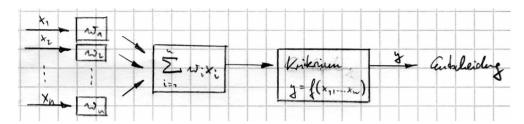
Neuronales Netz (Ein-Schicht-Modell, linear)



Verhalten des Netzes bestimmt durch Gewichte w_1, \ldots, w_n

Training des Netzes Wähle w_1, \ldots, w_n so, dass eine große Zahl von Tests mit vorgegebenen Eingangsdaten $(x_1^{(j)}, \ldots, x_n^{(j)})^{\top}$ und bekannten Resultaten $y^{(j)}$ möglichst gut wiedergegeben wird:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^{(j)} w_i \approx y^{(j)} \,, \quad (j = 1, \dots, m)$$

 \leadsto überbestimmtes lineares Gleichungssystem, Bestimmung von (w_1, \dots, w_n) als Kleinste-Quadrate-Lösung

praktisch Lösung der Normalgleichungen oder Lösung mittels QR-Zerlegung.

3 Rechnerarithmetik und Rundungsfehler

3.1 Gleitpunktarithmetik

Bemerkung 3.1 (Gleitpunktzahlen)

a) Ganzzahlige Datentypen (INTEGER) mit exakter Arithmetik

$$-{\rm MaxInt} - 1\,,\, \ldots\,,\, -1,\, 0,\, 1,\, \ldots\,, {\rm MaxInt}\,,$$

- z. B. für Indizes in Laufanweisungen.
- b) $Normalisierte\ Gleitpunktdarstellung\ (engl.:\ floating\ point\ numbers)$ zur Darstellung reeller Zahlen

$$F:=\{\,y\,:\,y=\pm\,m*\beta^{e-t}\,\}\subset\mathbb{R}$$

mit β ... Basis (meist 2, 8 oder 16),

t ... Mantissenlänge,

e ... Exponent, $e_{\min} \le e \le e_{\max}$

m ... Mantisse (ganzzahlig), m = 0 oder $\beta^{t-1} \le m < \beta^t$

Schreibweise $y = \pm \beta^e * [0.d_1d_2\cdots d_t]_{\beta} := \pm \beta^e \left(\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \ldots + \frac{d_t}{\beta^t}\right)$

mit Mantisse $m = d_1 d_2 \cdots d_t$ oder m = 0.

3. Rechnerarithmetik und Rundungsfehler



Beispiel

Zahlendarstellung in Matlab

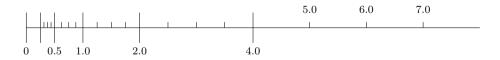
- >> format long e % Datenausgabe mit vielen Dezimalstellen % Exakte Darstellung ganzer Zahlen ans = 1 % Exakte Arithmetik für ganze Zahlen ans = 0 >> 1 - 1 + 1.0e-15 % Beim Rechnen mit reellen Zahlen können % Rundungsfehler auftreten, müssen aber nicht. % Reihenfolge der Rechenschritte ist wesentlich >> 1 + 1.0e-8 - 1 ans = 9.999999939225290e-009 % Groessenordnung der Rundungsfehler: ca. 1.0e-16 >> sqrt(2)^2 - 2 ans = 4.440892098500626e-016 % Groessenordnung der Rundungsfehler: ca. 1.0e-16 >> factorial(170) ans = 7.257415615307994e+306 >> factorial(171) % Darstellbarer Zahlenbereich nach oben beschraenkt % Zahl 171! uebersteigt darstellbaren Zahlenbereich

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, FB Mathematik und Informatik Martin Arnold: Numerische Mathematik für Fachrichtung Informatik und Lehramt (WiS 2005/06)

Abbildung 3.1: Rechnen in Gleitpunktarithmetik: Beispiel Matlab.

$$\begin{aligned} \mathbf{Beispiel} \quad \beta = 2 \,, \quad t = 3 \,, \quad e_{\min} = -1 \,, \quad e_{\max} = 3 \\ & \qquad \qquad \qquad e^{=-1} \, \, \qquad \qquad e^{=0} \, - \, \cdots \\ & \qquad \qquad [0.100]_2 \quad [0.101]_2 \quad [0.110]_2 \quad [0.111]_2 \quad [0.100]_2 \\ F \,\cap\, [0,\infty) = \big\{\, 0, \, 0.25, \, 0.3125, \, 0.3750, \, 0.4375, \, 0.5, \, 0.625, \, 0.750, \, 0.875, \\ & \qquad \qquad 1.0, \, 1.25, \, 1.50, \, 1.75, \, 2.0, \, 2.5, \, 3.0, \, 3.5, \, 4.0, \, 5.0, \, 6.0, \, 7.0 \, \big\} \end{aligned}$$

Beachte: Gleitpunktzahlen sind auf der reellen Achse nicht gleichverteilt.



