

Numerik

Zusammenfassung

Stephan Weller

2. Dezember 2003

1 Lineare Gleichungssysteme

In der Praxis sind oft lineare Gleichungssysteme in vielen Variablen zu lösen. Dabei ist zu beachten, dass sich Fehler oft aufsummieren und daher numerisch stabile Verfahren wünschenswert sind, bei denen sich Rundungsfehler nur schwach auswirken.

1.1 Fehlerabschätzung

Problem: Eine Näherungslösung \tilde{x} des Gleichungssystems $Ax + b = 0$ wurde berechnet. Jetzt sollen aus der Größe des Residuenvektors $r := A\tilde{x} + b$ Rückschlüsse auf die Größe des Fehlers $z := x - \tilde{x}$ gezogen werden. Mit einer beliebigen Matrixnorm $\|\cdot\|$ und einer verträglichen Vektornorm gilt dann die Abschätzung:

$$\frac{\|z\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}$$

Folglich hängt der Fehler nicht nur von der Größe des Residuenvektors, sondern auch von der Kondition der Matrix ab.

1.2 LR-Zerlegung

Die LR-Zerlegung funktioniert, sofern beim Gauß-Algorithmus alle Elemente $a_{1,1}, a_{2,2}^{(1)}, a_{3,3}^{(2)}, \dots \neq 0$ sind. Ist dies nicht der Fall, muß eine geeignete Permutationsmatrix vorgeschaltet werden (diese existiert immer, sofern A regulär ist). Es gibt dann folgende drei Schritte:

- (1) Zerlegung der Matrix: $A = LR$
- (2) Vorwärtseinsetzen: $Lc - b = 0$ (Auflösen nach c)
- (3) Rückwärtseinsetzen: $Rx + c = 0$ (Auflösen nach x)

Dabei ist R die obere Dreiecksmatrix, die beim Gauß-Verfahren entsteht und L die folgende Linksdreiecksmatrix:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & 1 & & \dots & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & l_{n,3} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Dabei sind $l_{i,j}$ die Quotienten, die beim Gaußverfahren verwendet werden, d.h.

$$l_{i,j} = \frac{a_{i,j}^{(j-1)}}{a_{j,j}^{(j-1)}}.$$

Das Gaußverfahren benötigt damit etwa $\frac{n^3}{3}$ Rechenschritte.

1.3 Pivotstrategien

Für die numerische Stabilität des Gaußverfahrens ist es entscheidend, dass die Pivotelemente nicht zu klein sind. Die *Diagonalstrategie* (ohne Zeilenvertauschungen) ist nur dann gut anwendbar, wenn die Matrix diagonal dominant ist, d.h. wenn gilt:

$$2|a_{i,i}| > \sum_{k=1}^n |a_{i,k}|, (i = 1, \dots, n)$$

Bei der *Dominanzstrategie* werden die Zeilen der Matrix so permutiert, dass wenn möglich die vorhergehende Bedingung gilt (dies ist nicht immer möglich).

1.4 Cholesky-Zerlegung

Diese Verfahren funktioniert nur bei positiv definiten Matrizen. Da es bei anderen Matrizen scheitert ist es auch ein Weg, die positive Definitheit einer Matrix zu überprüfen. Das Cholesky-Verfahren besteht aus drei Schritten:

- (1) Zerlegung der Matrix: $A = LL^t$
- (2) Vorwärtseinsetzen: $Lc - b = 0$ (Auflösen nach c)
- (3) Rückwärtseinsetzen: $L^t x + c = 0$ (Auflösen nach x)

Da es sich bei L um eine linke Dreiecksmatrix handelt, sind die Schritte (2) und (3) sehr einfach möglich. Für die Zerlegung braucht man bei großen Matrizen etwa $\frac{n^3}{6}$ Rechenschritte.

