

Wissenschaftliches Rechnen

Eine Einführung in das
Scientific Computing

Herausgegeben von
Jürgen Herzberger



Akademie Verlag

Herausgeber:

Prof. Dr. Jürgen Herzberger
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Mit 19 Abbildungen und 27 Tabellen

Lektorat: Dipl.-Math. Gesine Reiher

Die Deutsche Bibliothek – CIP-Einheitsaufnahme

Wissenschaftliches Rechnen : eine Einführung in das Scientific Computing ; [mit 27 Tabellen] / hrsg. von Jürgen Herzberger. –

Berlin : Akad. Verl., 1995

ISBN 3-05-501680-7 Pb.

ISBN 3-05-501694-7 Pp.

NE: Herzberger, Jürgen [Hrsg.]

Das vorliegende Werk wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. Die Wiedergabe von Warenbezeichnungen, Handelsnamen oder sonstigen Kennzeichen in diesem Buch berechtigt nicht zu der Annahme, daß diese von jedermann frei benutzt werden dürfen. Vielmehr kann es sich auch dann um eingetragene Warenzeichen oder sonstige gesetzlich geschützte Kennzeichen handeln, wenn sie nicht eigens als solche markiert sind.

© Akademie Verlag GmbH, Berlin 1995

Der Akademie Verlag ist ein Unternehmen der VCH-Verlagsgruppe.

Gedruckt auf chlorfrei gebleichtem Papier.

Das eingesetzte Papier entspricht der amerikanischen Norm ANSI Z.39.48 – 1984 bzw. der europäischen Norm ISO TC 46.

Druck: GAM Media GmbH, Berlin

Bindung: Dieter Mikolai, Berlin

Printed in the Federal Republic of Germany

Vorwort

Dieses Buch richtet sich an Studenten in Angewandter Mathematik, welche ihre Kenntnisse in Numerischer Mathematik vertiefen möchten, und gleichzeitig an Wissenschaftler, welche einen kurzen Einblick in teilweise neuere Disziplinen der Numerik gewinnen wollen. Damit kann es sowohl als Vorlage für Spezialveranstaltungen und Seminare dienen, als Vertiefungsliteratur für Diplomanden in Numerischer Mathematik und auch als Informationsquelle für Dozenten und Wissenschaftler. Die Stoffauswahl geschah so, daß es sich größtenteils um neuere Disziplinen handelt, die im letzten Jahrzehnt an Bedeutung innerhalb der computerorientierten Numerik gewonnen haben. Erfahrungsgemäß dauert es in der Regel etwa 15–20 Jahre, bis sich solche neueren Entwicklungen in den Standardlehrbüchern niederschlagen. Das vorliegende Buch soll diesen Mangel überbrücken helfen. Dies trifft z. B. zu für das Gebiet des Automatischen Differenzierens, des Symbolischen Rechnens, der asynchronen Iterationsverfahren, der linearen differentiell-algebraischen Gleichungen und der Gleitkommastandards. Daneben gibt es auch Gebiete, welche schon seit längerer Zeit aktuell sind, aber in der Standardliteratur zu kurz kommen. Hierzu gehört das Gebiet der Intervallmethoden und die Bestimmung der Konvergenzordnung von iterativen numerischen Prozessen. Alle die genannten Gebiete sind in Form von unabhängigen Kapiteln in diesem Band vertreten und jeweils von ausgewiesenen Wissenschaftlern auf diesen Gebieten verfaßt, was die Aktualität und die Kompetenz der Darstellung jeweils gewährleisten soll.

Der behandelte Stoff ist aus dem Gebiet der computerorientierten Numerik gewählt worden, aus jenem wichtigen Zweig der Numerik, welcher der Entwicklung von numerischen Software zugrunde liegt bzw. diese stark beeinflußt. Die einzelnen Gebiete sind mathematisch fundiert und nach den Regeln der mathematischen Logik aufgebaut (evtl. mit gewissen Einschränkungen bei den Gleitkommastandards) und somit streng wissenschaftliche Gebiete. Da sie auf das Rechnen auf dem Computer stark einwirken, kann man sie mit Recht als einen Teil des Wissenschaftlichen Rechnens bezeichnen, und das ist auch der Grund für die Wahl des Buchtitels. Das Buch soll sich abheben von Rezeptbüchern zum numerischen Programmieren, die meist sehr stark von Heuristik geprägt sind und auch deshalb oftmals wissenschaftliche Strenge weitgehend vermissen lassen.

Gemäß der Intention des Buches ist zu hoffen, daß es in der Gemeinde der Numeriker seinen Platz findet. Viele Gebiete blieben aus Platzgründen unberücksichtigt und die Stoffauswahl soll nicht als ein Setzen von Prioritäten verstanden werden. Richtschnur für die Festlegung der Teilgebiete war teilweise auch die Verfügbarkeit von ausgewiesenen Autoren, welche in der Lage waren und auch die Zeit dazu verwenden konnten, solche Beiträge zu verfassen. Es handelt sich hiermit meines Wissens um einen ersten Versuch, in der deutschsprachigen Fachliteratur eine solchen „second course“ von mehreren Autoren in Form eines geschlossenen Buches schreiben zu lassen. Deshalb verbinde ich meinen Dank mit dem Akademie Verlag in Berlin und der dortigen Lektorin Frau Gesine Reiher, daß sie spontan bereit waren, einen solchen

neuen Weg mit uns einzuschlagen und das Buch in ihr Programm aufzunehmen.

Abschließend möchte ich Herrn Priv.-Doz. Dr. Peter Kunkel sowie allen anderen Autoren für die nicht leichte Aufgabe des Verfassens von entsprechenden Beiträgen vielmals danken. Erstgenanntem bin ich besonders verbunden für die Hilfe bei dem Zusammenfügen der einzelnen Kapitel auf dem Computer in Form eines geschlossenen Buches. Ohne ihn hätte ich sonst dem Verlag nicht ein druckreifes Manuskript in Form von Disketten abliefern können.

Oldenburg, Mai 1995

J. Herzberger

Inhaltsverzeichnis

1	Standards zur Computerarithmetik	9
1.1	Warum Standards?	9
1.2	Darstellung reeller Zahlen, Gleitpunktsysteme	13
1.3	ANSI/IEEE-Standard 754 zur Gleitpunktarithmetik	16
1.4	Weitere Standards zur Gleitpunktarithmetik	34
1.5	Erweiterte Computerarithmetik	40
1.6	Einbindung in Programmiersprachen	44
	Literaturverzeichnis	46
2	Automatisches Differenzieren	53
2.1	Einleitung	53
2.2	Vorwärts-Methode	56
2.3	Rückwärts-Methode	65
2.4	Hesse-Matrix vorwärts	75
2.5	Besondere Wünsche	77
2.6	Hesse-Matrix rückwärts	83
2.7	Ein Vergleich	89
	Literaturverzeichnis	95
3	Isolierung reeller Nullstellen von Polynomen	105
3.1	Vielfachheiten	106
3.2	Schranken für polynomiale Nullstellen	107
3.3	Die Vorzeichenregel von Descartes	110
3.4	Transformationen von Polynomen	113
3.5	Der Satz von den zwei Kreisen	115
3.6	Die Methode der Vorzeichenwechsel	117
3.7	Verschiebung um 1	122
3.8	Analyse der Methode der Vorzeichenwechsel – Teil I	133
3.9	Eine untere Schranke für den Abstand polynomialer Nullstellen	135
3.10	Analyse der Methode der Vorzeichenwechsel – Teil II	142
3.11	Die Methode der Vorzeichenwechsel in der Praxis	146
3.12	Verfeinerung durch Bisektion	147
3.13	Nullstellenisolierung für mehrere Polynome	149
3.14	Eine Anwendung auf Wilkinsons Polynom	152
	Literaturverzeichnis	153

4	Einschließungsverfahren	155
4.1	Einleitung	155
4.2	Reelle Intervallrechnung und Eigenschaften	156
4.3	Wertebereichseinschließung	159
4.4	Einschließung der Lösungen linearer Intervallgleichungssysteme	164
4.5	Einschließung der Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme	178
4.6	Schlußbemerkungen	183
4.7	Danksagung	183
	Literaturverzeichnis	184
5	Parallele asynchrone Iterationen	187
5.1	Einleitung	187
5.2	Implementierung	190
5.3	Konvergenztheorie	197
5.4	Lineare Gleichungssysteme	199
5.5	Nichtlineare Gleichungssysteme	205
5.6	Waveform-Relaxation	214
5.7	Isotone Abbildungen	218
5.8	Einschließungen mit Intervallrechnung	221
	Literaturverzeichnis	227
6	Analysis und Numerik linearer differentiell-algebraischer Gleichungen	233
6.1	Problemstellung	233
6.2	Konstante Koeffizienten	236
6.3	Variable Koeffizienten	243
6.4	Numerische Verfahren	256
	Literaturverzeichnis	278
7	Berechnung der Konvergenzordnung von Folgen bei iterativen numerischen Prozessen	279
7.1	Einführung	279
7.2	Q -Ordnung und R -Ordnung	281
7.3	Berechnung der R -Ordnung	289
7.4	Matrixdarstellungen zur Berechnung der R -Ordnung	293
7.5	Schranken für die positive Wurzel bestimmter Polynome	298
7.6	Ein Anwendungsbeispiel zur Abschätzung der R -Ordnung von Iterationsverfahren	302
7.7	R -Ordnung und Effizienzindex von Iterationsverfahren	307
7.8	Beispiel zur Bestimmung einer optimalen Iterationsvorschrift	310
	Literaturverzeichnis	312
	Index	317
	Anschriften der Autoren	323

4 Einschließungsverfahren

Götz Alefeld und Günter Mayer

4.1 Einleitung

Als Einschließungsverfahren bezeichnen wir Methoden zur Einschließung einer (oder mehrerer) Lösung(en) einer Gleichung. Dabei kann es sich um die Aufgabe handeln, eine oder alle Nullstellen eines Polynoms oder allgemeiner einer reellen Funktion einzuschließen. Die analoge Problemstellung kann man für ein nichtlineares Gleichungssystem betrachten. Schließlich kann man sich, um nur ein weiteres Beispiel zu nennen, für die Aufgabe interessieren, die Lösung eines Anfangswertproblems für eine gewöhnliche Differentialgleichung über einem Intervall punktweise einzuschließen. Diese Einschließungen sind deshalb von großem praktischen Interesse, weil man bei der numerischen Berechnung von Lösungen gewöhnlich auf Näherungsverfahren angewiesen ist und dabei normalerweise außer qualitativen Aussagen keine näheren Angaben über die erreichte Genauigkeit gemacht werden können. Einschließungsverfahren liefern dagegen obere und untere Schranken für eine Lösung und damit automatisch Fehlerabschätzungen. Gelegentlich sind auch die Ausgangsdaten nicht genau bekannt. Man weiß nur, daß sie in gewissen vorgegebenen Intervallen liegen. Dann ist man an der Menge aller Lösungen interessiert, wenn die Eingangsdaten in den vorgegebenen Intervallen variieren.

