HH
CERN LIBRARIES, GENEVA

SCAN-9804031

Preprint

NTZ 1/1998

**Verifizierte Fehlerschranken und
Gleichungssysteme**

von

815

G. Rex

Die Preprintreihe des ZHS enthält Beiträge aus den Abteilungen Naturwissenschaftlich-Theoretisches Zentrum, Geistes- und Sozialwissenschaftliches Zentrum und Frankreich-Zentrum. Sie sind auch im Internet unter der Adresse <http://www.uni-leipzig.de/~zhs> abzurufen.
Für weitere Auskünfte und eine Liste der bereits erschienenen und geplanten Texte wenden Sie sich bitte an: Universität Leipzig, Zentrum für Höhere Studien, Augustusplatz 10/11, 04109 Leipzig.

Verifizierte Fehlerschranken und Gleichungssysteme

Rex, G.

Mathematisches Institut und Naturwissenschaftlich Theoretisches Zentrum
Universität Leipzig

Augustusplatz 10 - 11 , D 04109 Leipzig

Auf der Grundlage eines Theorems wird ein Algorithmus angegeben, der es erlaubt verifizierte Fehlerschranken für eine Lösung $x^* \in \mathbb{R}^n$ eines Gleichungssystems $h(x) = 0$ zu einer Näherungslösung x^0 von x^* zu berechnen. Gegebenenfalls wird die Existenz und Eindeutigkeit von x^* in diesen Schranken nachgewiesen. Dazu benötigte H-Matrix Eigenschaften können, abhängig von der Kondition des Systems, über Präkonditionierungsmatrizen erreicht werden. Im Kegel $\mathbb{R}_+^n$ werden dann mittels eines Iterationsprozesses Schranken für x^* berechnet.

1. Grundlagen

Es sei $h(x) = 0$ ein System von Gleichungen mit $h : G \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ und h sei Gateaux-differenzierbar auf G .

- Ziel ist es zu einer auf einem Computer berechneten Näherungslösung x^0 einer exakten Lösung x^* von $h(x) = 0$ verifizierte Fehlerschranken $u \in \mathbb{R}_+^n := \{x \in \mathbb{R}^n | 0 < x_i, 1 \leq i \leq n\}$ ($\mathbb{R}_+^n$ wird im folgenden Kegel genannt) zu berechnen, dabei sind gegebenenfalls die Existenz und Eindeutigkeit von $x^* \in x^0 \pm u$ nachzuweisen.
- Zur Berechnung von verifizierten Vektor- und Matrixschranken werden intervallanalytische Hilfsmittel herangezogen; Grundlagen und Weiterführendes dazu findet man z.B. in [6] und [1].
- Im Kegel wird dann mittels gerichteter Rundung ein Fehlerschrankenvektor u iterativ berechnet.

Es werden jetzt Zusammenhänge zwischen Intervallen und reellen Größen gegeben, die ein Rechnen im Kegel ermöglichen: $\mathbb{IIR} := \{X \mid X = [\underline{X}, \bar{X}]; \underline{X}, \bar{X} \in \mathbb{R}\}$ bezeichnet die Menge aller reellen abgeschlossenen Intervalle; für ein $X \in \mathbb{IIR}$ ist mit $X = [\underline{X}, \bar{X}] = \text{mid}(X) \pm \text{rad}(X)$ die Mittelpunkt-Radius-Darstellung gegeben, wobei $\text{mid}(X) := (\underline{X} + \bar{X})/2$ den Mittelpunkt und $\text{rad}(X) := (\bar{X} - \underline{X})/2$ den Radius von X definieren.

Mit diesen Größen können der Betrag (die Magnitude)

$$|X| = |\text{mid}(X)| + \text{rad}(X) \quad (1)$$

und die Mignitude

$$\langle X \rangle = |\text{mid}(X)| - \text{rad}(X) \quad \text{falls } 0 \notin X; \quad \text{anderenfalls ist } \langle X \rangle = 0 \quad (2)$$

berechnet werden.

$\mathbb{IIR}$ kann auf $\mathbb{IIR}^n$, die Menge aller n -dimensionalen Intervallvektoren bzw. $\mathbb{IIR}^{n,n}$, die Menge aller (n,n) -dimensionalen Intervallmatrizen erweitert werden, wobei dann die Relationen $\subseteq$, $\subset$, $\in$, $<$, und $\leq$ komponenten- bzw. elementweise anzuwenden sind.

