QAQ^{-1} = QAQ^T$ ebenfalls symmetrisch und muss deshalb tridiagonal sein.
- Wird das QR-Verfahren mit tridiagonalem $A^{(0)}$ gestartet, so sind alle $A^{(k)}$ tridiagonal und der Aufwand für die Zerlegung $A^{(k)} = Q_k R_k$ und die Matrixmultiplikation $Q_k R_k$ ist $\approx n$.

Definition: Hessenberg-Transformation

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n-1 \times n}$ eine Untermatrix von A, konstruiert durch Entfernen der ersten Zeile von A, und $\tilde{a}_1$ die erste Spalte von $\tilde{A}$.

Wir konstruieren dann die Householder-Matrix $\tilde{Q}_1$, die $\tilde{a}_1$ eliminiert, d.h.

$$\tilde{Q}_1 \tilde{a}_1 = \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wir erweitern $\tilde{Q}_1$ auf die gesamte orthonormale Matrix $Q_1 \in \mathbb{R}^{n \times b}$, d.h.

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{Q}_1 \end{bmatrix}$$

Dann gilt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} a_{11} & * & \cdots & \cdots & * \\ \alpha_1 & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix}, \quad Q_1 A Q_1^T = Q_1 A Q_1^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & * & \cdots & \cdots & * \\ \alpha_1 & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix}$$

Analoges Vorgehen für Spalte 2 bis $n-2$ liefert

$$H = \underbrace{Q_{n-2} \cdot \ldots \cdot Q_1}_{Q} A \underbrace{Q_1^T \cdot \ldots \cdot Q_{n-2}^T}_{Q^T = Q^{-1}} = \begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & \cdots & * \\ * & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

$H = QAQ^{-1}$ hat dieselben Eigenwerte wie A und besitzt Hessenberg-Form, d.h. das um die erste Nebendiagonale reduzierte untere Dreieck ist identisch 0.

Beispiel: Hessenberg-Transformation

TODO

Bonus: QR-Verfahren mit einfachen Shifts

Mit der Hessenberg-Transformation haben wir den Aufwand reduziert, aber die Konvergenzgeschwindigkeit kann noch verbessert werden. Dazu benutzen wir den folgenden Zusammenhang:

Zerlege statt A die Matrix

$$A - \mu I = QR$$

Dann hat

$$\tilde{A} = RQ + \mu I$$

wegen $Q^T = Q^{-1}$ dieselben Eigenwerte wie A, denn

$$\tilde{A} = RQ + \mu I = Q^T QRQ + \mu I = Q^T(A - \mu I)Q + \mu I = Q^T AQ - \mu Q^T IQ + \mu I = Q^T AQ$$

Damit bauen wir in das QR-Verfahren einen *Shift* ein, d.h. wir ändern die Iteration wie folgt:

1. Starte mit $A^{(0)} = A$ in Hessenberg-Form
2. Wiederhole:
   a) Zerlege
   $$A^{(k)} - \mu^{(k)} I = Q_k R_k$$
   b) Berechne
   $$A^{(k+1)} = R_k Q_k + \mu^{(k)} I$$

wobei $\mu^{(k)}$ geeignet zu bestimmen ist.

Üblicherweise wird versucht, mit dem Shift $\mu^{(k)}$ den betragskleinsten Eigenwert λ_n zu approximieren. Dazu kann das letzte Diagonalelement $\mu^{(k)} = (A^{(k)})_{nn}$ gewählt werden.

Mit dieser Wahl konvergiert $a^{(k)}_{nn-1}$ schnell gegen 0 und $a^{(k)}_{nn}$ gegen λ_n von A, d.h. ist $l > k$ groß genug, dann ist

$$A^{(l)} = \begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & \cdots & * \\ * & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & * & * & * \\ 0 & \cdots & 0 & \epsilon & \tilde{\lambda}_n \end{pmatrix}$$

wobei $\epsilon \approx 0$ nd $\tilde{\lambda}_n \approx \lambda_n$ ist.

Damit haben wir einen Eigenwert approximiert und die restlichen Eigenwerte sind ausschließlich durch die ersten $n-1$ Spalten und Zeilen der Matrix bestimmt. Deshalb streichen wir die letzte Zeile und Spalte und wiederholen das Verfahren auf der verbliebenen Restmatrix.

Diese Reduktionstechnik nennt sich *Deflation*.

Die Implementierung in dieser Form zählt zu den Standardverfahren und findet sich so auch in den einschlägigen Bibliotheken (z.B. `LAPACK`).

Die einfache QR-Iteration ergibt sich, indem alle Shifts zu Null gesetzt werden.

7 Nichtlineare Gleichungen

7.1 Einfache Verfahren und ihre geometrische Interpretation

7.1.1 Bisektions-Verfahren

Definition: Bisektions-Verfahren

Wir setzen $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ stetig voraus.

Ist $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$, dann muss in $[a_0, b_0]$ *mindestens* eine Nullstelle von f liegen.

Betrachte $x_0 = \frac{a_0+b_0}{2}$, also die Intervallmitte.

Wiederhole solange, bis die Intervalllänge $|b_i - a_i|$ oder $|f(x_i)|$ hinreichend klein ist:

- Berechne
$$x_i = \frac{a_i + b_i}{2}$$
- Setze
$$\begin{cases} a_{i+1} = a_i, & b_{i+1} = x_i \quad \text{falls } f(a_i) \cdot f(x_i) < 0 \\ a_{i+1} = x_i, & b_{i+1} = b_i \quad \text{sonst} \end{cases}$$
- Betrachte nun $[a_{i+1}, b_{i+1}]$

Das Bisektions-Verfahren ist ein Einschließungsverfahren.

Beispiel: Bisektions-Verfahren

Gegeben sei die Funktion $f(x)$ und das Intervall $[a_0, b_0]$ mit:

$$f(x) = x^2 - 3, \quad a_0 = 0, \quad b_0 = 2$$

Führen Sie das Bisektions-Verfahren durch.

$k = 0$:

$$x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2} = \frac{0+2}{2} = 1$$

$$f(a_0) \cdot f(x_0) = -3 \cdot (-2) = 6 \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad a_1 = x_0 = 1, \quad b_1 = b_0 = 2$$

$k = 1$:

$$x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} = \frac{1+2}{2} = \frac{3}{2}$$

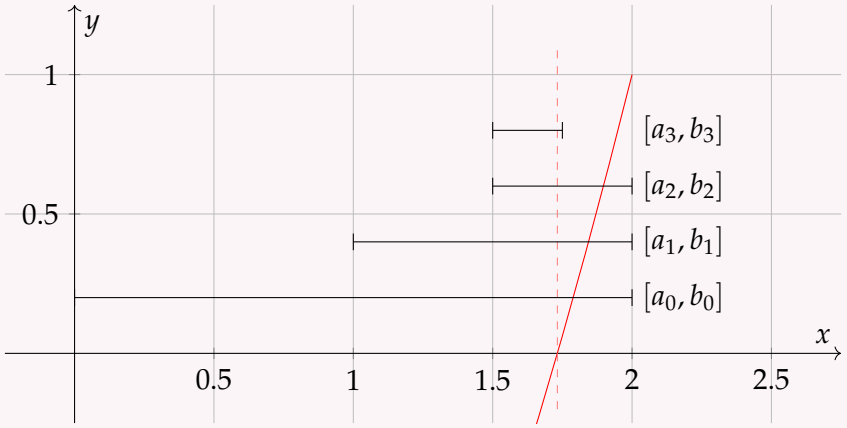
$$f(a_1) \cdot f(x_1) = -2 \cdot \left(-\frac{3}{4}\right) = \frac{3}{2} \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad a_2 = x_1 = \frac{3}{2}, \quad b_2 = b_1 = 2$$

$k = 2$:

$$x_2 = \frac{a_2 + b_2}{2} = \frac{\frac{3}{2}+2}{2} = \frac{7}{4}$$

$$f(a_2) \cdot f(x_2) = \frac{1}{16} \cdot 1 = -\frac{1}{16} < 0 \quad \Longrightarrow \quad a_3 = a_2 = \frac{3}{2}, \quad b_3 = x_2 = \frac{7}{4}$$

usw.



7.1.2 Regula-Falsi-Verfahren

Bonus: Regula-Falsi-Verfahren (Idee)

Wir modifizieren das Bisektions-Verfahren, um die Konvergenzgeschwindigkeit zu erhöhen.