IEEE—Standard 754 [1985] Binäre Gleitpunktarithmetik, Quasi—Standard einfache Genauigkeit (single precision)

4 Byte,
$$\beta=2\,,\ t=23\,,\ e_{\rm min}=-126\,,\ e_{\rm max}=127$$
 Zahlenbereich: $[1.2_{\rm E}-38,3.4_{\rm E}+38]$

doppelte Genauigkeit (double precision)

8 Byte,
$$\beta=2$$
, $t=52$, $e_{\min}=-1022$, $e_{\max}=1023$ Zahlenbereich: $[2.2_{\rm E}-308,1.8_{\rm E}+308]$

Abstand zweier positiver Gleitpunktzahlen x, \tilde{x} :

Maschinenepsilon eps = β^{1-t} ... kleinste Maschinenzahl, die zu $1 = [0.10 \cdots 0]_{\beta} * \beta^1$ addiert einen von 1 verschiedenen Wert ergibt

Sind x, \tilde{x} unmittelbar benachbart, so gilt

$$\frac{1}{\beta} \operatorname{eps} |x| \le |x - \tilde{x}| \le \operatorname{eps} |x|.$$

Bemerkung 3.2 (Rundung, Rundungsfehler)

a) Sei G die Menge aller y wie in Bemerkung 3.1, jedoch für beliebiges $e \in \mathbb{Z}$, und fl: $\mathbb{R} \to G$ eine Abbildung mit

$$|x - fl(x)| = \min_{\tilde{x} \in G} |x - \tilde{x}|, (x \in \mathbb{R}).$$

Der Übergang $x \mapsto \mathtt{fl}(x)$ heißt runden. \mathtt{fl} ist nicht eindeutig, praktisch meist: Gerade-Zahl-Regel, d. h., für $\tilde{x}_1, \, \tilde{x}_2 \in G$ mit $\tilde{x}_1 \neq \tilde{x}_2$ und

$$|x - \tilde{x}_1| = |x - \tilde{x}_2| = \min_{\tilde{x} \in G} |x - \tilde{x}|$$

wählt man fl so, dass d_t geradzahlig.

b) praktisch $fl(x) \stackrel{!}{\in} F$

Exponentenüberlauf (engl.: overflow): $|\mathtt{fl}(x)| > \max\{|y| : y \in F\}$

Exponentenunterlauf (engl.: underflow): $0 < |fl(x)| < \min\{|y| : y \in F, y \neq 0\}$

c) Zu jedem $x \in \mathbb{R}$ mit $fl(x) \in F$ ist

$$\mathtt{fl}(x) = x(1+\delta) \ \text{mit einem } \delta \ \text{mit } |\delta| < \varepsilon$$

und

 $fl(x) = x/(1+\bar{\delta})$ mit einem $\bar{\delta}$ mit $|\bar{\delta}| \le \varepsilon$,

wobei $\varepsilon := \frac{1}{2}\beta^{1-t}$ die Maschinengenauigkeit (engl.: unit round-off) bezeichnet:

$$\varepsilon \approx 5.96_E - 8$$
 (single), $\varepsilon \approx 1.11_E - 16$ (double).

Begründung

Für x>0 ist $x=\mu*\beta^{e-t}$ mit einem $\mu\in[\beta^{t-1},\beta^t-1]$ und $e\in[e_{\min},e_{\max}]$. Unmittelbar benachbarte Gleitpunktzahlen: $\underline{\mu}*\beta^{e-t}$, $\overline{\mu}*\beta^{e-t}$ mit $\underline{\mu}\leq\mu\leq\overline{\mu}$. Es gilt

$$\begin{split} |x - \mathtt{fl}(x)| &= & \min \big\{ \, |\mu - \underline{\mu}|, |\mu - \bar{\mu}| \, \big\} * \beta^{e-t} \\ &\leq & \frac{1}{2} \, |\bar{\mu} - \underline{\mu}| * \beta^{e-t} \leq \frac{1}{2} * \beta^{e-t} = x \cdot \frac{1}{2\mu} \leq x \cdot \varepsilon \end{split}$$