In dieser Arbeit betrachten wir die geschilderten Aufgaben nur für "endlich dimensionale Probleme", d.h. für Gleichungssysteme. Einschließungsverfahren, etwa bei Differentialgleichungen, findet man in der Literatur [20], [27], [31], [32]. Die in dieser Arbeit betrachteten Einschließungsmethoden verwenden intervallarithmetische Hilfsmittel. Inzwischen gibt es eine große Anzahl solcher Methoden (siehe etwa [5], [10], [15], [23], [24], [25], [29], [30]). Da die Intention dieser Arbeit darin besteht, die Hauptprinzipien von Einschließungsmethoden zu erklären, beschränken wir uns auf einige wenige Verfahren. Verfahren, die auf anderen Ideen oder speziellen Voraussetzungen (etwa Inverse Isotonie, siehe z.B. [13]) beruhen, werden nicht betrachtet.

Die Arbeit ist folgendermaßen angelegt: Nach einer Einführung der wichtigsten Begriffe und Hilfsmittel der Intervallrechnung in Abschnitt 4.2 beschäftigen wir uns in Abschnitt 4.3 mit Methoden zur Einschließung des Wertebereichs von Funktionen einer reellen Variablen. Das Problem, den Wertebereich einer Funktion zu bestimmen, ordnet sich als Aufgabe zur Berechnung der Lösung einer Gleichung im oben beschriebenen Sinne ein. Daran anschließend behandeln wir in Abschnitt 4.4 die Aufgabe, die

Lösungsmenge eines linearen Gleichungssystems mit Intervalldaten einzuschließen. In Abschnitt 4.5 wird schließlich die Aufgabe betrachtet, die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems durch fortwährende Einschließung zu berechnen.

4.2 Reelle Intervallrechnung und Eigenschaften

In der Menge \mathbf{R} der reellen Zahlen betrachten wir abgeschlossene, beschränkte Intervalle

$$[a] := [\underline{a}, \bar{a}] = \{x \in \mathbf{R} \mid \underline{a} \leq x \leq \bar{a}\} .$$

Die Gesamtheit dieser Intervalle bezeichnen wir mit \mathbf{IR} . Reelle Zahlen a sind spezielle Elemente von \mathbf{IR} mit $[a] = [a, a]$. Wir schreiben dafür auch einfach a .

Bezeichnet “ $*$ ” eine der vier Verknüpfungen $+$, $-$, \times , $/$ für reelle Zahlen, so definiert man für zwei Elemente $[a]$ und $[b]$ in \mathbf{IR} die entsprechenden Operationen durch

$$[a] * [b] = \{a * b \mid a \in [a], b \in [b]\} .$$

Bei der Division ist dabei $0 \notin [b]$ vorauszusetzen. Da die Funktionen $f(a, b) = a * b$, $a \in [a]$, $b \in [b]$, $*$ $\in \{+, -, \times, /\}$ stetig sind, ist $[a] * [b]$ wieder ein Element von \mathbf{IR} . Für das praktische Rechnen ist von Bedeutung, wie $[a] * [b]$ formelmäßig dargestellt wird. Eine mehr oder weniger elementare Diskussion ergibt die folgenden Rechenregeln:

$$\begin{aligned} [a] + [b] &= [\underline{a} + \underline{b}, \bar{a} + \bar{b}], \\ [a] - [b] &= [\underline{a} - \bar{b}, \bar{a} - \underline{b}], \\ [a] \times [b] &= [\min\{\underline{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}\}, \max\{\underline{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}\}], \\ [a]/[b] &= [\underline{a}, \bar{a}] \times \left[\frac{1}{\bar{b}}, \frac{1}{\underline{b}}\right] . \end{aligned}$$

Üblicherweise wird das “ \times ”-Zeichen durch einen Punkt ersetzt und dieser gewöhnlich weggelassen.

Die Multiplikation zweier Intervalle kann in allen Fällen, in denen nicht gleichzeitig $0 \in [a]$ und $0 \in [b]$ ist, auf zwei Multiplikationen reeller Zahlen zurückgeführt werden. Andernfalls sind in der oben angegebenen Formel tatsächlich vier Multiplikationen reeller Zahlen durchzuführen. Kürzlich hat Heindl [16] gezeigt, daß diese Anzahl auf drei Multiplikationen reduziert werden kann.

Neben diesen vier elementaren Verknüpfungen definieren wir für unäre Operationen in \mathbf{R} , d.h. für Funktionen $r(c)$, die in \mathbf{R} (oder auf einer Teilmenge von \mathbf{R}) definiert sind,

$$r([a]) = \{r(a) \mid a \in [a]\} ,$$

wobei $[a]$ im Definitionsbereich von r liegt. Wir denken hier in erster Linie daran, daß r eine der Standardfunktionen wie sqr , sqrt , sin , cos , exp , ln , tan , ... bezeichnet.

Mit Hilfe der vier elementaren Verknüpfungen für Intervalle und der vorangehenden Definition von $r([a])$ können wir nun für eine reelle Funktion $f(a, b, \dots, u, v)$ die sogenannte *intervallararithmetische Auswertung* von f durch $f([a], [b], \dots, [u], [v])$ erklären.

Intervallararithmetische Auswertungen besitzen zwei für die Anwendungen grundlegende Eigenschaften:

1. Ist $[a] \subseteq [\tilde{a}]$, $[b] \subseteq [\tilde{b}]$, \dots , $[u] \subseteq [\tilde{u}]$, $[v] \subseteq [\tilde{v}]$, so gilt

$$f([a], [b], \dots, [u], [v]) \subseteq f([\tilde{a}], [\tilde{b}], \dots, [\tilde{u}], [\tilde{v}]).$$

Diese Beziehung wird als *Teilmengeneigenschaft* oder *Inklusionsmonotonie* bezeichnet.

2. Ein Spezialfall der Teilmengeneigenschaft ist die sogenannte *Einschließungseigenschaft*:

Ist $a \in [a]$, $b \in [b]$, \dots , $u \in [u]$, $v \in [v]$, so gilt

$$f(a, b, \dots, u, v) \in f([a], [b], \dots, [u], [v]).$$

(Hierbei wird vorausgesetzt, daß $f([a], [b], \dots, [u], [v])$ überhaupt definiert ist, was nicht notwendig der Fall sein muß.)

Beweise von 1. und 2. ergeben sich unmittelbar aus den Definitionen der vier arithmetischen Verknüpfungen und von $r([a])$. Mit der Einschließungseigenschaft wird die in der Einleitung angesprochene Aufgabe, den Wertebereich $W(f; [a], [b], \dots, [u], [v])$ einer reellen Funktion f einzuschließen, im Prinzip gelöst. Die Einschließungseigenschaft läßt sich ja schreiben als

$$\begin{aligned} W(f; [a], [b], \dots, [u], [v]) &= \{f(a, b, \dots, u, v) \mid a \in [a], b \in [b], \dots, u \in [u], v \in [v]\} \\ &\subseteq f([a], [b], \dots, [u], [v]). \end{aligned}$$

Für die Intervallverknüpfungen gelten im Vergleich zu den Operationen für reelle Zahlen eingeschränkte Regeln. Die wichtigsten Einschränkungen sind die folgenden:

1. Für $[x]$, $[y]$, $[z] \in \mathbf{IR}$ gilt

$$[x]([y] + [z]) \subseteq [x][y] + [x][z].$$

Diese Eigenschaft wird als *Subdistributivität* bezeichnet.

Jedoch gilt stets

$$x([y] + [z]) = x[y] + x[z] \text{ für } x \in \mathbf{R}.$$

2. Für $[x] \in \mathbf{IR}$ gilt $[x] - [x] \neq 0$, jedoch gilt stets $0 \in [x] - [x]$.
3. Für $[x] \in \mathbf{IR}$, $0 \neq [x]$, gilt $[x]/[x] \neq 1$, jedoch gilt stets $1 \in [x]/[x]$.

Diese Eigenschaften bewirken unter anderem, daß die Güte der Einschließung des Wertebereichs einer Funktion durch die intervallmäßige Auswertung davon abhängt, wie der verwendete Funktionsausdruck intervallmäßig ausgewertet wird. Bekannte Ergebnisse über diese Abhängigkeit werden wir im nächsten Abschnitt eingehender diskutieren. Hier betrachten wir zunächst ein einfaches Beispiel.

Beispiel 1 Es sei $f(x) = (x - 1)(x - 1)$, $x \in [0, 1]$.

Es ist dann $W(f; [0, 1]) = [0, 1]$.

Für die intervallarithmetische Auswertung erhält man

$$f([0, 1]) = ([0, 1] - 1)([0, 1] - 1) = [-1, 0][-1, 0] = [0, 1].$$

Es gilt also sogar $f([0, 1]) = W(f; [0, 1])$.

Schreibt man $f(x)$ dagegen in der Form $f(x) = x^2 - 2x + 1$, so erhält man für die intervallarithmetische Auswertung von $x^2 - 2x + 1$ das Intervall

$$[0, 1][0, 1] - 2[0, 1] + 1 = [0, 1] + [-2, 0] + 1 = [-1, 2],$$

also eine erhebliche Überschätzung des Wertebereichs $W(f; [0, 1])$. □

Für ein reelles Intervall $[a] = [\underline{a}, \bar{a}]$ definiert man den *Durchmesser* $w([a])$ als

$$w([a]) = \bar{a} - \underline{a}$$

und den *Betrag* $||[a]||$ als

$$|[a]| = \max\{|a| \mid a \in [a]\}.$$

Es gilt $|[a]| = \max\{|\underline{a}|, |\bar{a}|\}$.

Nachfolgend findet man einige Rechenregeln für Durchmesser und Betrag:

$$\begin{aligned} w(x) &= 0 \text{ für } x \in \mathbf{R}, \\ w([x] \pm [y]) &= w([x]) + w([y]), \\ w(x[y]) &= |x| w([y]), \\ w([x][y]) &\leq w([x]) |y| + |x| w([y]), \\ w([x][y]) &\geq \max\{|[x]| w([y]), w([x]) |[y]|\}, \\ |[x] \pm [y]| &\leq |[x]| + |[y]|, \\ |[x][y]| &= |[x]| |[y]|. \end{aligned}$$

Der *Abstand* zweier Intervalle $[x]$ und $[y]$ wird definiert als

$$q([x], [y]) = \max\{|\underline{x} - \underline{y}|, |\bar{x} - \bar{y}|\}.$$

Es gelten

$$\begin{aligned} q([x] + [y], [x] + [z]) &= q([y], [z]), \\ q(x[y], x[z]) &= |x| q([y], [z]), \quad x \in \mathbf{R}, \\ q([x][y], [x][z]) &\leq |[x]| q([y], [z]). \end{aligned}$$

Eine Zusammenstellung der Definitionen, Eigenschaften und Beweise findet man in [5]. Siehe dazu auch [17], [21] und [25].