Benutze für x_k nicht die Intervallmitte, sondern zusätzliche Information:

- verbinde $(a_k, f(a_k))$ und $(b_k, f(b_k))$ durch eine Gerade s
- x_k sei jetzt die Nullstelle der Geraden s mit

$$s(x) = f(a_k) + \frac{f(b_k) - f(a_k)}{b_k - a_k} \cdot (x - a_k)$$

$$s(x_k) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad x_k = a_k - \frac{b_k - a_k}{f(b_k) - f(a_k)} = \frac{a_k f(b_k) - b_k f(a_k)}{f(b_k) - f(a_k)}$$

Definition: Regula-Falsi-Verfahren

Das *Regula-Falsi-Verfahren* funktioniert analog zum Bisektions-Verfahren, nur dass x_k wie folgt berechnet wird:

$$x_k = \frac{a_k f(b_k) - b_k f(a_k)}{f(b_k) - f(a_k)}$$

Wiederhole solange, bis die Intervalllänge $|x_{i+1} - x_i|$ oder $|f(x_i)|$ hinreichend klein ist:[a]

- Berechne
$$x_i = \frac{a_k f(b_k) - b_k f(a_k)}{f(b_k) - f(a_k)}$$
- Setze
$$\begin{cases} a_{i+1} = a_i, & b_{i+1} = x_i & \text{falls } f(a_i) \cdot f(x_i) < 0 \\ a_{i+1} = x_i, & b_{i+1} = b_i & \text{sonst} \end{cases}$$
- Betrachte nun $[a_{i+1}, b_{i+1}]$

Das Regula-Falsi-Verfahren ist ein Einschließungsverfahren.

[a] Anderes Abbruchkriterium als beim Bisektions-Verfahren!

Beispiel: Regula-Falsi-Verfahren

Gegeben sei die Funktion $f(x)$ und das Intervall $[a_0, b_0]$ mit:

$$f(x) = x^2 - 3, \quad a_0 = 0, \quad b_0 = 2$$

Führen Sie das Regula-Falsi-Verfahren durch.

$k = 0$:

$$x_0 = \frac{a_0 f(b_0) - b_0 f(a_0)}{f(b_0) - f(a_0)} = \frac{0 - 2 \cdot (-3)}{1 - (-3)} = \frac{3}{2}$$

$$f(a_0) \cdot f(x_0) = -3 \cdot \left(-\frac{3}{4}\right) = \frac{9}{4} \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad a_1 = x_0 = \frac{3}{2}, \quad b_1 = b_0 = 2$$

$k = 1$:

$$x_1 = \frac{a_1 f(b_1) - b_1 f(a_1)}{f(b_1) - f(a_1)} = \frac{\frac{3}{2} \cdot 1 - 2 \cdot \left(-\frac{3}{4}\right)}{1 - \left(-\frac{3}{4}\right)} = \frac{12}{7}$$

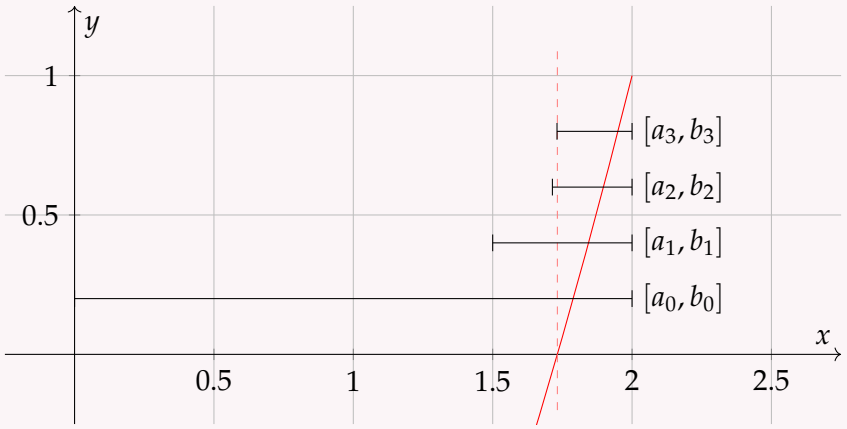
$$f(a_1) \cdot f(x_1) = -\frac{3}{4} \cdot \left(-\frac{3}{49}\right) = \ldots \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad a_2 = x_1 = \frac{12}{7}, \quad b_2 = b_1 = 2$$

$k = 2$:

$$x_2 = \frac{a_2 f(b_2) - b_2 f(a_2)}{f(b_2) - f(a_2)} = \frac{\frac{12}{7} \cdot 1 - 2 \cdot \left(-\frac{3}{49}\right)}{1 - \left(-\frac{3}{49}\right)} = \frac{45}{26}$$

$$f(a_2) \cdot f(x_2) = -\frac{3}{49} \cdot \left(-\frac{3}{676}\right) = \ldots \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad a_3 = x_2 = \frac{45}{26}, \quad b_2 = b_1 = 2$$

usw.



7.1.3 Sekanten-Verfahren

Definition: Sekanten-Verfahren

Wir erhalten das *Sekanten-Verfahren*, indem wir das Regula-Falsi-Verfahren leicht abändern.

Seien x_{-2}, x_{-1} gegeben. Bestimme für $k = 0, 1, \ldots$ die neue Näherung x_k als Nullstelle der Geraden durch die Punkte

$$x_k = x_{k-2} - \frac{x_{k-1} - x_{k-2}}{f(x_{k-1}) - f(x_{k-2})} \cdot f(x_{k-2}) = x_{k-1} - \frac{x_{k-1} - x_{k-2}}{f(x_{k-1}) - f(x_{k-2})} \cdot f(x_{k-1})$$

Das Sekanten-Verfahren ist *kein* Einschließungsverfahren.

Bonus: Konvergenz des Sekanten-Verfahrens

Ist f zweimal stetig differenzierbar in einer hinreichend kleinen Umgebung X der gesuchten Nullstelle x.

Dann konvergiert das Sekanten-Verfahren für alle $x_{-2}, x_{-1} \in X$ und es gibt eine Konstante $c > 0$ so dass

$$|e_k| \leq c|e_{k-1}|^{\frac{1+\sqrt{2}}{2}}, \quad k \to \infty$$

Beispiel: Sekanten-Verfahren

Gegeben sei die Funktion $f(x)$ und die Punkte x_{-2}, x_{-1} mit:

$$f(x) = x^2 - 3, \quad x_{-2} = 0, \quad x_{-1} = 2$$

Führen Sie das Sekanten-Verfahren durch.

$k = 0$:

$$x_0 = x_{-1} - \frac{x_{-1} - x_{-2}}{f(x_{-1}) - f(x_{-2})} \cdot f(x_{-1}) = 2 - \frac{2 - 0}{1 - (-3)} \cdot 1 = \frac{3}{2}$$

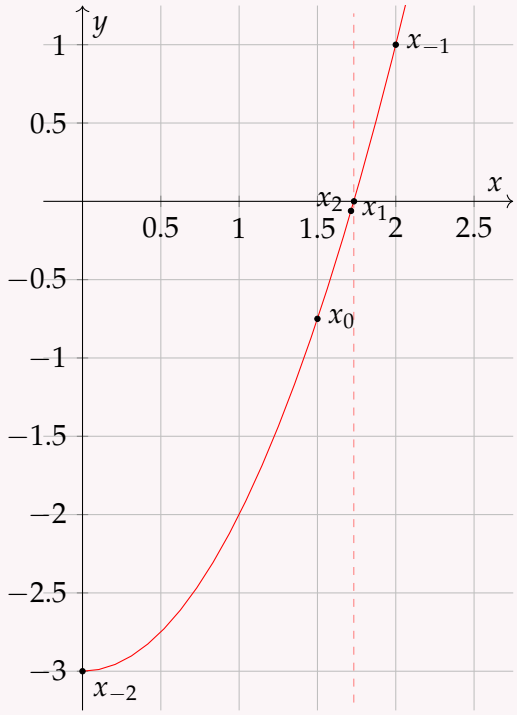
$k = 1$:

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0 - x_{-1}}{f(x_0) - f(x_{-1})} \cdot f(x_0) = \frac{3}{2} - \frac{\frac{3}{2} - 2}{-\frac{3}{4} - 1} \cdot \left(-\frac{3}{4}\right) = \frac{12}{7}$$

$k = 2$:

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot f(x_1) = \frac{12}{7} - \frac{\frac{12}{7} - \frac{3}{2}}{-\frac{3}{49} - \left(-\frac{3}{4}\right)} \cdot \left(-\frac{3}{49}\right) = \frac{26}{15}$$

usw.



7.1.4 Taylor-Reihen-basierte Verfahren, Newton-Verfahren

Bonus: Wiederholung Taylor-Entwicklung

Ist $f(x) = 0$ und f hinreichend oft differenzierbar, x_k gegeben, so liefert eine Taylor-Entwicklung von f um x_k

$$f(y) = f(x_k) + (y - x_k)f'(x_k) + \frac{(y - x_k)^2}{2!}f''(x_k) + \dots$$

bzw. für $y = x \implies f(y) = 0$

$$0 = f(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k) + \frac{(x - x_k)^2}{2!}f''(x_k) + \dots$$

Definition: Newton-Verfahren (Tangente)

Brechen wir die Taylor-Entwicklung nach dem linearen Term ab, dann ist

$$0 = f(x_k) + (\tilde{x} - x_k)f'(x_k) \quad \implies \quad \tilde{x} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

und wir erhalten das *Newton-Verfahren* mit

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

Geometrisch approximiert das Newton-Verfahren also f durch die Tangente g durch den Punkt $(x_k, f(x_k))$ und benutzt die Nullstelle von g als x_{k+1}.

Beispiel: Newton-Verfahren

Gegeben sei die Funktion $f(x)$ und der Punkt x_0 mit:

$$f(x) = x^2 - 3, \quad x_0 = 1$$

Führen Sie das Newton-Verfahren durch.

