

Lineare Probleme

S. M. Rump

Institut für Informatik III

Technische Universität Hamburg-Harburg

Zusammenfassung

Im folgenden sollen die Algorithmen bzw. die Sätze zur Lösung von linearen Gleichungssystemen bzw. allgemeinen linearen Problemen referiert werden, und es soll möglichst anschaulich demonstriert werden, wie man solche Algorithmen implementiert. Ferner soll gezeigt werden, weshalb man die grundlegenden Sätze gerade so formuliert, welche Auswirkungen sich dadurch auf die Algorithmen ergeben bzw. wie man vom mathematischen Satz zur Implementierung auf dem Rechner kommt.

Ein wichtiger Gesichtspunkt der folgenden Ausführungen soll auch die Betrachtung der speziellen Eigenschaften der Intervallrechnung und die dadurch notwendige Modifikation der Algorithmen sein. Dabei wird die im Hintergrund stehende Mathematik bewußt anschaulich dargestellt, so daß die nachfolgenden Überlegungen auch ohne vertiefte mathematische Kenntnisse nachvollzogen werden können.

1 Einige wichtige Eigenschaften der Intervallrechnung

Auf zwei grundlegende Eigenschaften der Intervallrechnung (vgl. auch [3]) soll hier zunächst noch einmal ausführlich eingegangen werden, nämlich die Isotonie und die Aufblähungseigenschaft.

Die **Isotonie** ist die grundlegende Eigenschaft der Intervallrechnung, auf ihr beruhen sämtliche Einschließungssätze sowohl für lineare Probleme als auch für nichtlineare Anwendungen. Es gilt nämlich für Potenzmengenoperationen \circ

$$A, B \in \mathcal{P}R; a \in A, b \in B \implies a \circ b \in A \circ B, \circ \in \{+, -, *, /\},$$

wobei diese Isotonieeigenschaft zunächst allgemein für Potenzmengen und nicht speziell für Intervalle formuliert ist.

Bei den Einschließungsalgorithmen für lineare oder auch nichtlineare Systeme wird diese Eigenschaft dahingehend benutzt, daß man die an Mengen gestellten Bedingungen für die intervallmäßige Hülle nachprüft. Denn wenn die Intervallhülle in einer anderen Menge enthalten ist, dann gilt dies mit Sicherheit auch für die ursprüngliche Menge aufgrund der Isotonie.

Die Aufblähung ist eine eher negative Eigenschaft der Intervallrechnung. Intervalle zeigen bei verketteten Verknüpfungen die Tendenz, sich zu vergrößern, sprich aufzublähnen. Einfachstes Beispiel dafür ist die Berechnung von

$$X - X := \{x_1 - x_2 \mid x_1, x_2 \in X\},$$

für ein Intervall $X \in \mathbb{IR}$, wobei x_1 und x_2 unabhängig voneinander variieren. Diese Unabhängigkeit ist gerade das, was die unangenehme Aufblähung zur Folge hat, so daß eben gilt

$$X - X \stackrel{\text{i. a.}}{\neq} 0.$$

Um dies zu veranschaulichen sei $X \subset \mathbb{R}^2$, d. h. X ist ein achsenparalleles Rechteck. Als Differenz $X - X$ ergibt sich ein um den Nullpunkt herum liegendes Intervall mit einem größeren Durchmesser als dem von X (vgl. Abb. 1). Das Ergebnisintervall $X - X$ ist im Zweidimensiona-

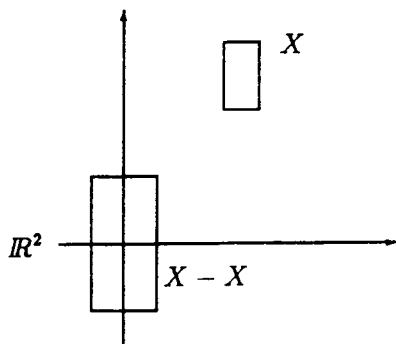


Abbildung 1:

len die Vervielfachung des Ausgangsintervalls X symmetrisch um den Nullpunkt. Die Differenz als Potenzmengenoperation ausgeführt liefert in diesem Beispiel übrigens das gleiche Ergebnis.