Bemerkung 3.3 (Absoluter und relativer Fehler)

a) Der absolute Fehler einer Größe mit Soll-Wert $\bar{\xi}$ und Ist-Wert ξ ist

$$\delta \xi := |\xi - \bar{\xi}| \,,$$

für $\bar{\xi} \neq 0$ ist der zugehörige relative Fehler $f_{\mathrm{rel}}(\bar{\xi}) := \frac{|\xi - \bar{\xi}|}{|\bar{\xi}|}$.

b) Der in Bemerkung 3.2c) betrachtete Rundungsfehler erfüllt

$$f_{\rm rel}(x) = \frac{|\mathtt{fl}(x) - x|}{|x|} \le \varepsilon.$$

Bemerkung 3.4 (Gleitpunktarithmetik)

 $\mathbf{Grundrechenarten} \quad \mathsf{op} \in \{\,+,\,-,\,*,\,/\,\,\}\,, \ \ \mathsf{op} \,:\, \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

Problem F nicht abgeschlossen bez. op

Anforderung ("Standardmodell")

$$\left. \begin{array}{lll} x \ \widetilde{\operatorname{op}} \ y & = & (x \ \operatorname{op} \ y)(1+\delta) \\ x \ \widetilde{\operatorname{op}} \ y & = & \frac{x \ \operatorname{op} \ y}{1+\bar{\delta}} \end{array} \right\}, \quad (x \in F) \, ,$$

 $\mathrm{mit}\ \delta = \delta(x,y;\mathrm{op})\,,\ \bar{\delta} = \bar{\delta}(x,y;\mathrm{op})\,,\ |\delta| \leq \varepsilon\,,\ |\bar{\delta}| \leq \varepsilon\,.$

praktisch $x \circ p y$ "unendlich genau" (praktisch: "mit größerer Mantissenlänge") auswerten, anschließend runden auf nächstgelegene Gleitpunktzahl (Gerade–Zahl–Regel).

Alternativen

- ullet Runden auf nächst kleinere bzw. nächst größere Maschinenzahl \leadsto Intervallarithmetik
- "Abschneiden" überzähliger Ziffern ("chopping")

$$\begin{aligned} \mathbf{Beispiel} \quad \beta = 2 \,, \quad t = 3 \,, \quad x = \frac{7}{4} &= [0.111]_2 * 2^1 \,, \quad y = \frac{3}{8} = [0.110]_2 * 2^{-1} \\ x + y &= \quad [0.111]_2 * 2^1 + [0.110]_2 * 2^{-1} &= [11.100]_2 * 2^{-1} + [0.110]_2 * 2^{-1} \\ &= \quad [100.010]_2 * 2^{-1} &= [0.100010]_2 * 2^2 \\ x \,\widetilde{+} \, y &= \quad [0.100]_2 * 2^2 &= 2.00 \end{aligned}$$

absoluter Fehler: $|2.00 - \frac{17}{8}| = \frac{1}{8}$

relativer Fehler: $\frac{1}{8}: \frac{17}{8} \approx 6\%$

Maschinengenauigkeit: $\varepsilon = 2^{-3} = \frac{1}{8} = 12.5\%$

Bemerkung 3.5 (Rundungsfehleranalyse: Beispiel Addition)

geg.: $a, b, c \in F$

ges.: s = a + b + c in Gleitpunktarithmetik

$$\widetilde{s} := (a + b) + c$$

$$\widetilde{s} = ((a + b) + c)(1 + \varepsilon_2) = ((a + b)(1 + \varepsilon_1) + c)(1 + \varepsilon_2)$$

$$= s + (a + b)\varepsilon_1 + (a + b + c)\varepsilon_2 + (a + b)\varepsilon_1\varepsilon_2 = s + (a + b)\varepsilon_1 + s \cdot \varepsilon_2$$

mit $|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2| \leq \varepsilon$. Terme höherer Ordnung werden vernachlässigt (" $\stackrel{.}{=}$ ").

$$f_{\rm rel}(s) = \left| \varepsilon_2 + \frac{a+b}{a+b+c} \varepsilon_1 \right| \le \left(1 + \left| \frac{a+b}{a+b+c} \right| \right) \varepsilon$$

Beachte Fehler in Zwischenergebnissen (ε_1) können verstärkt werden, ebenso auch Fehler in Ausgangsdaten.

kritisch $|a+b+c| \ll |a+b|$

$$\stackrel{\sim}{\widetilde{s}}:=a\stackrel{\sim}{+}(b\stackrel{\sim}{+}c)$$

$$\widetilde{\widetilde{s}} = s + (b+c)\varepsilon_3 + s \cdot \varepsilon_4 \quad \text{mit} \quad |\varepsilon_3|, \ |\varepsilon_4| \le \varepsilon,$$

$$f_{\rm rel}(s) = \left| \varepsilon_4 + \frac{b+c}{a+b+c} \varepsilon_3 \right| \le \left(1 + \left| \frac{b+c}{a+b+c} \right| \right) \varepsilon$$

Beachte Gleitpunktoperationen sind in der Regel weder assoziativ noch kommutativ.