4.3 Wertebereichseinschließung

In diesem Abschnitt betrachten wir ausschließlich Funktionen einer reellen Variablen. Es wird vorausgesetzt, daß die intervallmäßige Auswertung $f([x])$ für jedes Intervall $[x]$ aus dem Definitionsbereich von f existiert. Wie in Abschnitt 4.2 gezeigt, gilt dann für den Wertebereich $W(f; [x])$ von f über $[x]$ die Einschließung $W(f; [x]) \subseteq f([x])$. Die Güte der Einschließung hängt von dem verwendeten arithmetischen Ausdruck für f ab. Moore [24] hat gezeigt, daß unter naheliegenden Voraussetzungen für f die folgende Abschätzung für den Abstand zwischen $W(f; [x])$ und $f([x])$ gilt:

$$q(W(f; [x]), f([x])) \leq \gamma w([x]), [x] \subseteq [x]^0, \gamma \geq 0.$$

Der Abstand zwischen $W(f; [x])$ und $f([x])$ geht also linear mit dem Durchmesser $w([x])$ gegen Null.

Wir erläutern diesen Sachverhalt durch ein einfaches Beispiel.

Beispiel 2 Es sei

$$f(x) = x - xx, x \in [x]^0 = [0, 1].$$

Für $[x] = [\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r]$, $0 \leq r \leq \frac{1}{2}$, gilt $[x] \subseteq [x]^0$.

Es ist

$$W(f; [x]) = \left[\frac{1}{4} - r^2, \frac{1}{4} \right],$$

und für die intervallarithmetische Auswertung erhält man

$$f([x]) = \left[\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r \right] - \left[\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r \right] \left[\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r \right] = \left[\frac{1}{4} - 2r - r^2, \frac{1}{4} + 2r - r^2 \right].$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} q(W(f; [x]), f([x])) &= \max \left\{ \left| \frac{1}{4} - 2r - r^2 - \frac{1}{4} + r^2 \right|, \left| \frac{1}{4} + 2r - r^2 - \frac{1}{4} \right| \right\} \\ &= \max \{ 2r, 2r - r^2 \} = 2r = \gamma w([x]), \gamma = 1. \end{aligned}$$

□

Beispiel 3 Schreibt man den arithmetischen Ausdruck für die Funktion $f(x)$ aus dem vorangehenden Beispiel um als

$$f(x) = \frac{1}{4} - \left(x - \frac{1}{2} \right) \left(x - \frac{1}{2} \right), x \in [0, 1],$$

so erhält man für die intervallmäßige Auswertung mit dem Intervall $[x] = [\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r]$, $0 \leq r \leq \frac{1}{2}$, das Intervall

$$\begin{aligned} f([x]) &= \frac{1}{4} - \left(\left[\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r \right] - \frac{1}{2} \right) \left(\left[\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2} + r \right] - \frac{1}{2} \right) \\ &= \left[\frac{1}{4} - r^2, \frac{1}{4} + r^2 \right], \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} q(W(f; [x]), f([x])) &= \max \left\{ \left| \frac{1}{4} - r^2 - \left(\frac{1}{4} - r^2 \right) \right|, \left| \frac{1}{4} + r^2 - \frac{1}{4} \right| \right\} \\ &= r^2 = \frac{1}{4} (w([x]))^2, \end{aligned}$$

d.h., daß der Abstand quadratisch mit dem Durchmesser $w([x])$ gegen Null geht. □

Beispiel 3 ist ein Spezialfall des folgenden allgemeinen Sachverhaltes.

Satz 1 (Zentrierte Form). Die (rationale) Funktion $f : D \rightarrow \mathbf{R}$ sei in der Form

$$f(x) = f(z) + (x - z) \cdot h(x)$$

mit einem $z \in [x] \subseteq D$ dargestellt. Definieren wir

$$f([x]) := f(z) + ([x] - z) \cdot h([x]),$$

so gilt (unter natürlichen Voraussetzungen an die reelle Funktion h):

- a) $W(f; [x]) \subseteq f([x])$.
- b) $q(W(f; [x]); f([x])) \leq \gamma (w([x]))^2$.

□

Die angegebene Darstellung von f heißt zentrierte Form von f , der Ausdruck für $f([x])$ heißt intervallarithmetische Auswertung der zentrierten Form von f . Die Aussage b) aus Satz 1 besagt, daß die intervallmäßige Auswertung der zentrierten Form "quadratische Approximationseigenschaft" des Wertebereichs besitzt. Die zentrierte Form wurde von Moore [24] eingeführt. Daß b) aus Satz 1 gilt, wurde von Hansen [14] bewiesen.

Wie findet man die zentrierte Form einer Funktion ?

Ist f ein Polynom,

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n,$$

so erhält man (z.B. mit dem vollständigen Horner-Schema)

$$\begin{aligned} f(x) &= f(z) + \frac{f'(z)}{1!}(x-z) + \dots + \frac{f^{(n)}(z)}{n!}(x-z)^n \\ &= f(z) + (x-z) h(x) \end{aligned}$$

mit

$$h(x) = f'(z) + \frac{x-z}{2!} f''(z) + \dots + (x-z)^{n-1} \frac{f^{(n)}(z)}{n!}.$$

Ist f eine allgemeine rationale Funktion, so kann man mit zwei Polynomen $r(x)$ und $s(x)$ für z aus dem Definitionsbereich von f schreiben

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{r(x)}{s(x)} = f(z) + \frac{r(x) - f(z) s(x)}{s(x)} \\ &= f(z) + (x-z) \frac{r(x) - f(z) s(x)}{(x-z) s(x)} \\ &= f(z) + (x-z) h(x) \end{aligned}$$

mit

$$h(x) = \frac{r(x) - f(z) s(x)}{(x-z) s(x)}.$$

Wegen $r(z) - f(z) s(z) = 0$ tritt der Linearfaktor $x - z$ sowohl im Nenner als auch im Zähler auf und kann daher wegen $s(z) \neq 0$ herausgekürzt werden.

Beispiel 4 Es sei

$$f(x) = \frac{r(x)}{s(x)} = \frac{x - x^2}{x - 3}, \quad x \neq 3.$$

Für $z = \frac{1}{2}$ gilt $f(z) = -\frac{1}{10}$ und daher

$$\begin{aligned} f(x) &= -\frac{1}{10} + \left(x - \frac{1}{2}\right) \frac{r(x) - \left(-\frac{1}{10}\right) s(x)}{\left(x - \frac{1}{2}\right) s(x)} \\ &= -\frac{1}{10} + \left(x - \frac{1}{2}\right) \frac{\frac{1}{10} - \left(x - \frac{1}{2}\right)}{-\frac{5}{2} + \left(x - \frac{1}{2}\right)}. \end{aligned}$$

□

Die Frage, ob für eine gegebene (rationale) Funktion f eine Darstellung existiert, so daß

$$q(W(f; [x]), f([x])) \leq \gamma (w([x]))^m$$

mit $m > 2$ gilt, ist offen. Unter speziellen Voraussetzungen für f gibt es solche Darstellungen. Siehe dazu [3], Theorem 2.

Cornelius und Lohner [12] haben mit der sogenannten Restgliedform einer Funktion eine Möglichkeit aufgezeigt, wie man systematisch den Wertebereich mit höherer Genauigkeit approximieren kann.

Satz 2 (Restgliedform). Die Funktion $f : D \subseteq \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ besitze eine Darstellung der Form

$$f(x) = g(x) + s(x), \quad x \in D.$$

Es gelte $W(s; [x]) \subseteq s([x])$, $[x] \subseteq D$, mit $s([x]) \in \mathbf{IR}$.

Setzt man

$$f([x]) := W(g; [x]) + s([x]),$$

so gilt

$$a) \quad W(f; [x]) \subseteq f([x]).$$

$$b) \quad q(W(f; [x]), f([x])) \leq w(s([x])) \leq 2|s([x])|.$$

□

Wie findet man eine Restgliedform ?

Wir setzen voraus, daß f Ableitungen genügend hoher Ordnung besitzt. Die Punkte $x_0, x_1, \dots, x_n \in [x]$ seien paarweise verschieden. Es sei $p_\sigma(x)$ das eindeutig bestimmte Polynom vom Grad $\sigma \geq 0$, welches das Hermitesche Interpolationsproblem löst:

$$p_\sigma^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i), \quad j = 0(1)m_i - 1, \quad m_i \in \mathbf{N} \\ i = 0(1)n, \quad n \geq 0$$

mit

$$\sigma + 1 = \sum_{i=0}^n m_i.$$

Dann gilt bekanntlich

$$f(x) = p_\sigma(x) + \frac{f^{(\sigma+1)}(\xi(x))}{(\sigma+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)^{m_i} \\ = g(x) + s(x), \quad x \in [x], \quad \xi(x) \in [x],$$

wobei wir $g(x) := p_\sigma(x)$ gesetzt haben und $s(x)$ das Restglied bezeichnet.

Besitzt nun die Ableitung $f^{(\sigma+1)}$ für $[x]$ eine intervallmäßige Auswertung, so gilt wegen $\xi(x) \in [x]$

$$s(x) \in \frac{f^{(\sigma+1)}([x])}{(\sigma+1)!} \prod_{i=0}^n ([x] - x_i)^{m_i} =: s([x]).$$

Damit und unter Verwendung von b) aus Satz 2 haben Lohner und Cornelius in [12] gezeigt, daß

$$q(W(f; [x]), f([x])) \leq \gamma (w([x]))^{\sigma+1}$$

gilt.

Für die praktische Bedeutung dieses Resultates muß man allerdings berücksichtigen, daß nur kleine Werte von σ in Frage kommen, da man ja in der Definition von $f([x])$ den exakten Wertebereich von g über $[x]$ benötigt.

Beispiel 5 Für $n = 0$, $m_0 = 3$ ist $\sigma = 2$. Wir haben also zu erfüllen:

$$p_2^{(j)}(x_0) = f^{(j)}(x_0), \quad j = 0(1)2, \quad x_0 \in [x].$$

Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(\xi(x))(x - x_0)^3 \\ &= g(x) + s(x) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} g(x) &= f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 \\ s(x) &= \frac{1}{3!}f'''(\xi(x))(x - x_0)^3. \end{aligned}$$

Der Wertebereich $W(g; [x])$ ist einfach zu berechnen, da es sich bei g um ein quadratisches Polynom handelt. Für

$$f([x]) := W(g; [x]) + \frac{1}{3!}f'''([x])([x] - x_0)^3$$

gilt dann aufgrund des vorangehenden Satzes

$$g(W(f; [x]), f([x])) \leq \gamma (w([x]))^3, \quad \gamma \geq 0.$$

□

Abschließend bemerken wir, daß die quadratische Approximationseigenschaft bei der zentrierten Form oder die höhere Approximationseigenschaft bei der Restgliedform nur zum Tragen kommt, wenn $w([x])$ hinreichend klein ist. Für größere $w([x])$ erhält man gewöhnlich bessere Einschließungen des Wertebereichs, wenn man f direkt intervallmäßig auswertet.

Kann man die Steigung

$$\delta f(x, x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0},$$

bei festem $x_0 \in [x]$ und beliebigem $x \in [x]$ in ein Intervall $\delta f([x], x_0) \in \mathbf{IR}$ einschließen, so gilt

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + \delta f(x, x_0)(x - x_0) \\ &\in f(x_0) + \delta f([x], x_0)([x] - x_0) =: f([x]). \end{aligned}$$

Das so definierte $f([x])$ liefert also wieder eine Einschließung des Wertebereichs.