Während die erste Eigenschaft, die Isotonie, für die Formulierung der Algorithmen notwendig ist, muß man dafür sorgen, daß die Aufblähung der Intervalle möglichst klein gehalten wird. Nur dann kommt man mit den sogenannten Einschließungsalgorithmen auch zu engen Einschließungen der Lösung eines Problems.

2 Lineare Gleichungssysteme

2.1 Die Residueniteration

Sucht man die Lösung x eines Gleichungssystems

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

also die Nullstelle von

$$Ax - b = 0,$$

dann formt man dieses Problem häufig um in eine Fixpunktgleichung der Form

$$x = x - (Ax - b)$$

und zur numerischen Anwendung in eine Iterationsform

$$x^{k+1} = x^k - (Ax^k - b).$$

Da das Verfahren in dieser Form i. a. nicht konvergiert, wird meistens das Newton-Verfahren

$$x^{k+1} = x^k - A^{-1}(Ax^k - b)$$

verwendet. Da die Inverse A^{-1} wiederum nicht bekannt ist, wird das Newton-Verfahren mit einer Näherungsinversen $R \approx A^{-1}$ durch

$$x^{k+1} = x^k - R(Ax^k - b)$$

angenähert. In der Praxis verwendet man hier z. B. eine LU-Zerlegung der Matrix A ; im folgenden bleiben wir bei R , da die Verfahren so einfacher aufzuschreiben sind. Man nennt dies *vereinfachtes Newton-Verfahren* oder auch *Residueniteration*. Konvergenz liegt für dieses Verfahren bei jedem beliebigen Startwert genau dann vor, wenn $\rho(I - RA) < 1$ gilt.

2.2 Ein Einschließungssatz

Will man die Lösung des linearen Gleichungssystems *einschließen*, so bedeutet dies ja eine Menge zu finden, die die Lösung enthält. Als solche Mengen eignen sich Intervalle besonders gut, da sie zum einen sehr leicht handhabbar und anschaulich sind und zum anderen die arithmetischen Operationen mit ihnen besonders einfach ausführbar sind. Nachteilig wirkt sich, wie bereits oben erwähnt, die mögliche Überschätzung, also die Aufblähung aus.

was durch eine entsprechende Formulierung der Algorithmen ausgeglichen werden muß.

Um zu bewiesenen, sicheren Ergebnissen zu gelangen, muß ein mathematischer Satz vorliegen, dessen Voraussetzungen auf dem Rechner nachprüfbar sind. Dazu kann z. B. vom Brouwerschen Fixpunktsatz ausgegangen werden.

Satz 1 (Fixpunktsatz von Brouwer)

Jede stetige Selbstabbildung $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ einer nichtleeren, konvexen, kompakten Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ hat mindestens einen Fixpunkt in X .

Definiert man z. B. entsprechend der Residueniteration eine Funktion g durch

$$g(x) = x + R(b - Ax),$$

so gilt nach dem Fixpunktsatz von Brouwer

$$g(X) \subseteq X \implies \exists \hat{x} : g(\hat{x}) = \hat{x}.$$

Damit ergibt sich wegen

$$\hat{x} = g(\hat{x}) = \hat{x} + R(b - A\hat{x})$$

sofort $R(b - A\hat{x}) = 0$ also

$$b - A\hat{x} \in \ker(R).$$

Vom numerischen Standpunkt aus gesehen stellt sich nun das Problem, daß man zwar mit dem Erfüllen der Bedingung $g(X) \subseteq X$ die obige Aussage $b - A\hat{x} \in \ker(R)$ erhält, über die Nichtsingularität von R aber zunächst nichts ausgesagt werden kann. Diese auf dem Rechner nachzuprüfen ist bekanntermaßen numerisch nicht einfach.

2.3 Ein Satz für lineare Gleichungssysteme

Durch eine einfache Verschärfung der Bedingung im Fixpunktsatz von Brouwer läßt sich nun ein Satz für lineare Gleichungssysteme angeben, der gleichzeitig die Nichtsingularität von A und R und damit die Eindeutigkeit der Lösung \hat{x} liefert.

