Der Gaußsche Algorithmus und Varianten

Vorlesung vom 15.1.16

Gaußsche Elimination und Rückwärtssubstitution:

Motivation am Beispiel, Verallgemeinerung und Algorithmus.

Achtung: Durchführbarkeit nur bei nichtverschwindenden Pivotelementen!

Aufwand des Gaußschen Algorithmus: $\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ (Aufwandsmaß: Punktoperationen).

Gaußsche Elimination, Eliminationsmatrizen G_k und LR–Zerlegung $A = LR$.

Vorteile der LR–Zerlegung bei vielen rechten Seiten und gleicher Koeffizientenmatrix.

Reduktion des Aufwands durch Ausnutzen von Spezialstruktur:

Tridiagonalmatrizen:
Invarianz der Besetzungsstruktur unter Gaußelimination.
Keine Elimination der ohnehin vorhandenen Subdiagonalnullen: Aufwand $\mathcal{O}(n)$.

Problem und Algorithmus

Problem: Löse das lineare Gleichungssystem $Ax = b$

Auswertung des Lösungsoperators $f(A, b) = A^{-1}b$ zu Daten $A \in \mathbb{R}^{n,n}$, $b \in \mathbb{R}^n$

Satz 9.7 Relative Kondition des Problems $\kappa_{\text{rel}} = \kappa(A)$

Algorithmus: Zerlegung des Lösungsoperators in Elementaroperationen

$$x = A^{-1}b = g_m \circ \cdots \circ g_1(A, b)$$

Qualitätskriterien: Aufwand und Stabilität

Algorithmus: Gaußsche Elimination... (Algorithmus 9.12)

for $k = 1 : n-1$ do

{

for $i = k+1 : n$ do (falls $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0!$)

{

$$\ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\ ; \qquad b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \ell_{ik} b_k^{(k-1)}\ ; \qquad a_{ik}^{(k)} = 0\ ;$$

for $j = k+1 : n$ do

{

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \ell_{ik} a_{kj}^{(k-1)}\ ;$$

}

}

}

...und Rückwärtssubstitution

Gestaffeltes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & \cdots & a_{1n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & \cdots & a_{2n}^{(n-1)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1^{(n-1)} \\ b_2^{(n-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

Algorithmus 9.13 (Rückwärtssubstitution)

$$x_n = \frac{1}{a_{nn}^{(n-1)}} b_n^{(n-1)}$$

for $i = n-1 : (-1) : 1$ do

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(n-1)}} \left(b_i^{(n-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(n-1)} x_j \right)$$

Matrix-Schreibweise

$$A^{(k)} = (I - G_k)A^{(k-1)}\ , A^{(0)} = A, \qquad b^{(k)} = (I - G_k)b^{(k-1)},\ b^{(0)} = b$$

$$x = R^{-1}z, \qquad R = A^{(n-1)}\ , \quad z = b^{(n-1)}$$

Eliminationsmatrizen:

$$G_k = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & 0 \\ 0 & \ddots & & & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & & & \vdots \\ \vdots & & 0 & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \ell_{k+1,k} & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \ell_{n,k} & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \ell_{i,k} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Lösung mit dem Gaußschen Algorithmus:

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} > 10^{-3}$$

Von 15 gültigen Stellen sind höchstens noch 3 übrig!

Stabilität

Algorithmus: Zerlegung des Lösungsoperators in Elementaroperationen

$$x = A^{-1}b = f(A,b) = g_m \circ \cdots \circ g_1(A,b)$$

Runden der Elementaroperationen: $\tilde{g}_i = \mathrm{rd}(g_i)$

Auswertungsfehler: $x - \tilde{x}$

$$\tilde{x} = \tilde{f}(A,b) = \tilde{g}_m \circ \cdots \circ \tilde{g}_1(A,b)$$

relative, normweise Stabilität: Die kleinste Zahl σ mit der Eigenschaft

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \sigma eps + o(eps)$$

Hochauflösendes Stabilitätsanalyse (nur Elimination)

for $k = 1 : n - 1$ do

$\{$

for $\quad i = k + 1 : n$ do $\quad$ (falls $\tilde{a}_{kk}^{(k-1)} \neq 0!$)

$\{$

$$\tilde{\ell}_{ik} = \mathrm{rd}\left(\frac{\tilde{a}_{ik}^{(k-1)}}{\tilde{a}_{kk}^{(k-1)}}\right) ; \qquad \tilde{b}_i^{(k)} = \mathrm{rd}(\tilde{b}_i^{(k-1)} - \mathrm{rd}(\tilde{\ell}_{ik}\tilde{b}_k^{(k-1)})) ; \qquad \tilde{a}_{ik}^{(k)} = 0 ;$$

for $j = k + 1 : n$ do

$\{$

$$\tilde{a}_{ij}^{(k)} = \mathrm{rd}(\tilde{a}_{ij}^{(k-1)} - \mathrm{rd}(\tilde{\ell}_{ik}\tilde{a}_{kj}^{(k-1)})) ;$$