Beispiel 3.6 (Addition in Gleitpunktarithmetik)

$$\begin{aligned} \text{geg.:} & \ \beta=2 \,, \ t=3 \\ & \ a=[0.111]_2*2^0=\frac{7}{8} \,, \ b=-[0.110]_2*2^0=-\frac{6}{8} \,, \ c=[0.110]_2*2^{-2}=\frac{3}{16} \in F \\ & \ \widetilde{s} = ([0.111]_2*2^0 \ \widetilde{-} \ [0.110]_2*2^0) \ \widetilde{+} \ [0.110]_2*2^{-2} \\ & = [0.001]_2*2^0 \ \widetilde{+} \ [0.110]_2*2^{-2}=[0.100]_2*2^{-2} \ \widetilde{+} \ [0.110]_2*2^{-2} \\ & = [1.01]_2*2^{-2}=[0.101]_2*2^{-1}=\frac{5}{16}=s \,, \ \text{exaktes Ergebnis} \\ & \ \widetilde{\widetilde{s}} = [0.111]_2*2^0 \ \widetilde{+} \ (-[0.110]_2*2^0 \ \widetilde{-} \ [0.110]_2*2^{-2}) \\ & = [0.111]_2*2^0 \ \widetilde{-} \ [0.100]_2*2^0=[0.011]_2*2^0=[0.110]_2*2^{-1}=\frac{3}{8} \end{aligned}$$

Ergebnis: $|\widetilde{\widetilde{s}} - s| = \frac{1}{16}$, relativer Fehler 20%

Relativer Fehler in b + c: $\frac{1}{8} = 12.5\%$

Verstärkung im Endergebnis \tilde{s} wegen $\left| \frac{b+c}{a+b+c} \right| = \frac{9}{5} = 1.8$

Bemerkung 3.7 (Auslöschung)

Problem Subtraktion annähernd gleich großer Zahlen in Gleitpunktarithmetik

geg.:
$$a, b \in \mathbb{R}$$
, ges.: $a - b$

$$\begin{split} \widetilde{a} &:= \mathtt{fl}(a) = a \left(1 + \varepsilon_a \right), \quad \widetilde{b} := \mathtt{fl}(b) = b \left(1 + \varepsilon_b \right) \quad \mathrm{mit} \quad |\varepsilon_a|, \ |\varepsilon_b| \leq \varepsilon \\ \\ &\mathtt{fl}(a - b) \quad = \quad \widetilde{a} \stackrel{\sim}{-} \widetilde{b} = \left(\widetilde{a} - \widetilde{b} \right) \left(1 + \varepsilon_- \right) \quad \mathrm{mit} \quad |\varepsilon_-| \leq \varepsilon \\ \\ &= \quad a - b + \varepsilon_- \cdot (a - b) + \varepsilon_a \cdot a - \varepsilon_b \cdot b \end{split}$$

$$f_{\text{rel}}(a-b) = \left| \frac{a}{a-b} \varepsilon_a - \frac{b}{a-b} \varepsilon_b + \varepsilon_- \right| \le \left(1 + \frac{|a|+|b|}{|a-b|} \right) \varepsilon$$

Relative Fehler ε_a , ε_b in den Ausgangsdaten können drastisch verstärkt werden, falls $|a-b| \ll |a|$, |b|, insbesondere für $a \approx b$.