Die Zerlegung lässt sich algorithmisch wie folgt beschreiben:

```

FOR  $k = 1, \dots, n$ 
  IF  $a_{k,k} \leq 0$ 
     $\Rightarrow$  STOP (Matrix nicht positiv definit)
  ELSE
     $l_{k,k} = \sqrt{a_{k,k}}$ 
    FOR  $i = k + 1, \dots, n$ 
       $l_{i,k} = \frac{a_{i,k}}{l_{k,k}}$ 
    FOR  $j = k + 1, \dots, n$ 
       $a_{i,j} = a_{i,j} - l_{i,k}l_{j,k}$ 

```

1.5 Varianten der LR- und Cholesky-Zerlegung

Berechnung mehrerer Lösungen nacheinander

Aufgabenstellung: $Ax = b^1, \dots, b^n$. Naives Verfahren: Einsetzen in (2) und (3) getrennt für jedes b^j . Speziell ergeben sich dann für $b^j = e^j$ die Spalten von A^{-1} als Lösungen, die Bestimmung der inversen Matrix ist also so möglich. Bei der Cholesky-Zerlegung gilt dann $A^{-1} = (L^{-1})^t L^{-1}$. Die Matrix L^{-1} ist ebenfalls eine Dreiecksmatrix.

Weitere Verfahren

Die Anzahl der Rechenschritte ist u. U. noch drastisch reduzierbar, z. B. wenn eine Bandmatrix vorliegt (Werte $\neq 0$ nur auf der Hauptdiagonalen und einigen Nebendiagonalen). Diese Verfahren werden hier nicht besprochen.

2 Interpolation

... to come ...

3 Differenzgleichungen

Differenzgleichungen sind Gleichungen der Form

$$\sum_{i=n}^{n+m} f_i(x_i) = c$$

Im Folgenden betrachten wir lineare Differenzgleichungen, d.h. Gleichungen der Form

$$\sum_{i=n}^{n+m} a_i \cdot x_i = c$$

Zusätzlich ist normalerweise eine Anfangsbedingung der Form $x_i = c_i$ ($i = 1, \dots, m$) gegeben. Die Lösung einer Differenzgleichung ist eine Folge.

Das Lösungsverfahren ist das Folgende:

1. Bestimmen einer speziellen Lösung
Als Ansatz kann z.B. eine konstante Folge o.ä. gewählt werden.
2. Lösen der homogenen Gleichung
Die Gleichung wird in der Form $\sum_{i=n}^{n+m} a_i \cdot x_i = 0$ gelöst. Hierzu benutzt man den Ansatz $x_n = \lambda^n$.
3. Lösen der inhomogenen Gleichung
Die Lösung der inhomogenen Gleichung ergibt sich als Linearkombination aller Lösungen der inhomogenen Lösung, ausgehend von der speziellen Lösung.
4. Auflösen der Variablen
Am Ende werden die Variablen der inhomogenen Lösung durch Einsetzen in die Anfangsbedingungen aufgelöst.

4 Näherungsverfahren für Nullstellen

4.1 Intervallschachtelung

Das einfachste Verfahren der Bestimmung von Nullstellen ist das Intervallschachtelungsverfahren. Man wählt ein Intervall $[x_0, x_1]$ so, dass die Funktion f das auf diesem Intervall das Vorzeichen wechselt, z.B. $f(x_0) > 0, f(x_1) < 0$. Jetzt wählt man $x_2 = \frac{x_0+x_1}{2}$. Ist nun $f(x_2) = 0$, hat man die Nullstelle gefunden.

Ist $f(x_2) > 0$, beginnt man von vorne mit dem Intervall $[x_2, x_1]$. Andernfalls benutzt man das Intervall $[x_0, x_2]$. Die Konvergenz ist bei diesem Verfahren sehr langsam, es konvergiert aber in jedem Fall.

4.2 Regula falsi

Man geht wie bei der Intervallschachtelung vor, allerdings wählt man jetzt nicht die Mitte des Intervalls, sondern den Schnittpunkt der x-Achse mit der Gerade durch $(x_0, f(x_0))$ und $(x_1, f(x_1))$. D.h. man wählt

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

4.3 Newton-Verfahren

Man wählt als x_{i+1} den Wert $x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$. Dieses Verfahren konvergiert schnell, wenn die Funktion konvex oder konkav ist. Andernfalls ist eine Konvergenz nicht gesichert.