Ist f differenzierbar, so gilt aufgrund des Mittelwertsatzes

$$\delta f(x, x_0) = f'(\xi)$$

und damit

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(\xi)(x - x_0) \\ &\in f(x_0) + f'([x])([x] - x_0) =: f([x]), \end{aligned}$$

vorausgesetzt, daß f' intervallaritmetisch auswertbar ist. Das so definierte $f([x])$ heißt *Mittelwertform*. Sie besitzt die quadratische Approximationseigenschaft des Wertebereiches. Siehe dazu [5]. Im allgemeinen liefert die Verwendung der Einschließung der Steigung eine bessere Einschließung des Wertebereichs als die Verwendung der intervallaritmetischen Auswertung der Ableitung. Die Einschließung von Steigungen wurde erstmals in [1] betrachtet. Siehe dazu auch [18] und [33].

Ohne auf Einzelheiten einzugehen, erwähnen wir, daß für Funktionen mehrerer Veränderlicher die in diesem Abschnitt angegebenen Aussagen sinngemäß gelten.

4.4 Einschließung der Lösungen linearer Intervallgleichungssysteme

In diesem Abschnitt betrachten wir die Aufgabe, die Lösungen eines linearen Gleichungssystems

$$Ax = b,$$

für welches die Elemente von A und die Komponenten des Vektors b in vorgegebenen Intervallen liegen, einzuschließen. Bevor wir diese Aufgabe präzisieren, führen wir die benötigten Bezeichnungen und Begriffe ein.

Eine *Intervallmatrix* $[A]$ ist eine Matrix, deren Elemente Intervalle $[a_{ij}] \in \mathbf{IR}$ sind. Wir schreiben dafür $[A] = ([a_{ij}])$. Entsprechend ist ein *Intervallvektor* $[a] = ([a_i])$ definiert. Verknüpfungen sind wie für reelle Matrizen und/oder Vektoren definiert:

$$\begin{aligned} [A] \pm [B] &= ([a_{ij}] \pm [b_{ij}]), \\ [A][B] &= \left(\sum_{j=1}^n [a_{ij}][b_{jk}] \right), \\ [A][x] &= \left(\sum_{j=1}^n [a_{ij}][x_j] \right). \end{aligned}$$

Diese Verknüpfungen genügen auch der Teilmengeneigenschaft. So gilt also z.B.:

$$[A] \subseteq [\tilde{A}], [B] \subseteq [\tilde{B}] \Rightarrow [A][B] \subseteq [\tilde{A}][\tilde{B}].$$

Wie für Intervalle gilt i.a. nicht das Distributivgesetz, sondern die als *Subdistributivität* bezeichnete Eigenschaft

$$[A]([B] + [C]) \subseteq [A][B] + [A][C].$$

Ist A eine reelle Matrix (wir sprechen dann von einer sogenannten Punktmatrix) – diese kann als spezielle Intervallmatrix aufgefaßt werden –, so gilt stets

$$A([B] + [C]) = A [B] + A [C].$$

Für Intervallmatrizen (und/oder Intervallvektoren) gilt i.a. nicht das Assoziativgesetz. Dies zeigt man durch ein Gegenbeispiel:

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{cc} [-1, 1] & 1 \\ -1 & [0, 1] \end{array} \right) \left\{ \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{array} \right) \right\} = \left(\begin{array}{cc} 1 & [-2, 0] \\ [0, 1] & [0, 1] \end{array} \right), \\ & \left\{ \left(\begin{array}{cc} [-1, 1] & 1 \\ -1 & [0, 1] \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{array} \right) \right\} \left(\begin{array}{cc} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} [-1, 3] & [-2, 0] \\ [0, 1] & [0, 1] \end{array} \right). \end{aligned}$$

Es gilt jedoch stets

$$\begin{aligned} & [A](BC) \subseteq ([A]B) C, \\ & (A[B])[C] \subseteq A([B][C]) \text{ für } [C] = -[C], \\ & [A]([B]C) \subseteq ([A][B]) C, \\ & A([B] C) = (A[B]) C, \\ & [A]([B][C]) = ([A][B])[C] \text{ für } [B] = -[B] \text{ und } [C] = -[C], \\ & [A]([B]e^i) = ([A][B])e^i, \text{ falls } e^i \text{ den } i\text{-ten Einheitsvektor bezeichnet.} \end{aligned}$$

Diese Aufzählung ist nicht vollständig.

Wir beweisen die letzte Beziehung, die anderen sind in [5] bewiesen worden.

Dazu bezeichnen wir die Spalten von $[B]$ mit $[b]^i$, $i = 1, \dots, n$. Dann gilt

$$[B]e^i = ([b]^1, [b]^2, \dots, [b]^n)e^i = [b]^i$$

und damit

$$[A]([B]e^i) = [A][b]^i.$$

Andererseits haben wir

$$([A][B])e^i = ([A][b]^1, \dots, [A][b]^n)e^i = [A][b]^i.$$

Der *Durchschnitt* zweier Intervallmatrizen bzw. Intervallvektoren ist über die Elemente bzw. Komponenten definiert:

$$\begin{aligned} [A] \cap [B] &= ([a_{ij}] \cap [b_{ij}]), \\ [a] \cap [b] &= ([a_i] \cap [b_i]). \end{aligned}$$

Durchmesser, Betrag und *Abstand* bei Intervallmatrizen und Intervallvektoren sind ebenfalls über die Elemente bzw. Komponenten definiert:

$$\begin{aligned}w([A]) &= (w([a_{ij}])), \\ |[A]| &= (|[a_{ij}]|), \\ q([A], [B]) &= (q([a_{ij}], [b_{ij}])).\end{aligned}$$

Durchmesser, Betrag und Abstand von Intervallmatrizen sind also reelle Matrizen. Die entsprechenden Begriffe für Intervallvektoren sind reelle Vektoren. Ungleichungen zwischen reellen Matrizen bzw. reellen Vektoren sind elementweise bzw. komponentenweise zu verstehen. Für zwei reelle Vektoren $x = (x_i)$ und $y = (y_i)$ gilt also

$$x \leq y \Leftrightarrow x_i \leq y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Wir kommen nun zu unserem Ausgangsproblem zurück:

Gegeben sind eine Intervallmatrix $[A]$ und ein Intervallvektor $[b]$. Wir setzen voraus, daß alle Punktmatrizen $A \in [A]$ nichtsingulär sind. Eine Intervallmatrix $[A]$ mit dieser Eigenschaft bezeichnen wir als *regulär*. Die Menge

$$S := \{x \in \mathbf{R}^n \mid Ax = b, A \in [A], b \in [b]\}$$

bezeichnen wir dann als *Lösungsmenge* des linearen Intervallgleichungssystems.

Als *lineares Intervallgleichungssystem* bezeichnen wir dabei die Gleichung $[A][x] = [b]$. Wir sind aber nicht an der Bestimmung eines Intervallvektors $[x]$ interessiert, der diesem System genügt, sondern an einem Intervallvektor, der die Lösungsmenge S einschließt. Ein Intervallvektor $[x]$, der der Gleichung $[A][x] = [b]$ genügt, schließt i.a. S nicht ein. Dies zeigt das einfache

Beispiel 6 Gegeben ist

$$[A][x] = [b]$$

mit $[A] = [1, 2]$, $[b] = [1, 6]$.

Es ist

$$S = \{x \in \mathbf{R} \mid ax = b, a \in [a], b \in [b]\} = [\frac{1}{2}, 6].$$

Andererseits erfüllt $[x] = [1, 3]$ die Gleichung $[A][x] = [b]$. Es ist jedoch $[x]$ eine echte Teilmenge von S . □

Die Lösbarkeit der Gleichung $[A][x] = [b]$ in dem Sinne, daß es ein $[x]$ gibt, welches dieser Gleichung genügt, wurde für $n = 1$ in [28] untersucht. Anwendungen dieser Problemstellung sind nicht bekannt.

Der nächste Satz gibt drei äquivalente Aussagen dafür an, daß ein reeller Vektor x zur Lösungsmenge S eines Intervallgleichungssystems gehört.

Satz 3 Es sei $m([A])$ die reelle Matrix, die man erhält, indem man elementweise den Mittelpunkt von $[A]$ bildet. Entsprechend sei $m([b])$ definiert. Dann sind die drei folgenden Aussagen äquivalent:

- a) $x \in S$.
- b) $|m([A])x - m([b])| \leq \frac{1}{2}w([A])|x| + \frac{1}{2}w([b])$.
- c) $[A]x \cap [b] \neq \emptyset$.

□

Die Äquivalenz a) \Leftrightarrow b) ist als Satz von Oettli-Prager bekannt. Siehe dazu [26]. Die Äquivalenz b) \Leftrightarrow c) wurde von Beck in [11] bewiesen.

Zur genaueren Charakterisierung von S zerlegen wir den \mathbf{R}^n in seine abgeschlossenen Orthanten O_k , $k = 1, 2, \dots, 2^n$. Diese sind eindeutig festgelegt durch die Vorzeichen $s_{k_j} \in \{-1, 1\}$, $j = 1, \dots, n$ der Komponenten seiner inneren Punkte. Falls daher O einen festen Orthanten bezeichnet, der durch die Vorzeichen s_1, \dots, s_n festgelegt ist, so gilt für $x = (x_i) \in O$

$$\begin{aligned} x_j &\geq 0 \text{ falls } s_j = 1, \\ x_j &\leq 0 \text{ falls } s_j = -1. \end{aligned}$$

Für die gegebene Intervallmatrix $[A] = ([a_{ij}])$ mit $[a_{ij}] = [\underline{a}_{ij}, \bar{a}_{ij}]$, setzen wir nun

$$c_{ij} := \begin{cases} \underline{a}_{ij} & \text{falls } s_j = 1 \\ \bar{a}_{ij} & \text{falls } s_j = -1, \end{cases}$$

und

$$d_{ij} := \begin{cases} \bar{a}_{ij} & \text{falls } s_j = 1 \\ \underline{a}_{ij} & \text{falls } s_j = -1. \end{cases}$$

Mit dem gegebenen Intervallvektor $[b] = ([b_i])$, $[b_i] = [\underline{b}_i, \bar{b}_i]$, definieren wir dann die Halbräume \underline{H}_i und \bar{H}_i durch