Es gilt:

$$f(x) = x^2 - 3 \quad \Longrightarrow \quad f'(x) = 2x$$

$k = 0$:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1 - \frac{-2}{2} = \frac{3}{2} = 1.5$$

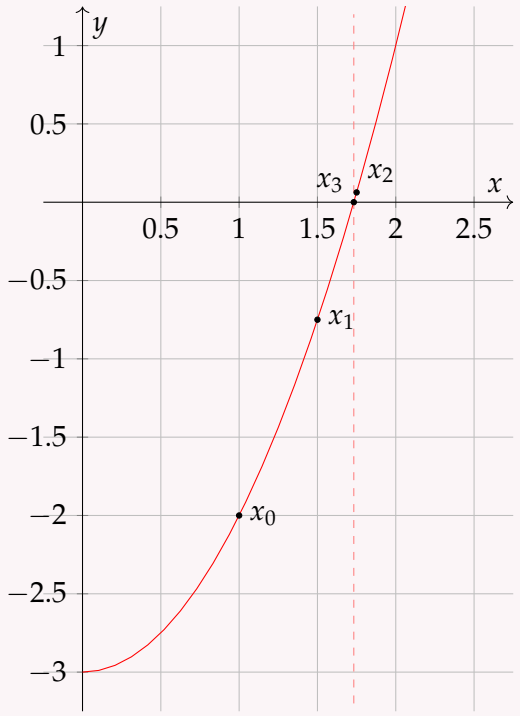
$k = 1$:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = \frac{3}{2} - \frac{-\frac{3}{4}}{3} = \frac{7}{4} = 1.75$$

$k = 2$:

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} = \frac{7}{4} - \frac{\frac{1}{16}}{\frac{7}{2}} = \frac{97}{56} \approx 1.7321$$

usw.



Bonus: Newton-Verfahren (Parabel)

Brechen wir nach dem quadratischen Term ab so folgt

$$0 = f(x_k) + (\tilde{x} - x_k)f'(x_k) + \frac{(\tilde{x} - x_k)^2}{2}f''(x_k)$$

und damit

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k) \pm \sqrt{(f'(x_k))^2 - 2 \cdot f(x_k)f''(x_k)}}{f''(x_k)}$$

Hier wird statt einer Tangente eine Parabel g verwendet.

7.2 Stationäre Iterationen, Banachscher Fixpunktsatz

Definition: Kontraktion

Φ heißt *Kontraktion* bezüglich $\|\cdot\|$ auf $X \subset \mathbb{R}^n$ falls

1. $\Phi : X \to X$
2. $\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \alpha\|x - y\|$, $\forall x, y \in X$ und $\alpha < 1$ unabhängig von x, y[a]

[a] Äquivalent: $\alpha \leq \max_{\zeta \in X} |\Phi'(\zeta)|$

Beispiel: Kontraktion

Gegeben sei die Funktion $f(x) = x - e^{-x}$.

Zeigen Sie, dass das Newton-Verfahren Φ auf dem Intervall $X = [0,1]$ konvergiert bzw. dass Φ eine Kontraktion auf X ist.

Es gilt:

$$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x - \frac{x - e^{-x}}{1 + e^{-x}} = x - \frac{e^x\,(x - e^{-x})}{e^x\,(1 + e^{-x})} = \frac{x}{e^x + 1} - \frac{e^x x - 1}{e^x + 1} = \frac{x+1}{e^x+1}$$

$\Phi(x)$ ist eine Kontraktion, wenn:

- $\Phi(x) \subset X \quad \Longleftrightarrow \quad \forall x \in [0,1] : \Phi(x) \in [0,1]$:
  - Rand:
  $$\Phi(0) = \frac{1}{2} \in [0,1], \quad \Phi(1) = \frac{2}{e+1} \approx 0.5379 \in [0,1]$$
  - lokale Extrema ($\Phi'(x) = 0$):
  $$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad \Longrightarrow \quad \Phi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)}$$
  $$\Phi'(x) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad f(x) = 0 \quad \vee \quad \underbrace{f''(x) = 0}_{f''(x) = -e^{-x} \neq 0}$$
  $$f(x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \Phi(x) = x - \frac{0}{f'(x)} = x \in [0,1]$$
- $\alpha \leq \max\limits_{\zeta \in X} |\Phi'(\zeta)|$:
$$\Phi'(\zeta) = \left(\frac{\zeta+1}{e^\zeta+1}\right)' = \frac{e^\zeta + 1 - (\zeta+1)e^\zeta}{(e^\zeta+1)^2} = \frac{1 - \zeta e^\zeta}{(e^\zeta+1)^2}$$
$$\max_{\zeta \in X} |\Phi'(\zeta)| = \max_{\zeta \in [0,1]} \frac{|1 - \zeta e^\zeta|}{(e^\zeta+1)^2} \leq \frac{\max\limits_{\zeta \in [0,1]} |1 - \zeta e^\zeta|}{\min\limits_{\zeta \in [0,1]} (e^\zeta+1)^2}$$
$$\min_{\zeta \in [0,1]} (e^\zeta + 1)^2 = (1+1)^2 = 4$$
$$\max_{\zeta \in [0,1]} |\underbrace{1 - \zeta e^\zeta}_{\text{mon. fall.}}| = \max\left\{|1 - \zeta e^0|, |1 - \zeta e^1|\right\} = \max\{1, e-1\} = e - 1$$
$$\Longrightarrow \alpha \leq \frac{e-1}{4} \approx \frac{1.718}{4} < \frac{1}{2}$$

□

Definition: Lokale Konvergenz (Iterationen)

Die Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

heißt *lokal konvergent* gegen $x \in X \subset \mathbb{R}^n$ falls

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x \quad \forall x_0 \in X$$

Definition: Banachscher Fixpunktsatz

Sei $X \subset \mathbb{R}^n$ abgeschlossen und $\Phi : X \to X$ eine Kontraktion auf X mit

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \alpha\|x - y\| \quad x, y \in X, \alpha < 1$$

Dann hat Φ genau einen Fixpunkt mit $x = \Phi(x)$ in X.

Die Picard-Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

konvergiert $\forall x_0 \in X$ gegen x. Es gelten die Abschätzungen

$$\|e_k\| = \|x - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1-\alpha}\|x_1 - x_0\| \qquad \textit{a-priori Abschätzung}$$

- $\|e_k\|$ kann allein mit α, x_0, x_1 abgeschätzt werden, ohne Ausrechnen von x_k
- wird benutzt um maximale Zahl der Iterationen für gegebene Genauigkeit zu bestimmen
- oft sehr grob

$$\|e_k\| = \|x - x_k\| \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}\|x_k - x_{k-1}\| \qquad \textit{a-posteriori Abschätzung}$$

- $\|e_k\|$ kann mit α, x_k, x_{k-1} erst abgeschätzt werden, wenn x_k berechnet wurde
- in der Regel genauer als a-priori Abschätzung
- oft als Abbruchkriterium genutzt

Es gilt:

- ist Φ eine Kontraktion, so existiert genau ein Fixpunkt
- x_k konvergiert gegen x
- Kontraktion $\implies$ Konvergenz
- in der Regel erhält man nur lokale Konvergenz ($X \neq \mathbb{R}^n$)
- Banach liefert nur hinreichende, keine notwendigen Konvergenzkriterien

Beispiel: Banachscher Fixpunktsatz

Gegeben sei die Funktion $f(x) = x^2 - 2$.

Zeigen Sie auch, dass $\Phi(x)$ eine Kontraktion auf $X = [1,2]$ ist.

Bestimmen Sie nach dem Banachschen Fixpunktsatz die Abschätzungen für das Newton-Verfahren für $f(x)$.

Die Iteration des Newton-Verfahren ist bekanntermaßen gegeben mit:

$$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x - \frac{2x^2 - 2}{2x} = \frac{x}{2} + \frac{1}{x}$$

Die Fixpunkte sind dann:

$$x = \Phi(x) \quad \Longleftrightarrow \quad x = \frac{x}{2} + \frac{1}{x} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{x}{2} = \frac{1}{x} \quad \Longleftrightarrow \quad x^2 = 2 \quad \Longleftrightarrow \quad x = \pm\sqrt{2}$$

Kontraktion:

- $\Phi(x) \subset X$, denn für $y \in [1,2]$ ist $\Phi(y)$ monoton und es gilt:

$$\Phi(y) = \frac{y}{2} + \frac{1}{y} \geq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad \Longrightarrow \quad \Phi(x) \in [1, \infty)$$

$$\Phi(y) = \frac{y}{2} + \frac{1}{y} \leq \frac{2}{2} + \frac{1}{1} = 2 \quad \Longrightarrow \quad \Phi(x) \in [1,2]$$

- $|\Phi(x) - \Phi(y) \ \leq \alpha|x - y|, \forall x, y \in X$:
  Φ ist auf X differenzierbar mit $\Phi'(y) = \frac{1}{2} - \frac{1}{y^2}$, so dass für alle $\zeta \in X$ gilt:

$$\Phi'(\zeta) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\zeta^2} \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{1} \geq -\frac{1}{2} \implies \Phi'(x) \in \left[-\frac{1}{2}, \infty\right)$$

$$\Phi'(\zeta) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\zeta^2} \leq \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \leq \frac{1}{4} \quad \Longrightarrow \quad \Phi'(x) \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right]$$

  Damit gilt:

$$|\Phi(x) - \Phi(y)| = |\Phi'(\zeta)| \cdot |x - y| \leq \frac{1}{2}|x - y| = \alpha|x - y|, \quad \forall x, y \in X = [1,2]$$

Damit ist Φ eine Kontraktion auf X mit $\alpha = 1/2$ und Φ hat genau einen Fixpunkt auf X.