$\}$

$\}$

$\}$

Vereinfachtes Stabilitätsanalyse I

$$\tilde{A}^{(k)} = \mathrm{rd}((I - G_k)\tilde{A}^{(k-1)}) \; , A^{(0)} = A, \qquad \tilde{b}^{(k)} = \mathrm{rd}((I - G_k)b^{(k-1)}), \; b^{(0)} = b$$

$$\tilde{x} = \mathrm{rd}(\tilde{R}^{-1}\tilde{z})), \qquad \tilde{R} = \tilde{A}^{(n-1)} \; , \quad \tilde{z} = \tilde{b}^{(n-1)}$$

Elementaroperationen:

$$g_k(B, y) = ((I - G_k)B, (I - G_k)y) \; , \quad k = 1, \ldots, n-1, \qquad g_n(R, z) = R^{-1}z$$

Vereinfachungen:

- exakte Eliminationsmatrizen G_k
- exakte Auswertung von $(I - G_k)\tilde{A}^{(k-1)}$ und $(I - G_k)\tilde{b}^{(k-1)}$
- exakte Auswertung von $\tilde{R}^{-1}\tilde{z}$

Vereinfachtes Stabilitätsanalyse I

$$\tilde{A}^{(k)} = \mathrm{rd}((I - G_k)\tilde{A}^{(k-1)}) \ , A^{(0)} = A, \qquad \tilde{b}^{(k)} = \mathrm{rd}((I - G_k)b^{(k-1)}), \ b^{(0)} = b$$

$$\tilde{x} = \mathrm{rd}(\tilde{R}^{-1}\tilde{z}), \qquad \tilde{R} = \tilde{A}^{(n-1)} \ , \quad \tilde{z} = \tilde{b}^{(n-1)}$$

Satz 9.19

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leq \sigma_G eps + o(eps), \quad \sigma_G = 2\kappa(A)\sigma_K\sigma_E$$

$$\sigma_K = \prod_{k=1}^{n-1} \kappa(I - G_k), \qquad \sigma_E = \sum_{i=1}^{n-1} \prod_{j=i+1}^{n-1} \kappa(I - G_k),$$

Vereinfachtes Stabilitätsanalyse II

$$A^{(k)} = (I - G_k)A^{(k-1)}\ , A^{(0)} = A, \qquad b^{(k)} = (I - G_k)b^{(k-1)},\ b^{(0)} = b$$

$$\tilde{x} = \tilde{R}^{-1}\tilde{z}, \qquad \tilde{R} = \mathrm{rd}(A^{(n-1)})\ , \quad \tilde{z} = \mathrm{rd}(b^{(n-1)})$$

Vereinfachungen:

- exakte Auswertung des gesamten Eliminationsschritts

Vereinfachtes Stabilitätsanalyse II

$$A^{(k)} = (I - G_k)A^{(k-1)}\ , A^{(0)} = A, \qquad b^{(k)} = (I - G_k)b^{(k-1)},\ b^{(0)} = b$$

$$\tilde{x} = \tilde{R}^{-1}\tilde{z}, \qquad \tilde{R} = \mathrm{rd}(A^{(n-1)})\ , \quad \tilde{z} = \mathrm{rd}(b^{(n-1)})$$

Vereinfachungen:

- exakte Auswertung des gesamten Eliminationsschritts

Satz: Unter der Voraussetzung $\|R - \tilde{R}\|_\infty / \|R\|_\infty < 1/\kappa_\infty(R)$ gilt

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} \le 2\kappa(R)eps + o(eps)$$

Beweis: Satz 9.7

Abschätzung der Kondition von R

$$\kappa(R) = \kappa\left(\prod_{k=1}^{n-1}(I - G_{n-k})A\right) \leq \kappa(A)\prod_{k=1}^{n-1}\kappa(I - G_k) = \kappa(A)\sigma_K$$

Abschätzung der Kondition von R

$$\kappa(R) = \kappa\left(\prod_{k=1}^{n-1}(I - G_{n-k})A\right) \leq \kappa(A)\prod_{k=1}^{n-1}\kappa(I - G_k) = \kappa(A)\sigma_K$$

Satz: Es gilt

$$\kappa(I-G_k) = \|I-G_k\|_\infty \|(I-G_k)^{-1}\|_\infty = \max_{i=k+1,\ldots,n}(1+|\ell_{ik}|)^2 , \qquad \ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} .$$

Insbesondere ist $\kappa(I - G_k) = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad a_{ik}^{(k-1)} = 0 \quad \forall i = k+1, \ldots, n.$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Gauß–Elimination: $\frac{\|x - \tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} > 10^{-3}$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