Satz 2 *Seien $A, R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\emptyset \neq X \subseteq \mathbb{R}^n$ kompakt und konvex mit*

$$g(X) \subseteq \overset{\circ}{X},$$

dann folgt, daß A und R nichtsingulär sind und daß genau ein \hat{x} existiert mit $\hat{x} = A^{-1}b \in X$.

Beweis: Nach dem Brouwerschen Fixpunktsatz existiert ein $\hat{x} \in X$ mit $g(\hat{x}) = \hat{x}$, also mit $R(b - A\hat{x}) = 0$. Angenommen, es sei $Ay = 0$ für ein $y \in \mathbb{R}^n$, dann gilt für ein beliebiges $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} g(\hat{x} + \lambda y) &= \hat{x} + \lambda y + R(b - A(\hat{x} + \lambda y)) \\ &= \hat{x} + \lambda y - \lambda RAy \\ &= \hat{x} + \lambda y, \end{aligned}$$

was bedeutet, daß jedes $z := \hat{x} + \lambda y$ Fixpunkt von g ist. Wäre $y \neq 0$, so gäbe es demnach ein $\lambda \in \mathbb{R}$, sodaß z auf dem Rand von X liegt, was einen Widerspruch zu $g(X) \subseteq \overset{\circ}{X}$ bedeutet. Das heißt aber $y = 0$, und damit ist A nichtsingulär.

Nimmt man weiterhin an $Ry = 0$, dann existiert ja wegen der Nichtsingularität von A auch $A^{-1}y$ und für ein beliebiges $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt

$$\begin{aligned} g(\hat{x} + \lambda A^{-1}y) &= \hat{x} + \lambda A^{-1}y + R(b - A\hat{x} - \lambda AA^{-1}y) \\ &= \hat{x} + \lambda A^{-1}y. \end{aligned}$$

Wäre $y \neq 0$, so gäbe es wiederum ein $\lambda \in \mathbb{R}$ so, daß $\hat{x} + \lambda A^{-1}y \in \partial X$ im Widerspruch zu $g(X) \subseteq \overset{\circ}{X}$. Also ist $y = 0$ und auch R nichtsingulär.

Aus $R(b - A\hat{x}) = 0$ folgt damit $b = A\hat{x}$. Wegen der Nichtsingularität von A ist die Lösung des Gleichungssystems eindeutig bestimmt. \square

Es reicht also aus, die Bedingung $g(X) \subseteq \overset{\circ}{X}$ zu überprüfen, um festzustellen, ob die Funktion $g(x)$ genau einen Fixpunkt in X besitzt und damit die Lösung des Gleichungssystems eindeutig bestimmt ist und in X liegt.

2.4 Modifikation für die praktische Anwendung

Praktische Bedeutung hat der gerade bewiesene Satz deshalb, weil die Bedingung $g(X) \subseteq \overset{\circ}{X}$ auf dem Rechner nachprüfbar ist. Allerdings müssen gewisse Vorkehrungen getroffen werden, damit diese Bedingung überhaupt erfüllt werden kann.

Geht man gemäß der Isotonie von der Überlegung aus, daß

$$\begin{aligned} g(X) &\subseteq X + R(b - AX) \\ &= \{x_1 + R(b - Ax_2) : x_1, x_2 \in X\}, \end{aligned}$$

so läßt sich die Bedingung

$$X + R(b - AX) \subseteq \overset{\circ}{X}$$

nie erfüllen. Es gilt nämlich für den Durchmesser

$$d(X + R(b - AX)) = d(X) + d(R(b - AX)) \geq d(X).$$

Der Ausdruck $X + R(b - AX)$ demonstriert einen typischen Fall von Aufblähung. Der Intervallausdruck muß also in der Inklusionsbedingung derart modifiziert werden, daß das Intervall X nur einmal vorkommt. Mit der Umformung

$$g(x) = x + R(b - Ax) = Rb + (I - RA)x$$

tritt für den Ausdruck $Rb + (I - RA)X$ keine Überschätzung mehr auf und die Inklusion

$$Rb + (I - RA)X \subseteq \overset{\circ}{X}$$

ist möglich.