Beispiel
$$\beta = 2, \ a = \frac{3}{5}, \ b = \frac{4}{7}$$

$$t = 5$$
 $\widetilde{a} = [0.10011]_2 * 2^0$, $\widetilde{b} = [0.10010]_2 * 2^0$
 $\varepsilon_a \approx 0.010$, $\varepsilon_b \approx 0.016$, $\varepsilon \approx 0.031$
 $\widetilde{a} = \widetilde{b} = [0.10000]_2 * 2^{-4} = \frac{1}{32}$
absoluter Fehler: $\frac{1}{32} - \frac{1}{35}$, relativer Fehler: 8.6%

$$egin{aligned} m{t} = m{3} & \widetilde{a} = \widetilde{b} = [0.101]_2 * 2^0 \\ & \varepsilon_a \approx 0.042 \,, \;\; \varepsilon_b \approx 0.094 \,, \;\; \varepsilon = 0.125 \\ & \widetilde{a} \stackrel{\sim}{-} \widetilde{b} = 0 \,, \;\; \text{relativer Fehler: } 100\% \end{aligned}$$

Führende Ziffern $[0.1001\cdots]_2$ in a und b sind gleich und werden bei Subtraktion "ausgelöscht" \Rightarrow "Auslöschung".

Faustregel Vermeide – falls möglich – die Subtraktion annähernd gleich großer Zahlen in numerischen Algorithmen.

Strategien und Tricks

- a) Unvermeidbare Subtraktionen annähernd gleich großer Zahlen möglichst an den Anfang des Algorithmus stellen.
- b) Konjugierte Wurzelausdrücke

•
$$\sqrt{1+x} - \sqrt{1-x} = \frac{(\sqrt{1+x} - \sqrt{1-x})(\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x})}{\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x}}$$

= $\frac{2x}{\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x}}$, $|x| \ll 1$

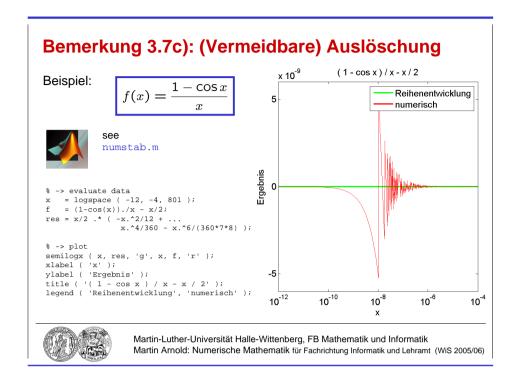


Abbildung 3.2: Analytische Umformungen zur Vermeidung von Auslöschung.

•
$$x^2 + px + q = 0 \implies x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

Auslöschung für $|q| \ll 1$, deshalb für $p \neq 0$

$$x_1 := -\frac{p}{2} - \operatorname{sgn}(p) \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \quad \operatorname{mit} \quad \operatorname{sgn}(p) := \begin{cases} 1 & \text{für } p > 0, \\ 0 & \text{für } p = 0, \\ -1 & \text{für } p < 0, \end{cases}$$

$$x_2 := \frac{q}{r_1} \quad \text{(Vietascher Wurzelsatz)}$$

c) Analytische Umformungen, z. B. Reihenentwicklungen (vgl. Abb. 3.2)

$$\frac{1-\cos x}{x} = \frac{1}{x} \left(1 - \left(1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} \mp \dots \right) \right) = \frac{x}{2} \left(1 - \frac{x^2}{12} \pm \dots \right)$$

Fehler der Approximation $\frac{1-\cos x}{x} \approx \frac{x}{2}$ betragsmäßig beschränkt durch $\frac{|x|}{2} \cdot \frac{x^2}{12}$ (Reihenrest alternierender Reihen, Satz von Leibniz)

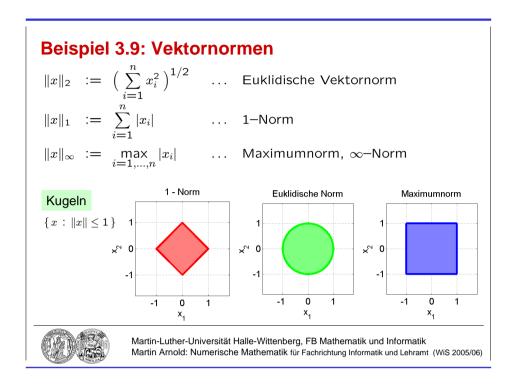


Abbildung 3.3: Einheitskugeln im \mathbb{R}^2 .

3.2 Vektor- und Matrixnormen

Definition 3.8 (Vektornorm)

Eine Abbildung $\|.\|: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ heißt Vektornorm auf \mathbb{R}^n , falls

1.
$$||x|| \ge 0$$
, $(x \in \mathbb{R}^n)$ und $(||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0)$ (Positivität),

2.
$$\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, (\alpha \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n)$$
 (Homogenität),

3.
$$||x+y|| \le ||x|| + ||y||$$
, $(x, y \in \mathbb{R}^n)$ (Dreiecksungleichung).