Intervalloperationen sind nicht eingeschränkt auf arithmetische Operationen; sie sind auch erweiterbar auf Funktionen und ermöglichen so den Einschluß der Wertebereiche dieser Funktionen. Seien $f : G \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $I(G) :=$

$\{X \in \mathbb{IIR}^n \mid X \subseteq G\}$; eine Intervallfunktion $F : I(G) \subseteq \mathbb{IIR}^n \rightarrow \mathbb{IIR}$ ist eine Intervalleinschließung, wenn

$$F(X) \supseteq f(X) := \{f(x) \mid x \in X \in I(G)\}$$

erfüllt ist. Für mehr Details und Softwarepakete sei z.B. auf [6],[1],[3],[4] und [5] verwiesen.

Im folgenden sei $A \in \mathbb{IIR}^{n,n}$. Um mit A im Kegel rechnen zu können, werden (1) und (2) elementweise auf die Jacobi-Zerlegung von A so angewendet, daß mit

$$\langle A \rangle := \langle D(A) \rangle - |N(A)| \in \mathbb{R}^{n,n} \quad (3)$$

eine Vergleichsmatrix definiert ist, wobei $D(A)$ den Hauptdiagonal- und $N(A)$ den Nebendiagonalteil von A bezeichnen. Im weiteren wird mit (3) die H-Matrix definiert und es werden H-Matrix-Eigenschaften angegeben, dabei steht $\rho(\cdot)$ für den Spektralradius einer Matrix.

$$A \text{ H-Matrix} : \iff \exists u \in \mathbb{R}_+^n (0 < \langle A \rangle u) \iff \rho(\langle D(A) \rangle^{-1} |N(A)|) < 1,$$

d.h., eine H-Matrix hat eine Kontraktionseigenschaft und folgende Regularitätseigenschaften (siehe [6]):

$$A \text{ H-Matrix} \implies A \text{ regulär und } \langle A \rangle^{-1} \geq |A^{-1}|.$$

Ist A eine untere (bzw. obere) Intervalldreiecksmatrix, dann gilt:

$$A \text{ regulär} \iff 0 < \langle D(A) \rangle \iff \rho(\langle D(A) \rangle^{-1} |N(A)|) = 0 \iff A \text{ H-Matrix}.$$

Damit ist eine Möglichkeit gegeben durch Präkonditionierung Matrizen zu erzeugen, die *näherungsweise* von Dreiecks- bzw. Diagonalgestalt sind. Ein Beispiel soll das verdeutlichen. Für eine QR-Zerlegung von $\text{mid}(A)$ soll $\langle Q^T A \rangle$ als eine näherungsweise obere Dreiecksmatrix angesehen werden. Das folgende Theorem stützt sich auf Präkonditionierungen dieser Art von links oder rechts. Mit dem unten angegebenen Algorithmus bleibt nachzuweisen, daß die so erzeugten Matrizen tatsächlich H-Matrizen sind.

2. Theorem

Theorem . Voraussetzungen:

- (v1): $h : G \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$; $x^0 \in G$ sei eine Approximation für eine exakte Lösung $x^* \in G$ mit $h(x^*) = 0$,
 - (v2): h sei Gateaux-differenzierbar auf einer offenen Menge $G^0 \subset G$ mit $X := x^0 \pm w \in I(G^0)$, wobei $w \in \mathbb{R}_+^n$ komponentenweise hinreichend klein sei,
 - (v3): $H'(X) \in \mathbb{IR}^{n,n}$ sei eine Intervalleinschließung der Jacobi-Matrix h' über X ,
 - Nichtexistenzaussage: $\exists i ((|H'(X)|w)_i < |h_i(x^0)|, 1 \leq i \leq n)$ dann gilt: $x^* \notin X$,
 - (v4): seien $C, B \in \mathbb{R}^{n,n}$ gegeben und $\langle C H'(X) B \rangle$ H-Matrix,
 - (v5): die Lösung z von $\langle C H'(X) B \rangle z = |C h(x^0)|$ erfülle $u := |B|z \leq w$,
- dann gelten:
- Regularitätsaussage: die Matrizen C, B und $H'(X)$ sind regulär,
 - Existenz- und Eindeutigkeitsaussage: $\exists! x^* \in X$ mit $h(x^*) = 0$,
 - Einschließung: $x^* \in x^0 \pm u \subseteq X$.