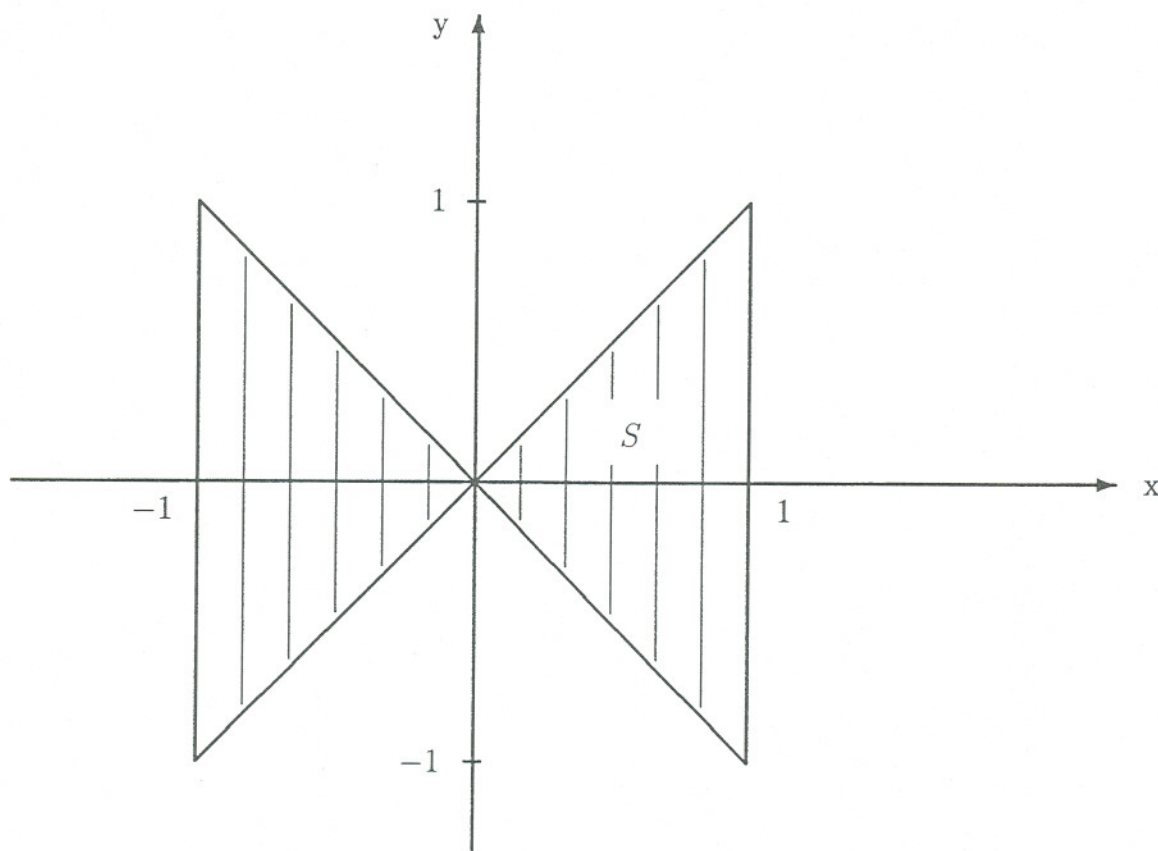
$$\left. \begin{aligned} \underline{H}_i &:= \{x \in \mathbf{R}^n \mid \sum_{j=1}^n c_{ij} x_j \leq \bar{b}_i\} \\ \bar{H}_i &:= \{x \in \mathbf{R}^n \mid \sum_{j=1}^n d_{ij} x_j \geq \underline{b}_i\} \end{aligned} \right\} i = 1, 2, \dots, n.$$

Man beachte, daß die \underline{H}_i und \bar{H}_i von dem (festgewählten) Orthanten abhängen.

Satz 4 Es sei $[A]$ eine reguläre Intervallmatrix und O ein festgewählter Orthant des \mathbf{R}^n . Dann gilt

$$S \cap O = \bigcap_{i=1}^n (\underline{H}_i \cap \bar{H}_i) \cap O.$$

Falls die Menge $S \cap O$ nichtleer ist, so ist sie konvex, kompakt, zusammenhängend und ein Polytop.

Abbildung 4.1 Die Lösungsmenge S von Beispiel 7

S ist kompakt, zusammenhängend, aber i. a. nicht konvex.
 S ist die Vereinigung von endlich vielen konvexen Polytopen.

□

Einen Beweis dieses Satzes findet man in [7]. Wir betrachten nun ein Beispiel, welches insbesondere zeigt, daß S nicht konvex sein muß.

Beispiel 7 Es sei

$$[A] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ [-1, 1] & 1 \end{pmatrix}, [b] = \begin{pmatrix} [-1, 1] \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dann ist

$$S = \{(x, y) \mid |y| \leq 1, |x| \leq 1\}.$$

S ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

□

Man kann zeigen, daß man die Lösungsmenge S eines Intervallgleichungssystems beim Vorliegen einer regulären Intervallmatrix $[A]$ mit Hilfe der Formeln für den Gaußschen

$$[D]^k := \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \frac{1}{[a_{kk}]^n} & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad 1 \leq k \leq n$$

und

$$[T]^k := \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & -[a_{k,k+1}]^n & \cdots & -[a_{kn}]^n \\ & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad 1 \leq k \leq n-1,$$

so läßt sich der mit dem Gaußschen Algorithmus berechnete Intervallvektor $[x]$ schreiben als

$$[x] = [D]^1([T]^1([D]^2([T]^2(\dots([D]^{n-1}([T]^{n-1}([D]^n[\tilde{b}])\dots))),$$

wobei

$$[\tilde{b}] = [C]^{n-1}([C]^{n-2}(\dots([C]^2([C]^1[b])\dots)).$$

Diese Darstellung wurde von H. Schwandt [34] angegeben. Wir bezeichnen den so berechneten Vektor $[x]$ gelegentlich auch als $\text{IGA}([A], [b])$ ("Intervallmäßiger Gauss'scher Algorithmus").

Mit Hilfe der Intervallmatrizen $[C]^k$, $[D]^k$ und $[T]^k$ definieren wir eine *Intervallmatrix* $\text{IGA}([A])$ durch

$$\text{IGA}([A]) = [D]^1([T]^1(\dots([D]^{n-1}([T]^{n-1}([D]^n([C]^{n-1}(\dots([C]^2[C]^1)\dots))).$$

Man beachte, daß in der Darstellung von $\text{IGA}([A], [b])$ bzw. von $\text{IGA}([A])$ die runden Klammern i.a. nicht weggelassen oder vertauscht werden können, da die Multiplikation von Intervallmatrizen nicht assoziativ ist.

Wir geben einige Eigenschaften von $\text{IGA}([A], [b])$ und $\text{IGA}([A])$ an:

- 1) $[A] \subseteq [B]$, $[b] \subseteq [c] \Rightarrow \text{IGA}([A], [b]) \subseteq \text{IGA}([B], [c])$,
- 2) $\text{IGA}(A, [b] + [c]) = \text{IGA}(A, [b]) + \text{IGA}(A, [c])$,
- 3) $\text{IGA}(A)[b] = A^{-1}[b] \subseteq \text{IGA}(A, [b])$,
- 4) $w([a]) \leq \alpha w([b]) \Rightarrow w(\text{IGA}(A, [a])) \leq \alpha w(\text{IGA}(A, [b]))$,

- 5) $\text{IGA}([A], b) \subseteq \text{IGA}([A])b$,
- 6) Es sei e^i der i -te Einheitsvektor. Dann gilt
 $\text{IGA}([A], e^i) = \text{IGA}([A])e^i$.

Beweise von 1) – 4) findet man in [5], 5) und 6) sind in [2] bewiesen worden.

Die Frage der *Durchführbarkeit* des Gaußschen Algorithmus bei Intervallgleichungssystemen, ist bisher nicht zufriedenstellend beantwortet. Es gibt Beispiele von Intervallmatrizen, die keine singuläre Punktmatrix enthalten, für die jedoch der Gaußsche Algorithmus für jede mögliche Pivotwahl abbricht (Division durch ein Nullintervall!)¹. Man interessiert sich daher für hinreichende Kriterien für die Durchführbarkeit. Wir geben ein solches Kriterium an.

Satz 5 Aus der Intervallmatrix $[A] = ([a_{ij}])$ werde die reelle Matrix $B = (b_{ij})$ gebildet durch

$$b_{ij} := \begin{cases} \min\{|a_{ij}| \mid a_{ij} \in [a_{ij}]\} & , \quad i = j \\ -|[a_{ij}]| & , \quad i \neq j \end{cases}$$

Ist B eine M -Matrix, so ist der Gaußsche Algorithmus mit der Matrix $[A]$ (und beliebigem Vektor $[b]$) ohne Zeilen- und/oder Spaltenvertauschungen durchführbar. \square

Zur Definition einer M -Matrix konsultiere man Varga [36]. Den Beweis von Satz 5 findet man in [5].

Eine nahezu vollständige Zusammenstellung von bis 1992 bekannten Resultaten über den Gaußschen Algorithmus bei Intervallgleichungssystemen findet man bei Mayer [22].

Wir betrachten nun ein lineares Intervallgleichungssystem mit einer *symmetrischen Intervallmatrix*, d.h., es gilt

$$[A] = [A]^T.$$

Ist die Intervallmatrix $[A]$ regulär, was wir nachfolgend stets voraussetzen wollen, so definieren wir als *symmetrische Lösungsmenge* S_{sym} die Menge

$$S_{sym} := \{x \in \mathbf{R}^n \mid Ax = b, A \in [A], A = A^T, b \in [b]\}.$$

Offensichtlich ist $S_{sym} \subseteq S$, und nur in speziellen Fällen gilt das Gleichheitszeichen. In [7] wurde gezeigt, daß S_{sym} kompakt und zusammenhängend ist. Außerdem findet man dort für den Fall von $n = 2$ Gleichungen und Unbekannten eine vollständige Beschreibung der Menge S_{sym} , auf die wir jetzt eingehen:

Es sei jetzt also $n = 2$. Wir wählen wie in Satz 4 einen festen Orthanten, der durch die Vorzeichen s_1, \dots, s_n der Komponenten seiner inneren Punkte festgelegt ist. Die

¹Für (2,2)-Systeme kann diese Situation nicht auftreten. Siehe dazu [5].

Halbebenen \underline{H}_i und \overline{H}_i seien wie in Satz 4 definiert. Außerdem definieren wir die Vektoren e und $f \in \mathbf{R}^2$ durch

$$e_i := \begin{cases} \underline{b}_i & \text{falls } s_i = 1, \\ \overline{b}_i & \text{falls } s_i = -1, \end{cases}$$

$$f_i := \begin{cases} \overline{b}_i & \text{falls } s_i = 1, \\ \underline{b}_i & \text{falls } s_i = -1. \end{cases}$$

Damit definieren wir die Mengen

$$C^- := \{x \in \mathbf{R}^2 \mid \underline{a}_{11}x_1^2 - \overline{a}_{22}x_2^2 - f_1x_1 + e_2x_2 \leq 0\},$$

$$C^+ := \{x \in \mathbf{R}^2 \mid \overline{a}_{11}x_1^2 - \underline{a}_{22}x_2^2 - e_1x_1 + f_2x_2 \geq 0\}.$$

Offensichtlich besitzt jede dieser Mengen einen Kegelschnitt als Rand, falls $\underline{a}_{11}^2 + \overline{a}_{22}^2 \neq 0$ im Falle von C^- und $\overline{a}_{11}^2 + \underline{a}_{22}^2 \neq 0$ im Falle von C^+ .

Mit diesen Definitionen gilt nun

Satz 6 *Es sei $[A] = [A]^T$ regulär und $n = 2$. O sei ein fester Quadrant des \mathbf{R}^2 . Dann gilt*

$$S_{sym} \cap O = S \cap O \cap C^- \cap C^+.$$

Ist die Menge $S_{sym} \cap O$ nichtleer, so ist sie kompakt, aber nicht notwendig konvex.

□

Den Beweis von Satz 6 findet man in [7]. In einer demnächst erscheinenden Arbeit [8] wird das Resultat aus Satz 6 sinngemäß für $n > 2$ verallgemeinert. Die Beweismethode unterscheidet sich wesentlich von der im Falle $n = 2$ verwendeten.