Dann gilt für die *a-priori Abschätzung*:

$$|e_k| = |x - x_k| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha}|x_1 - x_0| = \left(\frac{1}{2}\right)^{k-1}|x_1 - x_0|$$

Und für die *a-posteriori Abschätzung*:

$$|e_k| = |x - x_k| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha}|x_k - x_{k-1}| = |x_k - x_{k-1}|$$

Definition: Konvergenzgeschwindigkeit

Die Iteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ heißt

- *linear konvergent*, falls es eine Konstante $0 \leq c < 1$ unabhängig von k gibt mit

$$\|e_{k+1}\| \leq c\|e_k\| \quad \forall k$$

- *konvergent mit Ordnung m*, falls es eine Konstante $0 \leq c$ unabhängig von k gibt mit

$$\lim_{k\to\infty} \|e_k\| = 0 \quad \wedge \quad \|e_{k+1}\| \leq c\|e_k\|^m \quad \forall k$$

  - Ist $m > 1$, so nennt man Φ *superlinear konvergent*.
  - Für $m = 2$ erhalten wir *quadratische Konvergenz*.

Bonus: Konvergenzgeschwindigkeit stetig differenzierbarer Funktionen I

Ist $m \geq 2$, x ein Fixpunkt von $\Phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und Φ m-mal stetig differenzierbar in x mit

$$\Phi'(x) = \Phi''(x) = \cdots = \Phi^{(m-1)}(x) = 0$$

dann gibt es ein abgeschlossenes Intervall $X = [x - \delta, x + \delta]$, $\delta > 0$, so dass die Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

für alle $x_0 \in X$ *mindestens mit Ordnung m konvergiert*.

Bonus: Konvergenzgeschwindigkeit stetig differenzierbarer Funktionen II

Ist $m \geq 2$, x ein Fixpunkt von $\Phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und Φ $(m-1)$-mal stetig differenzierbar in x mit

$$\Phi'(x) = \Phi''(x) = \cdots = \Phi^{(m-1)}(x) = 0, \quad \Phi^{(m)} \neq 0$$

dann gibt es ein abgeschlossenes Intervall $X = [x - \delta, x + \delta]$, $\delta > 0$, so dass die Iteration

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

für alle $x_0 \in X$ *genau mit Ordnung m konvergiert*.

Bonus: Konvergenzgeschwindigkeiten relevanter Verfahren

- Das Bisektions-Verfahren ist linear konvergent mit $c = 1/2$.
- Das Regula-Falsi-Verfahren ist linear konvergent.
- Das Sekanten-Verfahren hat die Konvergenzordnung $m = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$.

7.3 Newton-Verfahren

Definition: Konvergenzgeschwindigkeit des Newton-Verfahrens (einfache Nullstellen)

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sei zweimal stetig differenzierbar mit $f(x) = 0$, $f'(x) \neq 0$, d. h. x ist eine *einfache Nullstelle* von f.

Liegt x_0 nahe genug an x, dann konvergiert das Newton-Verfahren *quadratisch* gegen x.

Definition: Konvergenzgeschwindigkeit des Newton-Verfahrens (mehrfache Nullstellen)

Für *mehrfache Nullstellen* ist das Newton-Verfahren wohldefiniert und konvergiert nur *linear* in einer Umgebung von x.

Verbesserte Variante 1:

- Setze
$$\tilde{\Phi}(y) = y - q \cdot \frac{f(y)}{f'(y)}$$
und iteriere
$$x_{k-1} = \tilde{\Phi}(x_k)$$
- Durch Ausrechnen erhält man $\tilde{\Phi}(x) = 0$ und damit (mind.) quadratische Konvergenz.
- Nachteil: Vielfachheit von q muss bekannt sein.

Verbesserte Variante 2:

- x ist q-fache Nullstelle, daher erhalten wir aus einer Taylorentwicklung von f
$$f(y) = \frac{1}{q!}(y-x)^q f^{(q)}(\zeta), \quad f'(y) = \frac{1}{(q-1)!}(y-x)^{q-1} f^{(q)}(\eta)$$
- Da $f^{(q)}(x) \neq 0$ ist, folgt für y nahe x, dass $f^{(q)}(\zeta) \neq 0$ und $f^{(q)}(\eta) \neq 0$ und damit
$$\tilde{f}(y) = \frac{f(y)}{f'(y)} = \frac{\frac{1}{q!}(y-x)^q f^{(q)}(\zeta)}{\frac{1}{(q-1)!}(y-x)^{q-1} f^{(q)}(\eta)} = \frac{1}{q} \cdot (y-x) \cdot \frac{f^{(q)}(\zeta)}{f^{(q)}(\eta)}$$
d. h. x ist einfache Nullstelle von $\tilde{f} = \frac{f}{f'}$
- wird das Newton-Verfahren auf $\tilde{f}$ angewandt, konvergiert es quadratisch
- Vielfachheit q wird hier nicht explizit benutzt
- Nachteil: komplizierte Iterationsvorschrift:
$$\Phi(y) = y - \frac{\tilde{f}(y)}{\tilde{f}'(y)} = \ldots = y - \frac{f(y)f'(y)}{(f'(y))^2 - f(y)f''(y)}$$
in der pro Schritt neben f und f' auch noch f'' auszuwerten ist.

Definition: Newton-Verfahren (mehrdimensional)

Für ein $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ erhalten wir die Taylorentwicklung

$$f(y) = f(x_k) + J(x_k)(y - x_k) + R$$

mit der Jacobi-Matrix J von f in x_k

$$J = \begin{pmatrix} \partial_1 f_1(x_k) & \cdots & \partial_n f_1(x_k) \\ \vdots & & \vdots \\ \partial_1 f_n(x_k) & \cdots & \partial_n f_n(x_k) \end{pmatrix}$$

Dann gilt für reguläres $J(x_k)$ direkt[a]

$$x_{k+1} = x_k - (J(x_k))^{-1} f(x_k)$$

In diesem Fall konvergiert das Newton-Verfahren quadratisch.

Die Behandlung für eine singuläre Jacobi-Matrix ist etwas komplizierter als im skalaren Fall.[b]

[a] Eine reguläre Jacobi-Matrix entspricht einer einfachen Nullstelle im eindimensionalen Fall.
[b] Eine singuläre Jacobi-Matrix entspricht einer mehrfachen Nullstelle im eindimensionalen Fall.

8 Interpolation

8.1 Einleitung

Definition: Interpolation

Der Begriff *Interpolation* bescheibt eine Klasse von Problemen und Verfahren.

Zu gegebenen diskreten Daten (z. B. Messwerten) soll eine stetige Funktion (die sogenannte *Interpolante* oder *Interpolierende*) gefunden werden, die diese Daten abbildet.

Man sagt dann, die Funktion *interpoliert* die Daten.

8.2 Polynominterpolation

Definition: Vandermonde-Matrix

Die *Vandermonde-Matrix* spielt bei der Interpolation von Funktionen eine wichtige Rolle:

Wenn an den Stützstellen $(x_0, x_1, \ldots, x_n)$ die Funktionswerte $(y_0, y_1, \ldots, y_n)$ durch ein Polynom p vom Grad n (oder kleiner) interpoliert werden sollen, dann führt der Ansatz

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x^1 + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

auf das lineare Gleichungssystem

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}}_{V(x_0,\ldots,x_n)} \underbrace{\begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}}_{\alpha} = \underbrace{\begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{y}$$

mit einer Vandermonde-Matrix $V x_0, \ldots, x_n)$ als Koeffizientenmatrix.[a]

Ist $x_i \neq x_j$ $(\forall i \neq j)$ so gibt es genau ein Polynom $p_n(x)$ mit Grad $\leq n$, das $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$ interpoliert.

[a] Beachte: Für ein Polynom vom Grad n haben wir $n+1$ Koeffizienten!

Definition: Vandermonde-Determinante

Die Determinante der Vandermonde-Matrix wird auch *Vandermonde-Determinante* genannt. Sie hat den Wert

$$\det V(x_0, \ldots, x_n) = \prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i)$$

Insbesondere ist die Vandermonde-Matrix genau dann regulär, wenn die x_i paarweise verschieden sind.

Definition: Horner-Schema

Um Zwischenstellen eines Polynoms $p_n(x)$ auszuwerten, nutzt man in der Regel nicht direkt die Form

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$$

Diese Auswertung ist teuer und durch die vielen Summationen sehr anfällig für Rundungsfehler.