4.4 Fixpunktverfahren

Anstatt die Gleichung $f(x) = 0$ zu lösen, geht man über zu dem analogen Fixpunktproblem $g(x) = x$ mit $g(x) = h(x) \cdot f(x) + x$ unter Umständen mit einer geeigneten Hilfsfunktion h (kann auch entfallen, dient nur der Vereinfachung und evtl. schnellerer Konvergenzgeschwindigkeit). Ist die Funktion $g : U \rightarrow U$ Lipschitz-stetig mit einer Konstante $L < 1$, d.h. gilt $\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|$, so konvergiert die Folge $(x_i)_{i=1}^{\infty}$ mit $x_{i+1} = f(x_i)$ gegen den Fixpunkt. $x_0 \in U$ kann beliebig gewählt werden. Je kleiner hier L ist, desto schneller konvergiert das Verfahren. Um die Bedingung nachzuprüfen, bietet sich an, die Ableitung der Funktion zu nutzen.

4.5 Graeffe-Verfahren

Beim Graeffe-Verfahren liegt immer ein Polynom $f(x)$ zu Grunde. Zu diesem wird jetzt ein Polynom $f_1(x^2)$ bestimmt, dessen Nullstellen genau den Quadranten der Nullstellen von f entsprechen. Das funktioniert nach dem folgenden Schema:

$f(x)$	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	\dots
$f_1(x^2)$	a_0^2	a_1^2	a_2^2	a_3^2	a_4^2	\dots
		$-2a_0a_2$	$-2a_1a_3$	$-2a_2a_4$	$-2a_3a_5$	\dots
			$2a_0a_4$	$2a_1a_5$	$2a_2a_6$	\dots
				$-2a_0a_6$	$-2a_1a_7$	\dots
					$2a_0a_8$	\dots

(Es ergibt sich eine Dreiecks-Form)

Dieses Verfahren wird nun ν -mal wiederholt. Sind die Nullstellen alle reell und betragslich unterschiedlich, so fächern sie sich auf und eine Approximation ist problemlos möglich. Treten in den abgeleiteten Polynomen negative Koeffizienten auf, so gibt es komplexe Nullstellen. Man berechnet nach den Tableaus die Werte r_i mit $r_i = a_i'/a_{i-1}'$. Bis auf das Vorzeichen entsprechen die $2^{\nu-1}$ -ten Wurzeln aus diesen Werten den Nullstellen des Polynoms, sofern sie reell sind.

4.6 Gradientenabstiegsverfahren

Hierbei handelt es sich um ein Verfahren zur Bestimmung von lokalen Minima mehrdimensionaler Funktionen. Dabei wird ein Anfangspunkt x_0 gewählt und dann der Gradient in diesem Punkt $Df(x_0)$ berechnet. Dieser Gradient zeigt immer in die Richtung des steilsten Anstiegs, daher wählen wir jetzt ein $d = -Df(x_0)$ und minimieren f auf der Gerade $x_0 + t \cdot d$, d.h. wir bestimmen x_1 mit $f(x_1) = \min\{f(x)/x = x_0 + t \cdot d\}$. Mit diesem x_1 fahren wir dann fort. Wir erhalten entweder nach endlich vielen Schritten ein lokales Minimum von f , oder die Folge der x_i konvergiert zumindest gegen ein solches.

Man kann dabei relativ leicht zeigen, dass aufeinander folgende d_i aufeinander senkrecht stehen.