Beispiel 3.9 (Vektornorm)

a)
$$\|x\|_2 := \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \dots$$
 Euklidische Vektornorm
$$\|x\|_1 := \sum_{i=1}^n |x_i| \dots 1-\text{Norm}$$

$$\|x\|_\infty := \max_{i=1,\dots,n} |x_i| \dots \text{Maximumnorm, } \infty-\text{Norm}$$

b) Kugeln im \mathbb{R}^n : $\{x : ||x|| \le 1\}$, vgl. Abb. 3.3.

Bemerkung 3.10 (Eigenschaften von Vektornormen)

a) Jedes Skalarprodukt $\langle .,. \rangle$ in \mathbb{R}^n erzeugt eine Vektornorm in \mathbb{R}^n :

$$||x|| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$$

mit $|\langle x, y \rangle| \le ||x|| \cdot ||y||$, $(x, y \in \mathbb{R}^n)$... Cauchy–Schwarzsche Ungleichung.

b) Auf \mathbb{R}^n sind sämtliche Vektornormen $\ddot{a}quivalent$, d. h., zu beliebig vorgegebenen Vektornormen $\|.\|_p$, $\|.\|_q$ gibt es Konstanten \underline{c} , $\overline{c} > 0$ mit

$$c||x||_q \le ||x||_p \le \overline{c}||x||_q$$
, $(x \in \mathbb{R}^n)$.

Definition 3.11 (Matrixnorm)

- a) Eine Abbildung $\|.\|: \mathbb{R}^{m \times n} \to \mathbb{R}$ heißt Matrixnorm, falls
 - 1. $||A|| \ge 0$, $(A \in \mathbb{R}^{m \times n})$ und $(||A|| = 0 \Leftrightarrow A = 0)$ (Positivität),
 - 2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$, $(\alpha \in \mathbb{R}, A \in \mathbb{R}^{m \times n})$ (Homogenität),
 - 3. $||A + B|| \le ||A|| + ||B||$, $(A, B \in \mathbb{R}^{m \times n})$ (Dreiecksungleichung).
- b) Eine Matrixnorm ||.|| heißt submultiplikativ, falls

$$||AB|| \le ||A|| \cdot ||B||$$
, $(A \in \mathbb{R}^{m \times n}, B \in \mathbb{R}^{n \times p})$.

c) Eine submultiplikative Matrixnorm $\|.\|$ heißt verträglich (auch: konsistent) mit einer vorgegebenen Vektornorm $\|.\|$, falls

$$||Ax|| \le ||A|| \cdot ||x||$$
, $(A \in \mathbb{R}^{m \times n}, x \in \mathbb{R}^n)$.

Beispiel 3.12 (Frobeniusnorm)

$$||A||_{\mathrm{F}} := \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2} \quad \dots \quad \text{Frobenius norm}$$

• Submultiplikative Matrixnorm, verträglich mit $\|.\|_2$:

$$||Ax||_2^2 = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j\right)^2 \le \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{ij}\right)^2 \left(\sum_{j=1}^n x_j\right)^2 = ||A||_F^2 \cdot ||x||_2^2$$

 $\bullet \quad ||I_n|| = \sqrt{n}$

Satz 3.13 (Zugeordnete Matrixnorm)

Zu einer vorgegebenen Vektornorm $\|.\|$ wird durch

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

eine submultiplikative, mit $\|.\|$ verträgliche Matrixnorm definiert, die der Vektornorm $\|.\|$ zugeordnete Matrixnorm. Es gilt $\|I_n\| = 1$.

Beweis: vgl. Huckle/Schneider, Anhang B.2, z. B.

$$||I_n|| = \sup_{x \neq 0} \frac{||I_n x||}{||x||} = 1.$$

Beispiel 3.14 (Zugeordnete Matrixnorm)

a) Zeilensummennorm

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

ist $||x||_{\infty}$ zugeordnet, denn

- $||Ax||_{\infty} = \max_{i=1,\dots,m} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \le \max_{i=1,\dots,m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| |x_j| \le ||A||_{\infty} \cdot ||x||_{\infty},$
- zu einem $i_0 \in \{1, \ldots, m\}$ mit $\sum_{j=1}^n |a_{i_0,j}| = \max_{i=1,\ldots,m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ wählt man $x \in \mathbb{R}^n$ so, dass $||x||_{\infty} = 1$ und $x_j = 1$, falls $a_{i_0,j} > 0$, $x_j = -1$, falls $a_{i_0,j} < 0$

$$\Rightarrow \|Ax\|_{\infty} \ge \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0,j}x_j| = \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0,j}| = \|A\|_{\infty}.$$

b) Spaltensummennorm

$$||A||_1 := \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$
 ist $||x||_1$ zugeordnet.

c) Spektralnorm

$$||A||_2 := \max_{i=1,\dots,n} \sqrt{\lambda_i(A^\top A)}$$

Für orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$, also $U^{\top}U = I_n$, ist $\lambda_i(U^{\top}U) = 1$ und $||U||_2 = 1$.