Um wirklich *gute* Einschließungen zu bekommen, muß noch etwas mehr getan werden. Ähnlich wie bei herkömmlichen Verfahren zur Lösung von linearen Gleichungssystemen arbeitet man mit dem Residuum. Zu einem Gleichungssystem $Ax = b$ und einer Näherungslösung \bar{x} mit $A\bar{x} \approx b$ wird zur Verbesserung der Näherung eine Lösung y von $Ay = b - A\bar{x}$ berechnet. Könnte man y exakt berechnen, so ergäbe sich

$$A(\bar{x} + y) = A\bar{x} + Ay = A\bar{x} + b - A\bar{x} = b$$

und damit wäre $\bar{x} + y$ die exakte Lösung des LGS $Ax = b$.

Auf eben dieses Residuen Gleichungssystem kann der Einschließungssatz von oben angewendet werden. Damit kommt man zu folgender Aussage:

$$R(b - A\bar{x}) + (I - RA)X \subseteq \overset{\circ}{X} \implies A^{-1}b \in \bar{x} + X.$$

Dies ist nun ein Verfahren, mit dem man sehr gute Einschließungen erzielen kann.

2.5 Zur Güte des Verfahrens

Die Güte eines solchen Einschließungsverfahrens hängt natürlich stark davon ab, wie gut man die Aufblähung in den Griff bekommt. Zu beachten ist, daß wegen $R \approx A^{-1}$ und damit $RA \approx I$ für die Matrix $I - RA$ gilt

$$I - RA \sim O(\varepsilon).$$

Weiterhin ist $\bar{x} \approx A^{-1}b$, also $A^{-1}b - \bar{x} \sim O(\varepsilon)$, so daß auch X in der Größenordnung von ε liegt. Insgesamt heißt das aber dann

$$(I - RA)X \sim O(\varepsilon^2).$$

Das bedeutet, daß der einzige Term in der Einschließungsformel, in dem Intervalle vorkommen, in der Größenordnung von ε^2 verschwindet. Also selbst wenn eine gewisse Aufblähung im Ausdruck $(I - RA)X$ vorliegt, so liegt diese in der Größenordnung von ε^2 und verschwindet damit gegenüber dem Term $R(b - A\bar{x})$. Die von der intervallmäßigen Durchführung verursachte Aufblähung hat man also so gut im Griff, daß mit diesem Verfahren sehr gute Einschließungen zu erwarten sind.

2.6 Beispiel

Zur Demonstration des Verfahrens für die Einschließung der Lösung soll zunächst ein sehr einfaches Beispiel mit nur einer einzigen Unbekannten dienen, das Gleichungssystem

$$Ax = b, \quad \text{mit } A = 9 \quad \text{und } b = 4.$$

Zunächst muß eine Näherungsinverse R für $A = 9$ berechnet werden, also $R \approx A^{-1} = 1/9 = 0.\bar{1}$. Etwas grob genähert sei $R = 0.1$ angenommen. Als Näherung \bar{x} für die exakte Lösung $\hat{x} = 0.\bar{4}$ des Gleichungssystems ergibt sich dann

$$\bar{x} := Rb = 0.1 \cdot 4 = 0.4$$

Für das Startintervall X wird $X = [0.3, 0.5]$ gewählt, und die Durchführung des Verfahrens soll in der Form $Rb + (I - RA)X$ erfolgen und nicht mit dem Residuum. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} Rb + (I - RA)X &= 0.1 \cdot 4 + (1 - 0.1 \cdot 9) \cdot [0.3, 0.5] \\ &= 0.4 + 0.1 \cdot [0.3, 0.5] \\ &= [0.43, 0.45] \\ &\subseteq \overset{\circ}{X} \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, daß für die eindeutige Lösung \hat{x} von $Ax = b$ gilt

$$\hat{x} \in [0.43, 0.45].$$

Man sieht, daß das Verfahren eine recht gute Einschließung liefert, trotz der schlechten Näherung \hat{x} . Allerdings war auch das Startintervall X so gewählt, daß \hat{x} in X lag, was normalerweise, bei komplizierten Problemen, nicht vorausgesetzt werden kann.