Besser ist hier das *Horner-Schema*:

- $p_n(x)$ wird wie folgt umgeformt:

$$\begin{aligned} p_n(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n \\ &= a_0 + x\left(a_1 + a_2 x + \ldots + a_n x^{n-1}\right) \\ &= a_0 + x\left(a_1 + x\left(a_2 + \ldots + a_n x^{n-2}\right)\right) \\ &= \ldots \\ &= a_0 + x\left(a_1 + x\left(a_2 + x\left(\ldots + x\left(a_{n-1} + x\underbrace{a_n}_{q_0}\right)\right)\right)\right) \\ &\qquad \underbrace{\qquad\qquad}_{q_1} \\ &\qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\ldots} \\ &\qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{q_{n-2}} \\ &\qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{q_n - 1} \\ &\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{q_n} \end{aligned}$$

- Berechne schrittweise von innen nach außen:

$$\begin{aligned} q_0 &= a_n \\ q_1 &= a_{n-1} + x \cdot q_0 \\ q_2 &= a_{n-2} + x \cdot q_1 \\ &\ldots \end{aligned}$$

  also

$$q_0 = a_n, \quad q_k = a_{n-k} + x \cdot q_{k-1}, \quad k = 1, \ldots, n$$

  und damit

$$p_n(x) = q_n$$

Definition: Lagrange-Polynom

Wir betrachten $x_0, \ldots, x_n$ und definieren das j-te *Lagrange-Polynom* als

$$L_j(x) = \frac{x - x_0}{x_j - x_0} \cdot \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \cdot \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} \cdot \ldots \cdot \frac{x - x_n}{x_j - x_n}$$

L_j ist wohldefiniert, wenn die x_i paarweise verschieden sind und hat Grad n.

Außerdem gilt

$$L_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Mit den Lagrange-Polynomen L_j können wir das Interpolationspolynom einfach ermitteln mit

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \cdot L_j(x)$$

Bei der Benutzung der Lagrange-Polynome muss kein Gleichungssystem gelöst werden, allerdings müssen sämtliche L_j verändert werden, wenn ein weiterer Datenpunkt hinzukommt.

Beispiel: Lagrange-Polynom

Gegeben seien die folgenden Datenpunkte:

x_i	-1	0	1	2
y_i	2	2	2	8

Berechnen Sie das zugehörige Lagrange-Interpolationspolynom.

Die Lagrange-Polynome sind wie folgt:

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} \cdot \frac{x - x_3}{x_0 - x_3} = \frac{x - 0}{-1 - 0} \cdot \frac{x - 1}{-1 - 1} \cdot \frac{x - 2}{-1 - 2} = -\frac{x(x-1)(x-2)}{6}$$

$$L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \cdot \frac{x - x_3}{x_1 - x_3} = \frac{x - (-1)}{0 - (-1)} \cdot \frac{x - 1}{0 - 1} \cdot \frac{x - 2}{0 - 2} = \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{2}$$

$$L_2(x) = \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \cdot \frac{x - x_3}{x_2 - x_3} = \frac{x - (-1)}{1 - (-1)} \cdot \frac{x - 0}{1 - 0} \cdot \frac{x - 2}{1 - 2} = -\frac{(x+1)x(x-2)}{2}$$

$$L_3(x) = \frac{x - x_0}{x_3 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_3 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_3 - x_2} = \frac{x - (-1)}{2 - (-1)} \cdot \frac{x - 0}{2 - 0} \cdot \frac{x - 1}{2 - 1} = \frac{(x+1)x(x-2)}{6}$$

Damit ist das Lagrange-Interpolationspolynom $p(x)$:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_0 L_0 + y_1 L_1 + y_2 L_2 + y_3 L_3 \\ &= -\frac{2x(x-1)(x-2)}{6} + \frac{2(x+1)(x-1)(x-2)}{2} - \frac{2(x+1)x(x-2)}{2} + \frac{8(x+1)x(x-2)}{6} \\ &= \ldots \\ &= x^3 - x + 2 \end{aligned}$$

Definition: Newton-Interpolationspolynom

Ein *Newton-Interpolationspolynom* ist ein Interpolationspolynom für eine bestimmte Menge von Datenpunkten.

Gegeben seien $n+1$ paarweise verschiedene Datenpunkte $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$.

Das *Newton-Interpolationspolynom* ist dann eine Linearkombination der Newton-Basispolynome $N_j(x)$ mit

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j N_j(x)$$

$$= a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + a_n(x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1})$$

wobei

$$N_j(x) = \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i)$$

Die a_j lassen sich wie folgt mithilfe der *Methode der dividierten Differenzen* berechnen.

Es gilt

$$a_j = d_{n,0}, \quad j = 0, \ldots, n$$

Dabei ist

$$d_{n,m} = \frac{d_{n,m+1} - d_{n-1,m}}{x_n - x_m}, \quad n > m$$

mit

$$d_{i,i} = y_i, \quad i = 0, 1, \ldots$$

Bei gegebenen Punkten (x_i, y_i) kann damit punktweise (Zeile für Zeile) folgendes Schema aufgebaut werden:

$$\begin{array}{lllllllllll}
y_0 & = & d_{0,0} & = & a_0 & & & & & & \\
 & & & \searrow & & & & & & & \\
y_1 & = & d_{1,1} & \to & d_{1,0} & = & a_1 & & & & \\
 & & & \searrow & & \searrow & & & & & \\
y_2 & = & d_{2,2} & \to & d_{2,1} & \to & d_{2,0} & = & a_2 & & \\
\vdots & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\
y_{n-1} & = & d_{n-1,n-1} & \to & d_{n-1,n-2} & \to & d_{n-1,n-3} & \cdots & \to & d_{n-1,0} & = & a_{n-1} \\
 & & & \searrow & & \searrow & & & \searrow & & \\
y_n & = & d_{n,n} & \to & d_{n,n-1} & \to & d_{n,n-2} & \cdots & \to & d_{n,1} & \to & d_{n,0} & = & a_n
\end{array}$$

Wird ein Punkt hinzugefügt, wird das Schema lediglich um eine Zeile erweitert.

Insgesamt ist das Newton-Interpolationspolynom also gegeben mit

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} d_{j,0} N_j(x)$$

$$= d_{0,0} + d_{1,0}(x - x_0) + d_{2,0}(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + d_{n,0}(x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1})$$

Beispiel: Newton-Interpolationspolynom

Gegeben seien die folgenden Datenpunkte:

x_i	-1	0	1	2
y_i	2	2	2	8

Berechnen Sie das zugehörige Newton-Interpolationspolynom.

Das Newton-Interpolationspolynom ist:

$$p_3(x) = \sum_{j=0}^{3} d_{j,0} N_j(x)$$

$$= a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

Es gilt:

$$\begin{array}{lllllllllll}
y_0 & = & d_{0,0} = 2 & = & a_0 & & & & & & \\
 & & & \searrow & & & & & & & \\
y_1 & = & d_{1,1} = 2 & \to & d_{1,0} = \frac{d_{1,1}-d_{0,0}}{x_1-x_0} = \frac{2-2}{0+1} = 0 & = & a_1 & & & & \\
 & & & \searrow & & & \searrow & & & & \\
y_2 & = & d_{2,2} = 2 & \to & d_{2,1} = \frac{d_{2,2}-d_{1,1}}{x_2-x_1} = \frac{2-2}{1-0} = 0 & \to & d_{2,0} = \frac{d_{2,1}-d_{1,0}}{x_2-x_0} = \frac{0-0}{1+1} = 0 & = & a_2 & & \\
 & & & \searrow & & & \searrow & & \searrow & & \\
y_3 & = & d_{3,3} = 8 & \to & d_{3,2} = \frac{d_{3,3}-d_{2,2}}{x_3-x_2} = \frac{8-2}{2-1} = 6 & \to & d_{3,1} = \frac{d_{3,2}-d_{2,1}}{x_3-x_1} = \frac{6-0}{2-0} = 3 & \to & d_{3,0} = \ldots = 1 & = & a_3
\end{array}$$

Damit ist:

$$p_3(x) = 2 + 1(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) = 2 + (x + 1)x(x - 1) = 2 + x(x^2 - 1) = 2 - x + x^3$$

□

8.3 Splines

Definition: Polynom-Spline

Gegeben seien eine natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}$ und $n + 1$ Stützstellen $x_0 < x_1 < \ldots < x_n \in \mathbb{R}$ sowie $n + 1$ Funktionswerte $y_0, y_1, \ldots, y_n \in \mathbb{R}$.

Gesucht ist eine stückweise polynomiale Funktion, ein *Polynom-Spline*

$$S : [x_0, x_n] \to \mathbb{R}$$

mit $S(x_i) = y_i$ für $i = 0, 1, \ldots, n - 1$, bei der für $i = 0, \ldots, n - 1$ die Teilfunktionen

$$s_i := S|_{[x_i, x_{i+1}]} : [x_i, x_{i+1}] \to \mathbb{R}$$

auf die Teilintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ Polynome sind.

Bonus: Polygonzug

Bei Polynomgrad ≤ 1 auf $[x_i, x_{i+1}]$ und stetigen Übergängen erhalten wir einen interpolierenden *Polygonzug*.