3.3 Kondition und Stabilität

Bemerkung 3.15 (Eingabefehler und Fehler im Ergebnis)

analytisch Eingabe $x \to \text{Algorithmus} / \text{Berechnungsvorschrift}$ $\to \text{Resultat } f(x)$

numerisch Fehler im Resultat entstehen durch

- Eingabefehler
- Fehler im Algorithmus

Numerische Eingabe $x \in F$ repräsentiert

Eingabemenge $E = \{ \tilde{x} \in \mathbb{R} : fl(\tilde{x}) = x \}$

Resultatmenge $R = f(E) := \{ f(\tilde{x}) : \tilde{x} \in E \}$



"Kondition"

Maß für das Verhältnis von R zu E

Ziel

Fehler in der Berechnungsvorschrift sollen Menge R nicht deutlich vergrößern

Fehler im Ergebnis y = f(x):

$$\delta_y := f(x + \delta_x) - f(x) = f'(x) \, \delta_x$$

Relativer Fehler:

$$\frac{\|\delta_y\|}{\|y\|} = \frac{\|f'(x)\,\delta_x\|}{\|y\|} \le \frac{\|x\|\,\|f'(x)\|}{\|y\|} \cdot \frac{\|\delta_x\|}{\|x\|}$$

Definition 3.16 (Konditionszahl)

Zu einem Problem $x \mapsto f(x)$ heißt

$$\operatorname{cond}_x := \frac{\|x\| \|f'(x)\|}{\|f(x)\|}$$

Konditionszahl. Das Problem ist gut konditioniert, wenn cond_x klein ist, und schlecht konditioniert für große Konditionszahlen cond_x .

Beispiel 3.17 (Kondition)

Exponentialfunktion $x \mapsto e^x$, $\operatorname{cond}_x = \left| \frac{x e^x}{e^x} \right| = |x|$, gut konditioniert für $|x| \lesssim 1$.

Logarithmus $x \mapsto \ln x$, $\operatorname{cond}_x = \left| \frac{x \cdot \frac{1}{x}}{\ln x} \right| = \frac{1}{|\ln x|}$, sehr schlecht konditioniert für $x \approx 1$.

39

Gute / schlechte Kondition



Polynomnullstellen häufig schlecht konditioniertes Problem

Beispiel:
$$\pi(t) = t^4 - 8t^3 + 24t^2 - 32t + 15.9999999999 = (t - 2)^4 - 10^{-8}$$

 $t_{1,2} = 2 \pm 0.01$, $t_{3,4} = 2 \pm 0.01i$

Relativer Fehler bei Darstellung von 15.999 999 99 durch 16.0: $\varepsilon_x = 6.25 \cdot 10^{-10}$, z. B. bei Maschinengenauigkeit $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-10}$ \Rightarrow $t_{1,2,3,4} = 2.0$

$$\operatorname{cond}_{t_{1,2}} = \frac{0.01/2.01}{6.25 \cdot 10^{-10}} \approx 8.0 \cdot 10^6$$

Bemerkung 3.18 (Berechnungsvorschrift)

Zum mathematischen Problem $x \mapsto f(x)$ sei die Abbildung $x \mapsto \tilde{f}(x)$ gegeben zur Berechnung von f(x) in Gleitpunktarithmetik (u. a. auch Reihenfolge der Rechenoperationen festgelegt) $\rightsquigarrow Berechnungsvorschrift$

Beispiel $f(x) = 1 - \sqrt{1 - x^2}$, für $|x| \ll 1$ gut konditioniert, $\operatorname{cond}_x \approx 2$.