Wählt man z. B. als Startintervall $X = [0.3, 0.4]$, also ein Intervall, in dem die Lösung nicht enthalten ist, so ergibt sich

$$Rb + (I - RA)X = 0.4 + 0.1 \cdot [0.3, 0.4] = [0.43, 0.44].$$

Iteriert man nochmals mit dem neuen Intervall $X = [0.43, 0.44]$, so folgt

$$Rb + (I - RA)X = 0.4 + 0.1 \cdot [0.43, 0.44] = [0.443, 0.444] \quad .$$

Der Mechanismus ist klar, das neue Intervall X ergibt sich aus der Summe von 0.4 und dem 0.1-fachen des alten Wertes von X . Eine Beobachtung bei dieser Iteration ist, daß keines dieser so entstehenden Intervalle X jemals die Lösung \hat{x} enthält. Die Intervallgrenzen nähern sich zwar immer weiter der Lösung $\hat{x} = 4/9$, aber eine Einschließung wird nicht erreicht. Die Bedingung

$$Rb + (I - RA)X \subseteq \overset{\circ}{X}$$

ist niemals erfüllt.

2.7 Die Epsilon-Aufblähung

Dieser gerade demonstrierte Nachteil des Verfahrens läßt sich dadurch beheben, daß das Intervall X vor der Ausführung eines Iterationsschrittes künstlich leicht aufgebläht wird, also z. B. die erste Iterierte $[0.43, 0.44]$ zum Intervall $[0.40, 0.47]$ erweitert wird. Führt man nun erneut einen Iterationsschritt durch, so erhält man

$$Rb + (I - RA)X = [0.440, 0.447] \overset{\circ}{\subseteq} [0.40, 0.47]$$

und damit die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung \hat{x} im Intervall $[0.440, 0.447]$.

War die Aufblähung der Intervalloperationen zunächst unerwünscht, wird jetzt eine künstliche Aufblähung eingeführt, um eine Einschließung zu ermöglichen. Diese künstliche Aufblähung von X hat nicht nur heuristischen Charakter, sondern auch einen tieferen mathematischen Hintergrund. Man kann zeigen, daß bei Anwendung einer solchen ε -Aufblähung das Verfahren genau dann konvergiert, wenn der Spektralradius der Iterationsmatrix kleiner als 1 ist, wenn also gilt

$$\rho(|I - RA|) < 1.$$

Dabei ist die Aussage völlig unabhängig vom Wert von ϵ , d. h. die Größe der Aufblähung spielt keine Rolle für die Konvergenz. Dieses Resultat ist bestmöglich.

Der Unterschied zu herkömmlichen numerischen Verfahren ist der folgende. Üblicherweise liefern numerische Verfahren gute Näherungen für die Lösung eines gegebenen Problems. Die Einschließungsverfahren liefern darüber hinaus garantierte Fehlerabschätzungen. Eine „scheinbare“ Konvergenz einer Gleitpunktoperation wird mit Sicherheit ausgeschlossen.

Literatur

- [1] Alefeld, G. und Herzberger, J.: *Einführung in die Intervallrechnung*. Bibliographisches Institut, Mannheim, 1974.
Überarbeitete englische Ausgabe: *Introduction to Interval Computations*. Academic Press, New York, 1983.
- [2] Bauch, H., Jahn, K.-U., Oelschlägel, D., Süsse, H. und Wiebigke, V.: *Intervallarithmetik*. Teubner, Leipzig, 1987.
- [3] Mayer, G.: *Grundbegriffe der Intervallrechnung*. In diesem Band, S. 101 ff., 1988.
- [4] Rump, S. M.: *Solving Algebraic Problems with High Accuracy*. In Kulisch, U. und Miranker, W. L.: *A New Approach to Scientific Computation*. Academic Press, New York, 1983.