Für lineare Intervallgleichungssysteme mit einer symmetrischen Intervallmatrix ist es naheliegend, zu versuchen, mit einer sinngemäßen Verwendung des Cholesky-Verfahrens eine Einschließung der symmetrischen Lösungsmenge S_{sym} zu berechnen. Dabei wird, abgesehen von der Wurzelbildung, der Aufwand auf die Hälfte reduziert. Wir benötigen zunächst explizit eine Erklärung, wie man für ein Intervall $[a] = [\underline{a}, \overline{a}]$ die Wurzel zieht und das Quadrat bildet:

1) Sei $\underline{a} \geq 0$. Dann setzen wir

$$\sqrt{[a]} := [\sqrt{\underline{a}}, \sqrt{\overline{a}}].$$

Es gilt

$$\sqrt{[a]} = \{\sqrt{a} \mid a \in [a]\}.$$

2) Wir setzen für $[a] = [\underline{a}, \overline{a}]$

$$[a]^2 := \begin{cases} [\underline{a}^2, \overline{a}^2] & \text{für } \underline{a} \geq 0, \\ [\min(\underline{a}^2, \overline{a}^2), \max(\underline{a}^2, \overline{a}^2)] & \text{für } \underline{a} \overline{a} < 0, \\ [\overline{a}^2, \underline{a}^2] & \text{für } \overline{a} < 0. \end{cases}$$

Es gilt

$$[a]^2 = \{a^2 \mid a \in [a]\}.$$

Beide Definitionen stehen im Einklang mit den in Abschnitt 4.2 eingeführten intervallmäßigen Auswertungen für unäre Operationen in \mathbf{R} .

Das Cholesky-Verfahren für ein Intervallgleichungssystem besteht nun – wie bei Punktgleichungssystemen – aus drei Hauptschritten, die wir jetzt in algorithmischer Form angeben:

Cholesky-Verfahren für Intervallgleichungssysteme:

Schritt 1: “ LL^T -Zerlegung”

```

for j := 1 to n do
  [ljj] := ([ajj] - ∑k=1j-1 [ljk]2)1/2;
  for i := j + 1 to n do
    [lij] := ([aij] - ∑k=1j-1 [lik][ljk]) / [ljj];

```

Schritt 2: “Vorwärtssubstitution”

```

for i := 1 to n do
  [yi] := ([bi] - ∑j=1i-1 [lij][yj]) / [lii];

```

Schritt 3: “Rückwärtssubstitution”

```

for i := n downto 1 do
  [xi]C := ([yi] - ∑j=i+1n [lij][xj]C) / [lii];
  ICh([A], [b]) := [x]C.

```

Für die Cholesky-Zerlegung $A = LL^T$ einer reellen symmetrischen Matrix $A \in [A]$ gilt mit der im Cholesky-Verfahren berechneten Intervallmatrix $[L]$ die Beziehung $A = LL^T \in [L][L]^T$. Außerdem gilt $[A] \subseteq [L][L]^T$, aber nur in Ausnahmefällen gilt das Gleichheitszeichen. Die wichtigste Eigenschaft enthält der nächste Satz.

Satz 7 *Das Cholesky-Verfahren sei durchführbar, d.h., $ICh([A], [b])$ existiert für eine gegebene symmetrische Intervallmatrix $[A] = [A]^T$ (und einen beliebigen Intervallvektor $[b]$). Dann gilt*

$$S_{sym} \subseteq ICh([A], [b]).$$

□

Den Beweis findet man in [6].

Wir gehen nun auf die Durchführbarkeit des Cholesky-Verfahrens bei linearen Intervallgleichungssystemen näher ein. Diese ist nicht mehr gewährleistet, falls im ersten Teil bei der Wurzelbildung ein Intervall als Radikand auftritt, das die Null enthält. Für ein Punktgleichungssystem mit symmetrischer Koeffizientenmatrix A ist das Cholesky-Verfahren bekanntlich genau dann durchführbar, wenn A positiv definit ist. Das nachfolgende Beispiel zeigt, daß für symmetrische Intervallmatrizen das Cholesky-Verfahren nicht notwendig durchführbar ist, wenn alle symmetrischen Punktmatrizen aus dieser Intervallmatrix positiv definit sind.

Beispiel 8 Es sei

$$[A] = \begin{pmatrix} 1 & [a] & [a] \\ [a] & 1 & [a] \\ [a] & [a] & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } [a] = [0, \frac{2}{3}].$$

Für jede reelle symmetrische Matrix $A \in [A]$, d.h. für

$$A = \begin{pmatrix} 1 & a & b \\ a & 1 & c \\ b & c & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } a, b, c \in [0, \frac{2}{3}]$$

ist A positiv definit.

Führt man das Cholesky-Verfahren mit der Intervallmatrix $[A]$ durch, so kann $[l_{33}]$ nicht berechnet werden, da der Radikand

$$[a_{33}] - [l_{31}]^2 - [l_{32}]^2 = [-\frac{11}{45}, 1]$$

die Null enthält. Einzelheiten findet man in [6].

□

Wir geben nun ein erstes hinreichendes Kriterium für die Durchführbarkeit des Cholesky-Verfahrens an.

Satz 8 Aus der symmetrischen Intervallmatrix $[A] = [A]^T$ mit $[A] = ([a_{ij}])$ werde die reelle Matrix $B = (b_{ij})$ gebildet durch

$$b_{ij} = \begin{cases} \min\{|a_{ij}| \mid a_{ij} \in [a_{ij}]\} & , \quad i = j, \\ -|[a_{ij}]| & , \quad i \neq j. \end{cases}$$

Es sei $\underline{a}_{ii} > 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. Ist dann B eine M -Matrix, so ist das Cholesky-Verfahren mit der Intervallmatrix $[A]$ (und beliebiger rechter Seite $[b]$) durchführbar.

□

Zur Definition einer M -Matrix konsultiere man wieder Varga [36]. Den Beweis von Satz 8 findet man in [6].

Wie weitgehend Satz 8 ist, zeigt das nachfolgende Korollar, das aus Satz 8 folgt und ebenfalls in [6] bewiesen wurde.

Korollar 9 Es sei $[A] = [A]^T$ mit $\underline{a}_{ii} > 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, und B sei wie in Satz 8 definiert. Dann ist in jedem der nachfolgend genannten Fälle das Cholesky-Verfahren mit der Intervallmatrix $[A]$ (und beliebiger rechter Seite $[b]$) durchführbar:

- a) B ist streng diagonal dominant,
- b) B ist irreduzibel diagonal dominant,
- c) B ist regulär und diagonal dominant,
- d) B ist positiv definit.

□

Zur Formulierung eines weiteren Kriteriums setzen wir voraus, daß für die symmetrische Intervallmatrix $[A] = [A]^T$ das Cholesky-Verfahren durchführbar ist. Mit der berechneten unteren Dreiecksmatrix $[L]$ bilden wir dann eine reelle untere Dreiecksmatrix $\tilde{L} = (\tilde{l}_{ij})$ durch

$$\tilde{l}_{ij} = \begin{cases} \min\{|l_{ij}| \mid l_{ij} \in [l_{ij}]\} & , \quad i = j, \\ -|[l_{ij}]| & , \quad \text{sonst.} \end{cases}$$

\tilde{L} ist nichtsingulär, und es gilt $\tilde{L}^{-1} \geq 0$.

Wir setzen nun

$$|[A]^C| := (\tilde{L}^T)^{-1} \tilde{L}^{-1}.$$

Dann gilt

Satz 10 $[A]$ und $[B]$ seien symmetrische Intervallmatrizen. Das Cholesky-Verfahren sei mit $[A]$ (und beliebiger rechter Seite) durchführbar. Gilt

$$\rho(|[A]^C| q([A], [B])) < 1,$$

so ist das Cholesky-Verfahren mit der Intervallmatrix $[B]$ (und beliebiger rechter Seite $[b]$) durchführbar. Dabei bezeichnet $q([A], [B])$ den eingangs dieses Abschnittes eingeführten Abstand der beiden Intervallmatrizen $[A]$ und $[B]$ und $\rho(\cdot)$ den Spektralradius einer Matrix.

□

Den Beweis dieses Satzes findet man in [7].

Wir erläutern diesen Satz durch ein Beispiel aus [7], welches insbesondere zeigt, daß Satz 10 anwendbar sein kann, wenn dies für Satz 8 nicht gilt.

Beispiel 9 Es sei

$$[B] = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & [0, 2] \\ 2 & [0, 2] & 4 \end{pmatrix}.$$

Für die in Satz 8 definierte Matrix B gilt $B(1, 1, 1)^T = 0$, so daß B singulär, also sicher keine M -Matrix ist. Mit Satz 8 kann also nicht die Durchführbarkeit des Cholesky-Verfahrens mit der Intervallmatrix $[B]$ gefolgert werden. Wir betrachten nun die in $[B]$ gelegene reelle Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Diese kann als spezielle Intervallmatrix aufgefaßt werden. Da A irreduzibel diagonal dominant ist, ist A positiv definit und damit das Cholesky-Verfahren für A durchführbar.

Man erhält

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

und somit für die vor Satz 10 definierte Matrix \tilde{L} ,

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & \sqrt{3} & 0 \\ -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Damit ergibt sich

$$\tilde{L}^{-1} = \frac{\sqrt{3}}{6} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

und

$$|A^C| = (\tilde{L}^T)^{-1} \tilde{L}^{-1} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 5 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Mit

$$q(A, [B]) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

erhalten wir schließlich die Matrix

$$|A^C| q(A, [B]) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix},$$

deren Spektralradius offensichtlich kleiner als eins ist. Satz 10 garantiert somit die Durchführbarkeit des Cholesky-Verfahrens für die Matrix $[B]$ (mit beliebiger rechter Seite).

□

Wählt man in Satz 10 speziell für $[A]$ den Mittelpunkt der Intervallmatrix $[B]$, d.h. $[A] = m([B])$, so erhält man das folgende

Korollar 11 Die Matrix $m([B])$ der symmetrischen Intervallmatrix $[B]$ sei positiv definit, und es gelte

$$\rho(|m([B])^C| w([B])) < 1.$$

Dann ist das Cholesky-Verfahren mit der Intervallmatrix $[B]$ (und beliebiger rechter Seite $[b]$) durchführbar. □

Den Beweis findet man in [7].

Wie oben gezeigt, gilt im Falle der Durchführbarkeit des Cholesky-Verfahrens

$$S_{sym} \subseteq \text{Ich}([A], [b]).$$

Wir wissen außerdem, daß stets

$$S_{sym} \subseteq S$$

und (im Falle der Durchführbarkeit)

$$S \subseteq \text{IGA}([A], [b])$$

gilt.

Diese Relationen legen die Vermutung nahe, daß

$$\text{Ich}([A], [b]) \subseteq \text{IGA}([A], [b])$$

gilt. Überraschenderweise ist dies i.a. nicht richtig, wie das folgende Beispiel zeigt.