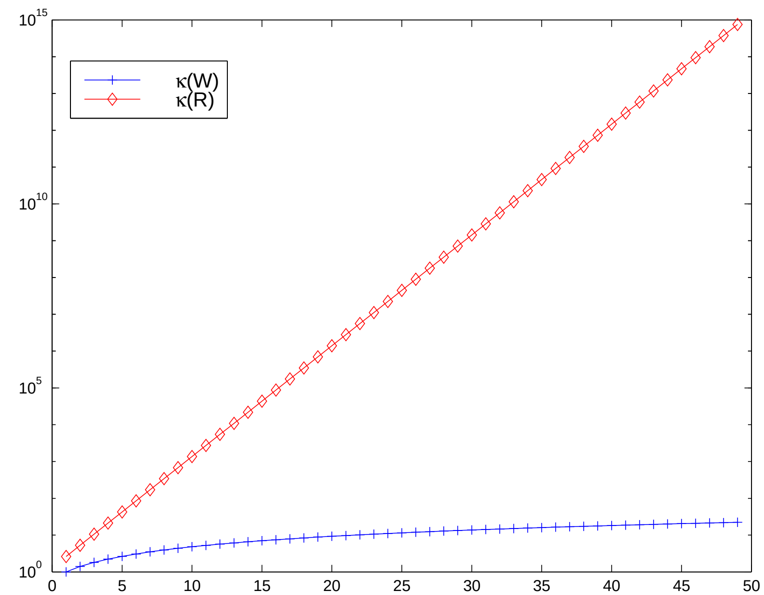
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Gauß–Elimination: $\frac{\|x - \tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} > 10^{-3}$

$$R = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 0 & 10^{-14} & -1/3 \\ 0 & 0 & 10^{14}/3 \end{pmatrix} , \qquad \kappa_\infty(R) > 10^{27}$$

Beispiel: Die Wilkinson–Matrix W_n

$$W_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 1 \\ -1 & \cdots & \cdots & -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n,n}$$



$\kappa_\infty(W_n)$ und $\kappa_\infty(R_n)$

Algorithmische Konsequenzen

Satz 9.20:

$$\kappa(I - G_k) = \|I - G_k\|_\infty \|(I - G_k)^{-1}\|_\infty = \max_{i=k+1,\dots,n} (1 + |\ell_{ik}|)^2 , \qquad \ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

Folgerungen:

- $|a_{kk}^{(k-1)}| \ll |a_{ik}^{(k-1)}| \quad \Longrightarrow \quad |\ell_{ik}| = \left|\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right| \gg 0 \quad \Longrightarrow \quad \kappa(I - G_k) \gg 1$
- $|a_{kk}^{(k-1)}| \gg |a_{ik}^{(k-1)}| \quad \Longrightarrow \quad |\ell_{ik}| = \left|\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right| \approx 0 \quad \Longrightarrow \quad \kappa(I - G_k) \approx 1$

Stabilität, falls $|a_{kk}^{(k-1)}| \gg |a_{ik}^{(k-1)}|$

Gaußscher Algorithmus mit Spaltenpivotsuche Algorithmus 9.23

for $k = 1 : n-1$ do
{
$k_0 = k$
for $i = k+1 : n$ do
{
falls $\left|a_{ik}^{(k-1)}\right| > \left|a_{k_0,k}^{(k-1)}\right|$, setze $k_0 := i$
}
Vertausche die k–te Zeile mit der k_0–ten Zeile
k–ter Eliminationsschritt wie in Algorithmus 9.12.
}

Gaußscher Algorithmus mit Spaltenpivotsuche Algorithmus 9.23

for $k = 1 : n - 1$ do

{

$k_0 = k$

for $i = k + 1 : n$ do

{

falls $\left| a_{ik}^{(k-1)} \right| > \left| a_{k_0,k}^{(k-1)} \right|$, setze $k_0 := i$

}

Vertausche die k–te Zeile mit der k_0–ten Zeile

k–ter Eliminationsschritt wie in Algorithmus 9.12.

}

Folgerung: $|l_{ik}| \leq 1 \quad \Longrightarrow \quad \kappa(I - G_k) \leq 4 \quad \Longrightarrow \quad \kappa(R) \leq 4^{n-1}\kappa(A)$

LR–Zerlegung mit Spaltenpivotsuche

Satz 9.25: Die Gaußsche Elimination mit Spaltenpivotsuche liefert eine Zerlegung

$$LR = PA$$

mit unterer Dreiecksmatrix L, oberer Dreiecksmatrix R und einer Permutationsmatrix P. PA unterscheidet sich von A also nur durch Vertauschung der Zeilen.

Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1+10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad PA = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \\ 1 & 1+10^{-14} & 0 \end{pmatrix}$$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \;, \quad b = Ax \;, \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Gaußschen Algorithmus mit Spaltenpivotsuche:

$$R = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} \;, \qquad \kappa_\infty(R) = 21$$

Numerisches Beispiel

gut konditioniertes System: $\kappa_\infty(A) = 32$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1+10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} , \quad b = Ax , \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Gaußschen Algorithmus mit Spaltenpivotsuche:

$$R = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} , \qquad \kappa_\infty(R) = 21$$

$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|} < 10^{-15}$ Lösung auf 15 gültigen Stellen!