Bemerkungen: Der Beweis dieses Theorems ist in [7] zu finden. Das Erfülltsein von (v4) und (v5) kann iterativ im $\mathbb{R}_+^n$ überprüft werden, denn mit (3) ist folgende Zerlegung gegeben: $\langle C H'(X) B \rangle = -\mathcal{L} + \mathcal{D} - \mathcal{U}$, $0 < \mathcal{D}$, $0 \leq \mathcal{L}, \mathcal{U}$; wobei $\mathcal{D}$ für den Hauptdiagonal- und $-\mathcal{L}$ bzw. $-\mathcal{U}$ für den unteren bzw. oberen Nebendiagonalteil stehen. Damit kann die Gleichung $\langle C H'(X) B \rangle z = |C h(x^0)| =: g$, abhängig von der Präkonditionierung, auf die Fixpunktform $z = Pz + d$ transformiert werden, wobei z.B. bei einer linken Präkonditionierung und Gauß-Seidel-Zerlegung $P := (\mathcal{D} - \mathcal{L})^{-1}\mathcal{U}$ und $d := (\mathcal{D} - \mathcal{L})^{-1}g$ zu setzen sind.

Nach [2, S.187] gilt: Die Iteration $z^{k+1} := Pz^k + d$, $k := 0, 1, \dots$ konvergiert gegen $z = \langle C H'(X) B \rangle^{-1} |C h(x^0)|$ für jedes $z^0 \in \mathbb{R}_+^n \iff \langle C H'(X) B \rangle$ H-Matrix.

3. Algorithmus

Im folgenden bedeutet das Symbol $\sharp$, daß die folgenden Terme intervallanalytisch zu berechnen sind. Alle anderen Operationen sind mittels gerichteter Rundung auszuwerten.

- Gegeben seien $x^0 \in \mathbb{R}^n$; $C, B \in \mathbb{R}^{n,n}$;
- Wähle ein $w \in \mathbb{R}_+^n$ und berechne: $X := \sharp(x^0 \pm w)$, $h^0 := \sharp h(x^0)$, $H' := \sharp h'(X)$;
Test: If $(\exists i (|h_i^0| > (|H'|w)_i, 1 \leq i \leq n))$ Then **STOP** ($x^* \notin X$);
- Berechne $\mathcal{G} := \sharp \langle C H' B \rangle$, $g := \sharp |C h^0|$, ($g > 0$); Zerlegung: $\mathcal{G} = \mathcal{D} - \mathcal{L} - \mathcal{U}$;
Test: If $(\exists i (\mathcal{D}_{ii} = 0, 1 \leq i \leq n))$ Then **STOP** ($\mathcal{G}$ ist keine H-Matrix);
- Berechne: $L_D := \mathcal{D}^{-1}\mathcal{L}$, $U_D := \mathcal{D}^{-1}\mathcal{U}$, $d_D := \mathcal{D}^{-1}g$
Wähle $z^0 \in \mathbb{R}_+^n$, $k_{\max} \in \mathbb{N}$; setze $k := 0$,
repeat $k := k + 1$
 $z^1 := L_D z^1 + U_D z^0 + d_D$ (bzw. $z^1 := U_D z^1 + L_D z^0 + d_D$ bzw. $z^1 := (L_D + U_D) z^0 + d_D$)
Test If $z^1 \leq z^0$ und $u := |B|z^1 \leq w$ Then **STOP** ($\exists! x^* \in x^0 \pm u \subseteq X$)
 $z^0 := z^1$
until $k > k_{\max}$

4. Literatur

- 1 ALEFELD, G., FROMMER, A., LANG, B.: Scientific Computing and Validated Numerics; Akademie Verlag, Berlin 1996.
- 2 BERMAN, A., PLEMMONS, R.J.: Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences; Academic Press, New York 1979.
- 3 HAMMER, R., HOCKS, M., KULISCH, U., RATZ, D.: Numerical Toolbox for Verified Computing I; Springer V., Berlin 1993.
- 4 KLATTE, R., KULISCH, U., NEAGA, M., RATZ, D., ULLRICH, C.: PASCAL-XSC; Springer Verlag, Berlin 1991.

- 5 KNUEPPEL, O.: PROFIL/BIAS - A Fast Interval Library; Computing **53** (1994),277-288.
- 6 NEUMAIER, A.: Interval Methods for Systems of Equations; Cambridge University Press, Cambridge 1990.
- 7 REX, G.: Fixed Point Theorems and Error Bounds for Solutions of Equations. NTZ - Preprint 33/1997, 1-8.