Beispiel 10 Es sei

$$[A] = \begin{pmatrix} [1, 4] & [0, 1] \\ [0, 1] & 3 \end{pmatrix}, [b] = \begin{pmatrix} 2 \\ [0, 2] \end{pmatrix}.$$

Dann erhält man

$$\begin{aligned} \text{Ich}([A], [b]) &= \begin{pmatrix} [0, 3] \\ [-1, 1] \end{pmatrix}, \\ \text{IGA}([A], [b]) &= \begin{pmatrix} [0.25, 3] \\ [-1, 1] \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Es gilt also sogar

$$\text{IGA}([A], [b]) \subseteq \text{Ich}([A], [b]),$$

wobei in der ersten Komponente die echte Inklusion gilt. □

Durch Anwendung des Cholesky-Verfahrens kann man gegenüber dem Gaußschen Algorithmus den Aufwand wie bekannt auf etwa die Hälfte reduzieren, es ist jedoch nicht garantiert, daß man damit eine bessere Einschließung von S_{sym} erhält.

Unter speziellen Voraussetzungen liefert das Cholesky-Verfahren die bestmögliche Einschließung von S_{sym} . Zur Formulierung dieses Ergebnisses definieren wir zunächst für eine beschränkte Menge $M \subseteq \mathbf{R}^n$ als Intervallhülle $\square M$ den kleinsten Intervallvektor, welcher M einschließt. Damit gilt nun

Satz 12 *Es sei $[A] = [A]^T$ eine Intervall- M -Matrix (d.h., alle Punktmatrizen aus $[A]$ seien M -Matrizen). Für die rechte Seite $[b] = [\underline{b}, \bar{b}]$ gelte entweder $\underline{b} \geq 0$ oder $0 \in [b]$ oder $\bar{b} \leq 0$. Dann folgt $Ich([A], [b]) = \square S_{sym}$.*

□

Den Beweis findet man in [6].

Mit $[A] = [\underline{A}, \bar{A}]$ läßt sich $Ich([A], [b]) = \square S_{sym}$ in diesem Falle sogar explizit angeben:

$$Ich([A], [b]) = \begin{cases} \left[\underline{A}^{-1} \underline{b}, \bar{A}^{-1} \bar{b} \right] & , \bar{b} \leq 0, \\ \left[\underline{A}^{-1} \underline{b}, \underline{A}^{-1} \bar{b} \right] & , 0 \in [b], \\ \left[\bar{A}^{-1} \underline{b}, \underline{A}^{-1} \bar{b} \right] & , \underline{b} \geq 0. \end{cases}$$

Barth und Nuding haben in [9] gezeigt, daß diese Darstellung für eine beliebige Intervall- M -Matrix und unter den gleichen Voraussetzungen für $[b]$ auch für $IGA([A], [b])$ gilt. Dies ergibt sofort den Beweis für das folgende

Korollar 13 *Es sei $[A] = [A]^T$ eine Intervall- M -Matrix und für $[b]$ gelte entweder $\underline{b} \geq 0$ oder $0 \in [b]$ oder $\bar{b} \leq 0$. Dann gilt*

$$Ich([A], [b]) = \square S_{sym} = \square S = IGA([A], [b]).$$

□

Wir weisen abschließend darauf hin, daß es auch eine ganze Reihe von Iterationsverfahren gibt, mit deren Hilfe man Einschließungen für die Lösungsmenge eines linearen Intervallgleichungssystems berechnen kann. Dieser Problemkreis wird in [5] ausführlich behandelt. Siehe dazu auch [13].

4.5 Einschließung der Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme

Einleitend betrachten wir eine Gleichung mit einer Unbekannten. Wir setzen voraus, daß die reelle Funktion

$$f : [x] \subset D \subset \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$$

auf D differenzierbar ist und daß die Ableitung f' für $[x]$ intervallmäßig auswertbar ist und nicht die Null enthält. Besitzt dann f eine Nullstelle x^* in $[x]$, so gilt mit einem beliebigen $x \in [x]$ der Mittelwertsatz,

$$f(x) - f(x^*) = f'(\xi) (x - x^*),$$

und somit im Falle $f'(\xi) \neq 0$,

$$x^* = x - \frac{f(x)}{f'(\xi)}.$$

Wegen $f'(\xi) \in f'([x])$ folgt mit der Inklusionseigenschaft

$$x^* = x - \frac{f(x)}{f'(\xi)} \in x - \frac{f(x)}{f'([x])}$$

und damit

$$x^* \in \left\{ x - \frac{f(x)}{f'([x])} \right\} \cap [x].$$

Setzt man $[x]^0 := [x]$ und bezeichnet man mit $m([x])$ einen beliebig gewählten Punkt aus $[x]$ (gewöhnlich wählt man den Mittelpunkt, daher erklärt sich die Bezeichnung), so erhält man durch wiederholte Anwendung des obigen Vorgehens das folgende Iterationsverfahren zur fortwährenden Einschließung von x^* :

$$[x]^{k+1} = \left\{ m([x]^k) - \frac{f(m([x]^k))}{f'([x]^k)} \right\} \cap [x]^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Dieses Verfahren wird als *Intervall-Newton-Verfahren* bezeichnet. Es ist unter den genannten Voraussetzungen wohldefiniert (d.h., der Durchschnitt wird nicht leer), es gilt $x^* \in [x]^k$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} [x]^k = x^*$. Außerdem konvergiert die Folge der Durchmesser

$\{w([x]^k)\}_{k=0}^{\infty}$ unter naheliegenden Voraussetzungen quadratisch gegen Null. Beweise dafür und eine Reihe weiterer Verfahren zur Einschließung von Nullstellen einer Funktion einer reellen Variablen findet man in [5].

Die Intervallfunktion

$$N([x]) := y - \frac{f(y)}{f'([x])}, \quad y \in [x] \in \mathbf{IR},$$

wird als *Intervall-Newton-Operator* bezeichnet. Er besitzt die interessante Eigenschaft, daß man mit ihm die Existenz bzw. die Nichtexistenz einer Nullstelle x^* von f in $[x]$ nachweisen kann. Es gilt nämlich:

1. Ist $N([x])$ für ein Intervall $[x] \in \mathbf{IR}$ definiert und gilt

$$N([x]) \subseteq [x],$$

so besitzt f in $[x]$ genau eine Nullstelle x^* .

2. Ist $N([x])$ für ein Intervall $[x] \in \mathbf{IR}$ definiert und gilt

$$N([x]) \cap [x] = \emptyset \quad (\text{leere Menge}),$$

so besitzt f in $[x]$ keine Nullstelle.

Auf die Beweise dieser interessanten Eigenschaften gehen wir nicht ein, da sie als Spezialfall in den Ergebnissen enthalten sind, die man für den Intervall-Newton-Operator bei Gleichungssystemen erhält. Damit wollen wir uns jetzt näher beschäftigen.

Gegeben sei eine Abbildung

$$f : [x] \subset D \subseteq \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n.$$

Wir setzen voraus, daß die partiellen Ableitungen von f in D existieren, stetig sind und daß die intervallmäßige Auswertung $f'([x])$ der Jacobimatrix $f'(x)$ existiert. Wir wählen $y \in [x]$ fest.

Dann gilt

$$f(x) - f(y) = J(x) (x - y), \quad x \in [x]$$

mit

$$J(x) = \int_0^1 f'(y + t(x - y)) dt.$$

J ist bei festem y eine stetige Funktion von x . Wegen $t \in [0, 1]$ gilt $y + t(x - y) \in [x]$ und daher $J(x) \in f'([x])$.

Wir definieren nun

$$N([x]) = y - \text{IGA}(f'([x]), f(y)), \quad y \in [x],$$

als *Intervall-Newton-Operator*. Für $n = 1$ stimmt dieser mit der oben für diesen Fall angegebenen Definition überein.

Für $N([x])$ gelten nun die folgenden Aussagen.

Satz 14 Sei $f : D \subseteq \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ eine stetig differenzierbare Abbildung. Die intervallmäßige Auswertung $f'([x])$ existiere für ein $[x] \subseteq D$. Es sei $y \in [x]$ und $\text{IGA}(f'([x]), f(y))$ existiere.

Dann gilt:

1) Falls f eine (notwendig eindeutige) Nullstelle x^* in $[x]$ besitzt, dann gilt

$$x^* \in N([x]).$$

2) Falls

$$N([x]) \cap [x] = \emptyset \quad (\text{leere Menge}),$$

so besitzt f in $[x]$ keine Nullstelle.

3) Falls

$$N([x]) \subseteq [x],$$

so besitzt f in $[x]$ genau eine Nullstelle.

Beweis.

1) Seien x^* und x^{**} zwei Nullstellen von f in $[x]$. Dann gilt

$$0 = f(x^*) - f(x^{**}) = J(x^*)(x^* - x^{**}),$$

wobei $J(x^*)$ wie oben definiert ist. Nach Voraussetzung existiert $\text{IGA}(f'([x]), f(y))$, d.h., $f'([x])$ enthält keine singuläre Matrix.

Da $J(x^*) \in f'([x])$, folgt daher $x^* = x^{**}$.

Für ein beliebiges $y \in [x]$ gilt

$$f(x^*) - f(y) = -f(y) = J(x^*)(x^* - y).$$

Wegen $J(x^*) \in f'([x])$ ist $J(x^*)$ nichtsingulär, und es gilt

$$\begin{aligned} x^* &= y - J(x^*)^{-1}f(y) \\ &\in y - \text{IGA}(f'([x]), f(y)) = N([x]). \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Inklusionseigenschaft der Intervallrechnung verwendet.

2) Der Beweis folgt sofort wegen 1).

3) Wegen der Durchführbarkeit des Gaußschen Algorithmus mit $f'([x])$ als Koeffizientenmatrix, enthält $f'([x])$ keine singuläre Matrix, insbesondere ist $J(x)$ (bei festgewähltem y) nichtsingulär.

Wir betrachten nun die Abbildung

$$p : [x] \subseteq D \subseteq \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$$

mit

$$p(x) = x - J(x)^{-1}f(x), \quad x \in D.$$

Es folgt

$$\begin{aligned} p(x) &= x - J(x)^{-1}f(y) + J(x)^{-1}(f(y) - f(x)) \\ &= x - J(x)^{-1}f(y) + J(x)^{-1}J(x)(y - x) \\ &= y - J(x)^{-1}f(y) \\ &\in y - \text{IGA}(f'([x]), f(y)) = N([x]) \subseteq [x]. \end{aligned}$$

Die stetige Abbildung p bildet somit die nichtleere konvexe und kompakte Menge $[x]$ in sich ab. Aufgrund des Brouwerschen Fixpunktsatzes besitzt f in $[x]$ eine Nullstelle x^* . Die Eindeutigkeit von x^* folgt wie im ersten Teil des Beweises.

□

Wir setzen nun voraus, daß wir einen Intervallvektor $[x]$ gegeben haben, der eine Nullstelle x^* von

$$f : [x] \subset D \subseteq \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$$

enthält. f wird in D als stetig differenzierbar vorausgesetzt. $f'([x])$ existiere, und der Gaußsche Algorithmus mit $f'([x])$ sei durchführbar. In Satz 14 haben wir gezeigt, daß unter diesen Voraussetzungen x^* eindeutig ist. Es sei $m([x])$ ein beliebig aus $[x]$ gewählter reeller Vektor. Dann betrachten wir mit $[x]^0 := [x]$ das sogenannte *Intervall-Newton-Verfahren*

$$[x]^{k+1} = \{m([x]^k) - \text{IGA}(f'([x]^k), f(m([x]^k)))\} \cap [x]^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

welches für $n = 1$ mit dem eingangs angegebenen Intervall-Newton-Verfahren für eine Gleichung und eine Unbekannte übereinstimmt.