TODO Grafik von Folie 495

Es gilt:

$$s_i(x) = mx + b = \underbrace{\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}}_{=m} \cdot x + \underbrace{y_i - \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot x_i}_{=b=y_i - m \cdot x_i}$$

Definition: Kubischer Polynom-Spline

In der Praxis werden *kubische Polynom-Splines* ($k = 3$) am häufigsten benutzt:

$$s_i := S_3|_{[x_i, x_{i+1}]} = a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3$$

S_3 ist zweimal stetig differenzierbar auf $[x_0, x_n]$, also insbesondere an den Nahtstellen x_i, $i = 1, \ldots, n-1$.

Wir haben n Intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, n-1$, so dass $4n$ Koeffizienten a_i, b_i, c_i, d_i zu bestimmen sind für die n Polynome s_i.

Für alle kubischen Polynom-Splines gelten folgende Bedingungsgleichungen:

- $2n$ Bedingungen für die Interpolation:

$$\begin{aligned} s_0(x_0) &= y_0 \\ s_0(x_1) &= y_1 \\ s_1(x_1) &= y_1 \\ s_1(x_2) &= y_2 \\ s_2(x_2) &= y_2 \\ &\vdots \\ s_{n-1}(x_{n-1}) &= y_{n-1} \\ s_{n-1}(x_n) &= y_n \end{aligned}$$

- $n-1$ Glattheitsbedingungen für die erste Ableitung:

$$\begin{aligned} s_0'(x_1) &= s_1'(x_1) \\ s_1'(x_2) &= s_2'(x_2) \\ &\vdots \\ s_{n-2}'(x_{n-1}) &= s_{n-1}'(x_{n-1}) \end{aligned}$$

- $n-1$ Glattheitsbedingungen für die zweite Ableitung:

$$\begin{aligned} s_0''(x_1) &= s_1''(x_1) \\ s_1''(x_2) &= s_2''(x_2) \\ &\vdots \\ s_{n-2}''(x_{n-1}) &= s_{n-1}''(x_{n-1}) \end{aligned}$$

Damit haben wir $4n-2$ Gleichungen für $4n$ Unbekannte und brauchen zwei zusätzliche *Abschlussbedingungen*.

Bonus: Moment (Idee)

Die zweite Ableitung eines kubischen Splines S_3 ist ein linearer Spline (Polygonzug).

Dieser kann wie folgt berechnet werden:

$$s_i'' = \frac{x_{i+1} - x}{h_i} \cdot \beta_i + \frac{x - x_i}{h_i} \cdot \beta_{i-1}, \quad h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 1, \ldots, n-1$$

β_i sind die sogenannten *Momente*, welche den Werten von $S''(x_i)$ an den Stützstellen entsprechen und noch zu berechnen sind.

Durch zweifache Integration entstehen aus diesen Gleichungen Polynome dritten Grades mit zwei Parametern c_i und d_i der Form:

$$\frac{1}{6}\left(\frac{(x_{i+1} - x)^3}{h_i} \cdot \beta_i + \frac{(x - x_i)^3}{h_i} \cdot \beta_{i+1}\right) + c_i \cdot (x - x_i) + d_i$$

Um die Stetigkeitsbedingungen $s_i(x_i) = y_i$ und $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ zu erfüllen, wählen wir

$$d_i = y_i - \frac{h_i^2}{6}, \quad c = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} \cdot (\beta_{i+1} - \beta_i)$$

So sind bereits die nullten und die zweiten Ableitungen der Einschränkungen s_i an den Stützstellen korrekt. Die Momente sind so zu wählen, dass auch die ersten Ableitungen an den Stützstellen gleich sind.

Mit

$$s_i'(x) = \frac{1}{2}\left(-\frac{(x_{i+1} - x)^2}{h_i} \cdot \beta_i + \frac{(x - x_i)^2}{h_i} \cdot \beta_{i+1}\right) + c_i$$

und

$$s_i'(x_i) = s_{i-1}'(x_i)$$

lassen sich folgende Gleichungen aufstellen:

$$\frac{h_{i-1}}{6} \cdot M_{i-1} + \frac{h_{i-1} + h_i}{3} \cdot \beta_i + \frac{h_i}{6} \cdot \beta_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}$$

Für $i = 0$ und $i = n$ fehlen zwei Gleichungen, die sich aus den *Abschlussbedingungen* ergeben.

Dieses lineare Gleichungssystem kann auch durch folgende, tridiagonale, streng diagonaldominante Matrix ausgedrückt werden:

$$\begin{pmatrix} \mu_0 & \lambda_0 & & & & & \\ \frac{h_0}{6} & \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \frac{h_{i-1}}{6} & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & \frac{h_i}{6} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \lambda_n & \mu_n & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_i \\ \vdots \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ \frac{y_2 - y_1}{h_1} - \frac{y_1 - y_0}{h_0} \\ \vdots \\ \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Die Werte für die λ_i, μ_i und b_i hängen von den Abschlussbedingungen ab.

Definition: Berechnung eines kubischen Polynom-Splines

Berechne aus x_i die $h_i = x_{i+1} - x_i$ und stelle das lineare Gleichungssystem

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mu_0 & \lambda_0 & & & & \\ \frac{h_0}{6} & \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \frac{h_{i-1}}{6} & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & \frac{h_i}{6} & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \lambda_n & \mu_n \end{pmatrix}}_{A} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_i \\ \vdots \\ M_n \end{pmatrix}}_{x} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_0 \\ \frac{y_2-y_1}{h_1} - \frac{y_1-y_0}{h_0} \\ \vdots \\ \frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - \frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}_{b}$$

auf. Die Werte für die λ_i, μ_i und b_i hängen von den Abschlussbedingungen ab.[a]

A ist symmetrisch, tridiagonale und streng diagonaldominant, also sehr einfach mit direkten oder iterativen Lösern zu bearbeiten.

Löse das lineare Gleichungssystem.

Dann ist $s_i(x)$ auf dem Teilintervall $[x_i, x_{i+1}]$ gegeben mit

$$s_i(x) = \alpha_i + \beta_i(x - x_i) + \gamma_i(x - x_i)^2 + \delta_i(x - x_i)^3$$

wobei

$$\begin{aligned} \alpha_i &= y_i \\ \beta_i &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}(2M_i + M_{i+1}) \\ \gamma_i &= \frac{M_i}{2} \\ \delta_i &= \frac{M_{i+1} - M_i}{6h_i} \end{aligned}$$

[a] Wir betrachten meist *natürliche Splines*, also $\lambda_0 = \lambda_n = b_0 = b_n = 0, \quad \mu_0 = \mu_n = 1.$

Definition: Abschlussbedingungen für kubische Polynom-Splines

Prinzipiell gibt es ein Interpolationsintervall weniger als Stützstellen. Das heißt, dass zwei Gleichungen zur Bestimmung aller Koeffizienten fehlen.

Typische *Abschlussbedingungen* sind:

- *Natürlicher Spline* (freier Rand):
  - Bedingung:

$$s_0''(x_0) = 0$$
$$s_{n-1}''(x_n) = 0$$

  - Der Spline schließt mit Wendepunkten ab.
  - Berechnung mit Momenten:

$$\lambda_0 = \lambda_n = b_0 = b_n = 0, \quad \mu_0 = \mu_n = 1$$

- *Hermiter Spline* (eingespannter Rand):
  - Bedingung:

$$s_0'(x_0) = f'(a)$$
$$s_{n-1}'(x_n) = f'(b)$$

  - $f'(a)$ und $f'(b)$ sind vorgegeben, normalerweise entweder durch die Ableitung einer zu interpolierenden Funktion f oder durch eine Approximation derselben.
  - Berechnung mit Momenten:

$$\lambda_0 = \frac{h_0}{6}, \quad \mu_0 = \frac{h_0}{3}, \quad b_0 = \frac{y_1 - y_0}{h_0} - f'(a)$$

$$\lambda_n = \frac{h_{n-1}}{6}, \quad \mu_n = \frac{h_{n-1}}{3}, \quad b_n = -\frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} + f'(b)$$

- *Periodischer Spline*:
  - Bedingung:

$$s_0'(x_0) = s_{n-1}'(x_n)$$
$$s_0''(x_0) = s_{n-1}''(x_n)$$

  - Nullte, erste und zweite Ableitung von S_3 am Anfang und Ende des Intervalls gleich.
  - Berechnung mit Momenten:

$$\lambda_0 = \frac{h_0}{6}, \quad \mu_0 = \frac{h_n + h_0}{3}, \quad b_0 = \frac{y_1 - y_0}{h_0} - \frac{y_0 - y_n}{h_n}$$

$$\lambda_n = \frac{h_{n-1}}{6}, \quad \mu_n = \frac{h_{n-1} + h_n}{3}, \quad b_n = \frac{y_0 - y_n}{h_n} - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}$$

Beispiel: Kubischer Polynom-Spline (Bedingungsgleichungen)

Gegeben seien die folgenden Datenpunkte:

x_i	-1	0	1
y_i	1	0	1

Berechnen Sie den zugehörigen kubischen Polynom-Spline mithilfe der Bedingungsgleichungen.