Berechnungsvorschrift 1: $\tilde{f}(x) := 1 - \left(\sqrt{1 - (x^2)}\right)$

Berechnungsvorschrift 2: $\tilde{f}(x) := \frac{(x^2)}{\left(1 + \left(\sqrt{1 - (x^2)}\right)\right)}$

Definition 3.19 (Numerische Stabilität)

Zu einem gut konditionierten Problem $x \mapsto f(x)$ heißt eine Berechnungsvorschrift $x \mapsto \tilde{f}(x)$ numerisch stabil, wenn die relativen Eingabefehler durch die Berechnungsvorschrift nicht vergrößert werden, und numerisch instabil sonst.

40

Bemerkung 3.20 (Lineare Gleichungssysteme: Kondition und Stabilität)

a) Betrachte zu gegebener regulärer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und gegebenem $b \in \mathbb{R}^n$ die Lösung des linearen Gleichungssystems Ax = b als Abbildung $b \mapsto x := A^{-1}b$ mit gestörten Eingangsdaten b und exakten Matrizen $A, A^{-1} \Rightarrow$

$$A(x + \delta_x) = b + \delta_b, \quad Ax = b$$
$$\|\delta_x\| = \|A^{-1}\delta_b\| \le \|A^{-1}\| \|\delta_b\|$$
$$\|b\| = \|Ax\| \le \|A\| \|x\|$$

Ergebnis $\frac{\|\delta_x\|}{\|x\|} \le \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta_b\|}{\|b\|}$

- Empfindlichkeit der Lösung gegenüber Störungen in den Eingangsdaten wird beschrieben durch die Konditionszahl cond $(A) := ||A|| \cdot ||A^{-1}||$.
- \bullet Ergebnis lässt sich übertragen auf Empfindlichkeit gegenüber Störungen in A.
- Wegen $1 \le ||I_n|| = ||A \cdot A^{-1}|| \le ||A|| \cdot ||A^{-1}||$ gilt stets $\operatorname{cond}(A) \ge 1$.

Gut konditioniert: $\operatorname{cond}(A) \approx 10^3$

Schlecht konditioniert: $\operatorname{cond}(A) \gg 10^6$

Beispiel 1

$$A = \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{array} \right), \quad A^{-1} = \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1/\varepsilon \end{array} \right) \quad \text{mit} \quad 0 < \varepsilon \ll 1$$

 $\Rightarrow \operatorname{cond}_2(A) = 1 \cdot \frac{1}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} \to \infty$ für $\varepsilon \to 0$, Fehlerverstärkung um Faktor $1/\varepsilon$ möglich

Beispiel 2

Hilbert-Matrizen $H^{(n)} = (h_{ij}^{(n)})_{i,j} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $h_{ij}^{(n)} := 1/(i+j-1)$, $(i, j = 1, \dots, n)$.

Zu $b^{(n)} \in \mathbb{R}^n$, $b^{(n)} = (b_i^{(n)})_i$ mit $b_i^{(n)} := \sum_{i=1}^n \frac{1}{i+j-1}$ ist die Lösung $x^{(n)}$ des linearen

Gleichungssystems $H^{(n)}x^{(n)}=b^{(n)}$ gegeben durch $x^{(n)}=(1,1,\ldots,1)^{\top}$.

Fehler der mit Matlab ($\varepsilon = 1.1_{\rm E} - 16$) berechneten Lösung $\tilde{x}^{(n)}$:

	n	$\ \tilde{x}^{(n)} - x^{(n)}\ _2$	$\operatorname{cond}_2(H^{(n)})$
Ì	2	9.0e-16	1.9e+01
	4	4.6e-13	1.6e+04
	6	3.5e-10	1.5e+07
	8	1.3e-08	1.5e+10
	10	3.0e-04	1.6e+13
	12	1.6e+00	1.7e+16

- b) Für orthogonale Matrizen $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist $Q^{-1} = Q^{\top}$ und $\|Q\|_2 = \|Q^{\top}\|_2 = 1$
- \Rightarrow cond₂(Q) = 1. Operationen mit orthogonalen Matrizen lassen die Kondition einer

 $\text{Matrix unverändert:} \ \ A = QR \ \ \Rightarrow \ \ \operatorname{cond}_2(R) = \operatorname{cond}_2(A) \,.$

c) Realisierung des Gauß–Algorithmus in Gleitpunktarithmetik: Fehlerschranke hängt linear ab von $\max_{i,k}|l_{ik}|$.

Spaltenpivotisierung: $|l_{ik}| \leq 1 \iff$ kleine Fehlerschranke

Numerische Stabilität: numerische Lösung \tilde{x} erfüllt

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

 mit

$$\frac{\|\delta_A\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}} \leq 8n^3 \cdot \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|} \varepsilon.$$