4.7 Mehrdimensionales Newton-Verfahren

Analog zum normalen Newton-Verfahren wählt man (mit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, f stetig differenzierbar):

$$x_{i+1} = x_i - (Df(x_i))^{-1}f(x_i)$$

Der Nachteil ist hier, dass eine Matrixinversion notwendig ist, die relativ rechenaufwendig ist. Unter bestimmten Voraussetzungen genügt es, dass Taylorpolynom 2. Grades um x_0 als Näherung zu betrachten. Dann endet die Iteration schon nach einem einzigen Schritt und es ergibt sich:

$$x^* = -A^{-1}b$$

5 Eigenwertbestimmung und Spektralradius

Der Spektralradius ist wie folgt definiert:

$$r(A) = \max\{|\lambda|/\lambda \text{ ist Eigenwert von } A\} (\leq \|A\|)$$

5.1 Hermite'sche Matrizen

Eine Matrix heißt hermite'sch, wenn gilt: $A = \bar{A}^t$. Eine solche Matrix hat ausschließlich reelle Eigenwerte.

5.2 Vektoriteration

Im folgenden sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots |\lambda_n|$, $x_0 \in \mathbb{C}$, v_1, \dots, v_n seien die Eigenvektoren zu $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

Dann gilt:

$$\begin{aligned}x_1 &= Ax_0 = t_1 \lambda_1 v_1 + \dots + t_n \lambda_n v_n \\x_{i+1} &= Ax_i = t_1 \lambda_1^{i+1} v_1 + \dots + t_n \lambda_n^{i+1} v_n\end{aligned}$$

und es folgt:

$$y_k = \frac{x_k}{\|x_k\|} \rightarrow_{k \rightarrow \infty} v^k \text{ mit } \|v_j\| = 1$$

also $Ay^k \rightarrow \lambda_1 v^1$.

Gilt z.B. $|\lambda_1| = |\lambda_2|$, kann man u.U. eine Koordinatentransformation durchführen.

Appendix

A Normen auf dem \mathbb{R}^n

$$\|\cdot\|_1 \text{(1-Norm)} : \|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j|$$

$$\|\cdot\|_2 \text{(2-Norm)} : \|x\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^n |x_j|^2}$$

$$\|\cdot\|_\infty \text{(Maximumsnorm)} : \|x\|_\infty = \max_{i=1..n} |x_i|$$

Es gilt:

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq \sqrt{n}\|x\|_2 \leq n\|x\|_\infty$$

B Matrizennormen

Ist $\|\cdot\|$ eine Norm auf dem \mathbb{R}^n , so ist die zugeordnete Matrixnorm:

$$\|A\| := \max\{\|Ax\|/x \in \mathbb{R}^n, \|x\| \leq 1\}$$

Einige Matrixnormen:

$$\|A\|_G = n \max_{i,k} |a_{i,k}| \text{(Gesamtnorm)}$$

$$\|A\|_Z = \max_i \sum_{k=1}^n |a_{i,k}| \text{(Zeilensummennorm)}$$

$$\|A\|_S = \max_k \sum_{i=1}^n |a_{i,k}| \text{(Spaltensummennorm)}$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,k=1}^n |a_{i,k}|^2} \text{(Frobenius - Norm)}$$

Verträglichkeit & Submultiplikativität

Es gilt z.B.:

$$\|Ax\|_\infty \leq \|A\|_G \|x\|_\infty$$

$$\|Ax\|_2 \leq \|A\|_F \|x\|_2$$

Folglich sind Maximumsnorm und Gesamtnorm bzw. 2-Norm und Frobenius-Norm verträglich.

Weiterhin sind folgende Kombinationen verträglich:

- $\|\cdot\|_G$ oder $\|\cdot\|_Z$ mit $\|\cdot\|_\infty$
- $\|\cdot\|_G$ oder $\|\cdot\|_S$ mit $\|\cdot\|_1$
- $\|\cdot\|_G$ oder $\|\cdot\|_F$ mit $\|\cdot\|_2$.

C Kondition einer Matrix

Mit $\kappa(A) := \|A\| \|A^{-1}\|$ bezeichnet man die Kondition einer Matrix. Sie benutzt man u.a. zur Abschätzung des relativen Fehlers beim Lösen von linearen Gleichungssystemen.

D Sonstiges

Hilfsmittel für die Klausur: 4 Blatt eigene Notizen

Buch: H. R. Schwarz, Numerische Mathematik, B. G. Teubner, Stuttgart