Wir wissen:

$$p(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$$
$$p'(x) = b + 2cx + 3dx^2$$
$$p''(x) = 2c + 6dx$$

Wir haben folgende Bedingungsgleichungen:

$$\begin{aligned}
\text{Interpolation:} \quad & p_L(x_0) = y_0 && \Longrightarrow \quad a_L - b_L + c_L - d_L = 1 \\
\text{Interpolation:} \quad & p_L(x_1) = y_1 && \Longrightarrow \quad a_L = 0 \\
\text{Interpolation:} \quad & p_R(x_1) = y_1 && \Longrightarrow \quad a_R = 0 \\
\text{Interpolation:} \quad & p_R(x_2) = y_2 && \Longrightarrow \quad a_R + b_R + c_R + d_R = 1 \\
\text{Glattheit erste Ableitung:} \quad & p'_L(x_1) = p'_R(x_1) && \Longrightarrow \quad b_L = b_R \\
\text{Glattheit zweite Ableitung:} \quad & p''_L(x_1) = p''_R(x_1) && \Longrightarrow \quad 2c_L = 2c_R \\
\text{natürlicher Spline:} \quad & p''_L(x_0) = 0 && \Longrightarrow \quad 2c_L - 6d_L = 0 \\
\text{natürlicher Spline:} \quad & p''_R(x_2) = 0 && \Longrightarrow \quad 2c_R + 6d_R = 0
\end{aligned}$$

Wir erhalten das lineare Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix}
1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\
0 & 0 & 2 & -6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 6
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_L \\ b_L \\ c_L \\ d_L \\ a_R \\ b_R \\ c_R \\ d_R \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit der Lösung:

$$\begin{pmatrix} a_L & b_L & c_L & d_L & a_R & b_R & c_R & d_R \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3/2 & 1/2 & 0 & 0 & 3/2 & -1/2 \end{pmatrix}^T$$

Daraus ergibt sich der kubische Polynom-Spline:

$$s(x) = \begin{cases} \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x^3 & x \leq 0 \\ \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}x^3 & x > 0 \end{cases}$$

Beispiel: Kubischer Polynom-Spline (Momente)

Gegeben seien die folgenden Datenpunkte:

x_i	-1	0	1
y_i	1	0	1

Berechnen Sie den zugehörigen kubischen Polynom-Spline mithilfe der Momentgleichungen.

8.4 B-Splines

Definition: Unterteilung

Ist $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ so heißt

$$\Omega_n = \{x_0, \ldots, x_n\}$$

Unterteilung des Intervalls $[x_0, x_n]$.

$S_k(\Omega_n)$ ist dann die Menge aller Polynom-Splines der Ordnung k zur Unterteilung Ω_n.

In $S_k(\Omega_n)$ gibt es genau $k + n$ linear unabhängige Splines, d. h.

$$\dim(S_k(\Omega_n)) = k + n$$

Bonus: B-Spline

Es sei $\Omega_n = \{x_0, \ldots, x_n\}$ eine Unterteilung von $[x_0, x_n]$.

Wir wählen Hilfspunkte[a]

$$x_{k-1} < \ldots < x_{-1}, \quad x_{n-1} < \ldots < x_{n+k}$$

Dann gibt es genau $k + n$ *Basis-Splines* bzw. *B-Splines*

$$e_{k,i}(x), \quad i = -k, \ldots, n-1$$

der Ordnung k mit folgenden Eigenschaften:

- es ist
$$e_{k,i}(x) \begin{cases} \geq 0 & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
- es gilt
$$\sum_{i=-k}^{n-1} e_{k,i}(x) = 1, \quad \forall x \in [x_0, x_n]$$
- Die Spline-Funktionen $e_{k,i}$ bilden eine Basis von $S_k(\Omega_n)$.

Ein Beispiel sind die rekursiv definierten Funktionen $e_{k,i}(x)$ mit $k \geq 1$ und $i = -k, \ldots, n-1$

$$e_{0,i}(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls} \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$e_{k,i}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+k} - x_i} \cdot e_{k-1,i}(x) + \frac{x_{i+k+1} - x}{x_{i+k+1} - x_{i+1}} \cdot e_{k-1,i+1}(x)$$

Die $e_{k,i}$ sind dann Basis-Splines auf dem Intervall $[x_0, x_n]$.

[a] Oft beschränken wir uns auf äquidistante Unterteilungen (mit äquidistanten Hilfspunkten) $x_i = i \cdot h$ mit $h > 0$.

9 Approximation

9.1 Lineare Ausgleichsprobleme

Definition: Ausgleichspolynom mithilfe von Normalgleichungen

Seien

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^{n-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m, \quad x = \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

mit $m \geq n$, $\operatorname{rang}(A) = n$ (also maximal).

Dann hat für jedes $b \in \mathbb{R}^m$ das *Minimalproblem*

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

genau eine Lösung $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$.

Die Lösung $\hat{x}$ löst auch die *Normalgleichungen*

$$A^T A \hat{x} = A^T b$$

wobei $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär ist.[a]

Die Lösung $\hat{x}$ liefert Polynomkoeffizienten für das *Ausgleichspolynom*.

[a] $A^T A$ ist auch spd, so dass das Cholesky-Verfahren oder iterative Methoden verwendet werden können.

Beispiel: Ausgleichspolynom mithilfe von Normalgleichungen

Gegeben sei die Matrix A und der Vektor b mit:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

Bestimmen Sie alle Lösungen x mit $\|Ax - b\|_2$ minimal; also alle Ausgleichspolynome.

Alle Lösungen x mit $\|Ax - b\|_2$ minimal lösen auch $A^T Ax = A^T b$.

Es gilt damit:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^T b = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \\ b_1 + b_2 \end{pmatrix}$$

Lösen mit Gauß ergibt:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & b_2 \\ 0 & 1 & 1 & b_1 \\ 1 & 1 & 2 & b_1 + b_2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & b_2 \\ 0 & 1 & 1 & b_1 \\ 0 & 1 & 1 & b_1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & b_2 \\ 0 & 1 & 1 & b_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \implies \begin{array}{c} x_1 + x_3 = b_2 \\ x_2 + x_3 = b_1 \\ x_3 = \alpha \in \mathbb{R} \end{array}$$

Wir erhalten insgesamt also die Lösung:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_2 - \alpha \\ b_1 - \alpha \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Bonus: Ausgleichsfunktion mit beliebigen Basisfunktionen

Wählt man

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

wobei $\varphi_i(x)$ beliebige Basisfunktionen sind, kann man das Approximationsproblem und damit die Ausgleichsfunktion auf diese beliebigen Basisfunktionen erweitern.

9.2 QR-Zerlegung für lineare Ausgleichsprobleme

Definition: QR-Zerlegung für lineare Ausgleichsprobleme

Seien $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $x \in \mathbb{R}^n$ wie bisher definiert mit $m \geq n$, $\operatorname{rang}(A) = n$.

Dann suchen wir analog zur normalen QR-Zerlegung ein

$$Q = Q_m \cdot \ldots \cdot Q_1, \quad Q_i \text{ orthonormal}$$

z. B. mit Householder-Matrizen, so dass

$$QA = Q_m \cdot \ldots \cdot Q_1 \cdot A = \begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

wobei $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine obere Dreiecksmatrix ist, die regulär ist.

Benutzen wir

$$Qb = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

wobei $c \in \mathbb{R}^n$ und $d \in \mathbb{R}^{m-n}$, so folgt

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|QAx - Qb\|_2 \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \| \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \|_2 \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \sqrt{\|Rx - c\|_2^2 + \|d\|_2^2} \end{aligned}$$

Zu bestimmen ist dann die Lösung von

$$Rx - c = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad Rx = c$$

durch Rückwärtseinsetzen.

9.3 CGLS

Bonus: CGLS-Verfahren

Das *CGLS-Verfahren* (*Conjugate Gradient Least Squares*) ist definiert durch:

Das Verfahren funktioniert wie folgt:

1. x_0 gegeben, $p_0 = r_0 = b - Ax_0$
2. Wiederhole für $k \geq 0$:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$s_{k+1} = s_k - \alpha_k A p_k, \quad \alpha_k = \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle Ap_k, Ap_k \rangle}$$

$$r_{k+1} = A^T s_{k+1}$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k, \quad \beta_k = \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle}$$

Hat $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ vollen Rang, d. h. $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist regulär, so liefert das CGLS-Verfahren in exakter Arithmetik nach spätestens n Schritten die eindeutige Lösung des Ausgleichsproblems.

Hat A keinen vollen Rang, so konvergiert CGLS immer noch gegen einen Minimierer.