Wegen $x^* \in [x]^0$ gilt nach 1) aus Satz 14

$$x^* \in m([x]^k) - \text{IGA}(f'([x]^k), f(m([x]^k)))$$

und damit $x^* \in [x]^{k+1} \subseteq [x]^k$. Durch vollständige Induktion zeigt man

$$x^* \in [x]^k, \quad [x]^0 \supseteq [x]^1 \supseteq \dots \supseteq [x]^k \supseteq [x]^{k+1} \supseteq \dots$$

Alle Iterierten enthalten also x^* , und die ineinander geschachtelte Folge von Intervallen ist konvergent.

H. Schwandt hat in [34] ein Beispiel angegeben, welches zeigt, daß für $n > 1$ im Gegensatz zum Fall $n = 1$ i.a. nicht $\lim_{k \rightarrow \infty} [x]^k = x^*$ gilt. Der Grenzwert der Folge $\{[x]^k\}_{k=0}^{\infty}$ kann also ein echter Intervallvektor sein. Unter zusätzlichen Voraussetzungen kann dies ausgeschlossen werden. Dies ist eine Teilaussage des nächsten Satzes.

Satz 15 Für die in D stetig differenzierbare Abbildung

$$f : [x] \subset D \subseteq \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$$

existiere für $[x]^0 := [x]$ die intervallmäßige Auswertung $f'([x])$ der Ableitung. Der Gaußsche Algorithmus sei mit $f'([x]^0)$ durchführbar. Dann gilt:

1) Es sei

$$A = |I - \text{IGA}(f'([x]^0)) \cdot f'([x]^0)|$$

und

$$B = w(\text{IGA}(f'([x]^0))) \cdot |f'([x]^0)|.$$

Ist dann $\rho(A) < 1$ oder $\rho(B) < 1$ (ρ bezeichnet den Spektralradius) und besitzt f in $[x]^0$ eine (notwendig eindeutige) Nullstelle, so gilt $x^* \in [x]^k$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} [x]^k = x^*$ für die

Iterierten des Intervall-Newton-Verfahrens.

2) Ist mit den obigen Matrizen $\rho(A) < 1$ oder $\rho(B) < 1$, und besitzt f in $[x]^0$ keine Nullstelle, so gibt es ein $k_0 \geq 0$, so daß

$$\{m([x]^{k_0}) - IGA(f'([x]^{k_0}), f(m([x]^{k_0})))\} \cap [x]^{k_0} = \emptyset,$$

d.h., das Intervall-Newton-Verfahren bricht nach endlich vielen Schritten wegen leeren Durchschnitts ab. □

Die Voraussetzungen $\rho(A) < 1$ und $\rho(B) < 1$ bedeuten im wesentlichen, daß der Intervallvektor $[x]^0$ komponentenweise hinreichend kleine Durchmesser besitzt. Für $w([x]^0) \rightarrow 0$ gilt ja $IGA(f'([x]^0)) \cdot f'([x]^0) \rightarrow I$, d.h., $A \rightarrow O$ und $B = w(IGA(f'([x]^0))) \cdot |f'([x]^0)| \rightarrow O$, so daß $\rho(A) < 1$ und $\rho(B) < 1$ für genügend kleine Durchmesserkomponenten gelten.

Den Beweis dieses Satzes findet man in [4]. Unter naheliegenden Voraussetzungen für f kann man zeigen, daß im Falle 1) die Folge $\{[x]^k\}_{k=0}^{\infty}$ quadratisch gegen x^* konvergiert. Analog erfolgt im Falle 2) "die Divergenz" quadratisch. (Für eine Präzisierung dieses Resultates informiere man sich in [4].)

Einen Intervallvektor $[x]^0$, der eine Nullstelle x^* von f enthält, kann man z.B. mit einem in [4] diskutierten Vorgehen bestimmen.

Führt das Intervall-Newton-Verfahren auf ein Intervallgleichungssystem mit einer symmetrischen Koeffizientenmatrix, so kann man anstelle des Gaußschen Algorithmus das im letzten Abschnitt diskutierte Cholesky-Verfahren verwenden. Die Durchführbarkeit vorausgesetzt, lassen sich ähnliche Aussagen wie in den Sätzen 14 und 15 herleiten. Symmetrische Koeffizientenmatrizen erhält man z.B. bei nichtlinearen Gleichungssystemen, die durch Diskretisierung von gewissen Randwertaufgaben entstehen.

4.6 Schlußbemerkungen

Bei der praktischen Durchführung der in dieser Arbeit beschriebenen Methoden auf einer Rechenanlage, werden Rundungsfehler eingeschleppt. Man muß daher die Intervalloperationen so organisieren, daß durch Außenrundung diese miterfaßt werden. Eine systematische Behandlung dieser Problemstellung erfolgt in [19]. Darüber hinaus ist es wünschenswert, daß die Intervallrechnung in höheren Programmiersprachen zur Verfügung steht. Dazu verweisen wir auf z.B. [35] und die dort angegebene Literatur.

4.7 Danksagung

Die Autoren danken Frl. cand. math. oec. Verena Doeppner für die äußerst gewissenhafte Umsetzung der handschriftlichen Aufzeichnungen in einen reproduzierbaren

Text. Dabei hat sie auch auf eine Reihe von Schreibfehlern und Unstimmigkeiten aufmerksam gemacht.

Literaturverzeichnis

- [1] Alefeld, G., Bounding the slope of polynomial operators and some applications. *Computing* 26 (1981), 227 – 237.
- [2] Alefeld, G., On the convergence of some interval–arithmetic modifications of Newton’s method. In “Scientific Computing”. R. Stepleman (Editor). IMACS / North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1983, 223 – 230.
- [3] Alefeld, G., Enlosure methods. In “Computer Arithmetic and Self–Validating Numerical Methods”. Ch. Ullrich (Editor). Academic Press, New York and London, 1990, 55 – 72.
- [4] Alefeld, G., Inclusion methods for systems of nonlinear equations – the interval Newton method and modifications. In “Topics in Validated Computations”. J. Herzberger (Editor). Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1994, 7 – 26.
- [5] Alefeld, G., Herzberger, J., Introduction to Interval Computations. Academic Press, New York, 1983.
- [6] Alefeld, G., Mayer, G., The Cholesky–method for interval data. *Linear Algebra and its Applications* 194 (1993), 161 – 182.
- [7] Alefeld, G., Mayer, G., On the symmetric and unsymmetric solution set of interval systems. Erscheint in *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*
- [8] Alefeld, G., Kreinovich, V., Mayer, G., On the symmetric solution set for interval systems. In Vorbereitung.
- [9] Barth, W., Nuding, E., Optimale Lösungen von Intervallgleichungssystemen. *Computing* 12 (1974), 117 – 125.
- [10] Bauch, H., Jahn, K.–U., Oelschlägel, D., Süsse, H., Wiebigke, V., Intervallmathematik BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1987.
- [11] Beeck, H.: Über Struktur und Abschätzungen der Lösungsmenge von linearen Gleichungssystemen mit Intervallkoeffizienten. *Computing* 10 (1972), 231 – 244.
- [12] Cornelius, H., Lohner, R., Computing the range of values with accuracy higher than second order. *Computing* 33 (1984), 331 – 347.
- [13] Frommer, A., Parallele asynchrone Iterationen. Dieser Band.
- [14] Hansen, E. R., The centered form. In “Topics in Interval Analysis”. Oxford University Press (Clarendon), London and New York, 1969.

- [15] Hansen, E. R., Global Optimization using Interval Analysis. Marcel Dekker, New York (1992).
- [16] Heindl, G., An improved algorithm for computing the product of two machine intervals. Report IAGMPI – 9304, Universität Wuppertal (1993).
- [17] Herzberger, J., Basic definitions and properties of interval arithmetic. In “Topics in Validated Computations”. J. Herzberger (Editor). Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1994, 1 – 6.
- [18] Krawczyk, R., Neumaier, A., Interval slopes for rational functions and associated centered forms. SIAM J. Numer. Anal. 22, 604 – 616, 1985.
- [19] Kulisch, U., Miranker, W. L., Computer Arithmetic in Theory and Practice. Academic Press, New York, 1981.
- [20] Lohner, R. J., Einschließung der Lösung gewöhnlicher Anfangs- und Randwertaufgaben und Anwendungen. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1988.
- [21] Mayer, G., Grundbegriffe der Intervallrechnung. In “Wissenschaftliches Rechnen mit Ergebnisverifikation”. U. Kulisch (Editor). Vieweg, Braunschweig, 1989, 101 – 117.
- [22] Mayer, G., Old and new aspects for the interval Gaussian algorithm. In “Computer Arithmetic, Scientific Computation and Mathematical Modelling”. E. Kaucher, S. M. Markov, G. Mayer (Editors). J. C. Baltzer AG, Basel, 1991, 329 – 349.
- [23] Moore, R. E., Interval Analysis. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1966.
- [24] Moore, R. E., Methods and Applications of Interval Analysis, SIAM Studies in Applied Mathematics. SIAM, Philadelphia, Pennsylvania, 1979.
- [25] Neumaier, A., Interval Methods for Systems of Equations. Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [26] Oettli, W., Prager, W., Compatibility of approximate solutions of linear equations with given error bounds for coefficients and right-hand sides. Numer. Math. 6 (1964), 405 – 409.
- [27] Plum, M., Inclusion methods for elliptic boundary value problems. In “Topics in Validated Computations”, J. Herzberger (Editor). Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1994, 323 – 379.
- [28] Ratschek, H., Teilbarkeitskriterien der Intervallarithmetik. J. Reine Angewandte Math. 252 (1971), 128 – 137.
- [29] Ratschek, H., Rokne, J., Computer Methods for the Range of Functions. Ellis Horwood, Chichester, 1984.

- [30] Ratschek, H., Rokne, J., *New Computer Methods for Global Optimization*. Ellis Horwood, Chichester, 1988.
- [31] Rihm, R., *Über Einschließungsverfahren für gewöhnliche Anfangswertprobleme und ihre Anwendung auf Differentialgleichungen mit unstetiger rechter Seite*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1993.
- [32] Rihm, R., Interval methods for initial value problems in ODE's. In "Topics in Validated Computations", J. Herzberger (Editor). Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1994, 173 – 208.
- [33] Rump, S. M., Expansion and estimation of the range of nonlinear functions. Zur Veröffentlichung eingereicht.
- [34] Schwandt, H., *Schnelle fast global konvergente Verfahren für die Fünf-Punkte-Diskretisierung der Poissongleichung mit Dirichletschen Randbedingungen auf Rechtecken*. Dissertation. TU Berlin, 1981.
- [35] Ullrich, C., Interval arithmetic on computers. In "Topics in Validated Computations". J. Herzberger (Editor). Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1994, 473 – 497.
- [36] Varga, R. S., *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1962.