9.4 Pseudoinverse

Definition: Pseudoinverse

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

Dann gibt es genau eine Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ für das Ausgleichungsproblem. Diese hängt linear von b, d. h. es existiert eine eindeutige, von b unabhängige Matrix $A^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mit

$$x = A^+ b, \quad \forall b \in \mathbb{R}^m$$

A^+ heißt dann *Pseudoinverse* von A.[a]

Die Pseudoinverse A^+ ist durch die folgenden vier *Penrose-Axiome* festgelegt:

- A^+ ist eine verallgemeinerte Inverse:

$$AA^+A = A$$

- A^+ verhält sich wie eine schwache Inverse:

$$A^+AA^+ = A^+$$

- Die Matrix AA^+ ist hermetisch[b]:

$$(AA^+)^T = AA^+$$

- Die Matrix A^+A ist ebenfalls hermetisch:

$$(A^+A)^T = A^+A$$

[a] Für reguläres A ist $A^+ = A^{-1}$

[b] Für reelle Matrizen symmetrisch.

Beispiel: Pseudoinverse

Gegeben sei die Matrix A und der Vektor b mit:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

Zusätzlich seien die Lösungen für $A^T Ax = A^T b$ gegeben mit:

$$x = \begin{pmatrix} b_2 - \alpha \\ b_1 - \alpha \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Bestimmen Sie die Pseudoinverse A^+.

Für die Pseudoinverse A^+ gilt:

$$A^+ b \quad \Longleftrightarrow \quad \min \|Az - b\|_2 \quad \text{(gegeben)}$$

Dann gilt:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}} \|z\|_2 = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \| \begin{pmatrix} b_2 - \alpha \\ b_1 - \alpha \\ \alpha \end{pmatrix} \| = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \| \underbrace{\begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:c} - \alpha \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}}_{=:B} \| = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \|B\alpha - c\|_2$$

$$\Longleftrightarrow \quad B^T B\alpha = B^T c \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \alpha = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Longleftrightarrow \quad 3\alpha = b_1 + b_2 \quad \Longleftrightarrow \quad \alpha = \frac{b_1 + b_2}{3}$$

$$\begin{aligned} A^+ b = \quad & c - \alpha B \\ = \quad & \begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{b_1 + b_2}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ = \quad & \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 3b_2 - (b_1 + b_2) \\ 3b_1 - (b_1 + b_2) \\ b_1 + b_2 \end{pmatrix} \\ = \quad & \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -b_1 + 2b_2 \\ 2b_1 - b_2 \\ b_1 + b_2 \end{pmatrix} \\ = \quad & \underbrace{\frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_{A^+} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

9.5 Singulärwertzerlegung

Definition: Singulärwertzerlegung

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

Dann gibt es orthonormale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass

$$U^T A V = \Sigma$$

mit

$$\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p), \quad p = \min(m, n)$$

und

$$\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_p \geq 0$$

$U^T A V = \Sigma$ bzw. $A = U \Sigma V^T$ heißt *Singulärwertzerlegung* von A mit *Singulärwerten* σ_i.

Es gilt:

- $V \Sigma^T U^T$ ist Singulärwertzerlegung von $A^T \implies$ Singulärwerte von A und A^T identisch
- hilt $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_p = 0$ dann ist $\operatorname{rang}(A) = r$
- $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_2^2$ sind Eigenwerte von $A^T A$ bzw. $A A^T$[a]
- Die Spalten von U, V sind Eigenvektoren von $A A^T$ bzw. $A^T A$.
- Ist $r = \operatorname{rang}(A)$, $A = U \Sigma V^T$ mit

  $$\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

  dann ist

  $$A^+ = V \Sigma^T U^T, \quad \Sigma^T = \operatorname{diag}(\frac{1}{\sigma_1}, \ldots, \frac{1}{\sigma_r}, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

- Ist $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und sind $S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthonormal, dann haben A und SAT dieselben Singulärwerte.

[a] Alle anderen Eigenwerte sind gleich 0.

Bonus: Singulärwertzerlegung von spd Matrizen

Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ spd, dann gilt

$$A = Q \Lambda Q^T, \quad \Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n), \quad Q = \begin{pmatrix} q_1 & \cdots & q_n \end{pmatrix}$$

wobei

$$\lambda_n \geq \ldots \geq \lambda_n$$

die Eigenwerte von A und q_i die zugehörigen Eigenvektoren sind, d. h.

$$\Sigma = \Lambda, \quad U = V = Q$$

Definition: Bestimmen einer Singulärwertzerlegung

Wir benutzen orthonormale Matrizen $S \in \mathbb{R}^{m\times m}$ und $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und um A so umzuformen, dass die Singulärwerte leichter zu bestimmen sind.[a]

1. Wir transformieren A durch S und T in eine obere Bidiagonalform:[b]
   - Mit Hilfe von orthogonalen Transformationen (z. B. Householder-Matrizen) S_i eliminieren wir die i-te Spalte von A:[c]

$$A \to S_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

   - Mit Hilfe von orthogonalen Transformationen (z. B. Householder-Matrizen) T_i eliminieren wir die um eins verkürzte i-te Zeile von A:[d]

$$S_1 A \to S_1 A T_1 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

   - Nach n-Schritten erhalten wir

$$SAT = S_n \cdot \ldots \cdot S_1 \cdot A \cdot T_1 \cdot \ldots \cdot T_{n-1} = \begin{pmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & * & * & 0 \\ \vdots & & \ddots & * & * \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & * \\ \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}, \quad R \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

2. Analogon einer QR-Iteration ohne Shift auf $R^T R$:
   - $R_0 = R$
   - Wiederhole für $k > 0$ (immer zwei Schritte $R_k \to R_{k+2}$):

$$R_k^T = Q_{k+1} R_{k+1}, \quad R_{k+1}^T = Q_{k+2} R_{k+2}$$

   - R_{2k} konvergiert gegen eine Diagonalmatrix, die die Singulärwerte enthält.

[a] Wir nehmen $m \geq n$ an, ansonsten wählen wir A^T statt A.
[b] Analog zur Hessenberg-Transformation bei der Eigenwertberechnung.
[c] Am Beispiel von S_1
[d] Am Beispiel von $S_1 A$

Beispiel: Bestimmen einer Singulärwertzerlegung

Gegeben sei die Matrix A mit:

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

Bestimmen Sie die Singulärwerte von A.

Die Singulärwerte σ_i von A lassen sich über die Eigenwerte λ_i von $A^T A$ bestimmen, da

$$\sigma_i^2 = \lambda_i$$

Es gilt:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$p(\lambda) = \det(A^T A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = \ldots = (1-\lambda)(\lambda-3)\lambda$$

$$0 = p(\lambda) = (1-\lambda)(\lambda-3)\lambda \quad \Longrightarrow \quad \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 0$$

Damit sind die Singulärwerte von A direkt:

$$\sigma_1 = \sqrt{3}, \quad \sigma_2 = 1$$

9.6 Regularisierung schlecht konditionierter Probleme

9.6.1 Grundlagen

Definition: Konditionszahl mithilfe von Singulärwerten

Es sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$

$$\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$$

Dann ist die Konditionszahl $\varkappa_2$ von A gegeben durch[a]

$$\varkappa_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}$$

[a] Für reguläre Matrizen A stimmt dieser Ausdruck mit der früheren Definiton der Konditionszahl $\varkappa_2$ überein.

9.6.2 Abgeschnittene Singulärwertzerlegung (TSVD)

Bonus: Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Konditionsprobleme werden durch die Singulärwerte σ_i von A verursacht, für die

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_i}$$

groß ist.

Lassen wir diese σ_i einfach weg, dann erhalten wir die *abgeschnittene Singulärwertzerlegung (Truncated Singular Value Decomposition, TSVD)*.

Es sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$,

$$\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad \sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$$

Für $\alpha > 0$ ist $A_\alpha = U\Sigma_\alpha V^T$,

$$\Sigma_\alpha = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad \frac{\sigma_1}{\sigma_k} \leq \frac{1}{\alpha}, \quad \frac{\sigma_1}{\sigma_{k+1}} \geq \frac{1}{\alpha}$$

eine *abgeschnittene Singulärwertzerlegung* von A.

9.6.3 Tikhonov Regularisierung

Definition: Tikhonov Regularisierung

Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und $\alpha > 0$ ist

$$x_\alpha = (A^T A + \alpha^2 I)^{-1} A^T b$$

die *Tikhonov-Regularisierung* von $x = A^+ b$ zum Parameter α.

Bonus: Konvergenz der Tikhonov Regularisierung

Sei x_α die Tikhonov-Regularisierung von $x = A^+ b$ zum Parameter α.

Für $\alpha \to 0$ konvergiert x_α gegen x und das Residuum $\|b - Ax_\alpha\|_2$ ist monoton nicht wachsend.

9.6.4 Parameterwahl

Bonus: Diskrepanz-Prinzip nach Morozov

Seien A, $\tilde{b}$, δ gegeben, $\|\tilde{b} - b\|_2 \leq \delta$ und $\tilde{x}_\alpha$ eine Regularisierung von $A^+\tilde{b}$.

Dann wählt man den Regularisierungsparameter gemäß

$$\alpha(\delta, \tilde{b}) = \sup_{\alpha>0} \left(\|\tilde{b} - A\tilde{x}_\alpha\|_2 \leq \tau\delta\right)$$

mit $\tau \geq 1$ fest.

10 Numerische Integration

11 Optimierung ohne Nebenbedingungen

12 Diskrete Fourier- und Wavelettransformation

Index

Beispiele