

Der Gaußsche Algorithmus und Varianten

Vorlesung vom 19.1.18

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 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0!$)

{

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

for $j = k + 1 : n$ do

{

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

}

}

}

...und Rückwärtssubstitution

Gestaffeltes Gleichungssystem:

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

Algorithmus 9.13 (Rückwärtssubstitution)

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

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

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

Aufwand des Gaußschen Eliminationsverfahrens

Aufwandsmaß: Anzahl der Punktoperationen

Gaußsches Eliminationsverfahren:

$$\text{Aufwand des Eliminationsschritts: } = \frac{1}{3}(n^3 - n) + \frac{1}{2}(n^2 - n) = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

$$\text{Aufwand der Rücksubstitution: } \frac{1}{2}(n^2 + n) = \mathcal{O}(n^2)$$

$$\text{Gesamtaufwand: } \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

$$\text{Tridiagonalmatrizen: } 5n - 4 = \mathcal{O}(n)$$

$$\text{Cramersche Regel: } x_i = \frac{\det B_i}{\det A}, \quad B_i = (A_1, \dots, b, \dots, A_n), \quad i = 1, \dots, n$$

Invertierung von A :
(i) Berechnung von A^{-1} mit Hilfe einer LR-Zerlegung von A
(ii) $x = A^{-1}b$

Numerisches Beispiel

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

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = Ax, \quad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{0.142857} \\ \overline{0.0909090} \\ \overline{0.0769230} \end{pmatrix}$$

Lösung mit dem Gaußschen Algorithmus:

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.136621 \\ 0.0971445 \\ 0.0769230 \end{pmatrix} \quad \frac{\|x - \tilde{x}\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \approx 0.4 \cdot 10^{-2}$$

Von 15 gültigen Stellen sind höchstens noch 2 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: $\tilde{g}_i = \text{rd}(g_i)$

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

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

Wirklichkeit und Modell

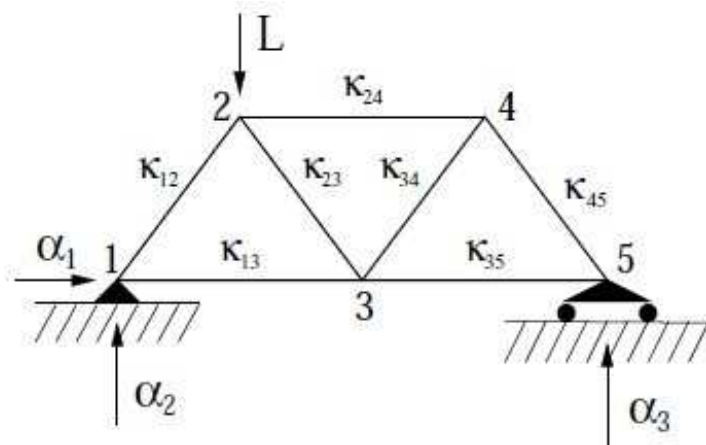


Eisenbahn



Modelleisenbahn

Wirklichkeit und Modell



Brücke

gesucht: Stabkräfte $K = (k_{ij})$

Modellannahmen:

starre Stäbe, reibungsfreie Verbindungen

Kräftegleichgewicht: $AK = F$

mathematisches Modell

Wirklichkeit und Modell

exakt: $Ax = b, b \neq 0$

gestört: $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \left(\frac{\|A - \tilde{A}\|}{\|A\|} + \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|} \right) + o(\|A - \tilde{A}\| + \|b - \tilde{b}\|)$$

Auswirkung von Störungen

exakt: $Ax = b, b \neq 0$

gestört: $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \left(\frac{\|A - \tilde{A}\|}{\|A\|} + \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|} \right)$$

linearisiertes Modell

Hochauflösendes Stabilitätsmodell (nur Elimination)

for $k = 1 : n - 1$ do

{

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

{

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

for $j = k + 1 : n$ do

{

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

}

}

}

Matrix-Schreibweise

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

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

Eliminationsmatrizen:

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

Effizientes Stabilitätsmodell I

$$\tilde{A}^{(k)} = \text{rd}((I - G_k)\tilde{A}^{(k-1)}), \quad A^{(0)} = A, \quad \tilde{b}^{(k)} = \text{rd}((I - G_k)b^{(k-1)}), \quad b^{(0)} = b$$
$$\tilde{x} = \text{rd}(\tilde{R}^{-1}\tilde{z}), \quad \tilde{R} = \tilde{A}^{(n-1)}, \quad \tilde{z} = \tilde{b}^{(n-1)}$$

Elementaroperationen:

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

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 $\tilde{R}^{-1}\tilde{z}$

Effizientes Stabilitätsmodell I

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

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

Satz 9.19 Es gelte $\|R - \tilde{R}\| \leq \|R\|/\kappa(R)$. Dann gilt

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

mit

$$\sigma_K = \prod_{k=1}^{n-1} \kappa_k, \quad \kappa_k = \kappa(I - G_k)$$

und

$$\sigma_E = 1 + \sum_{k=1}^{n-2} \kappa_{k+1} \cdots \kappa_{n-1} = 1 + (\kappa_{n-1}(1 + \kappa_{n-2}(1 + \cdots \kappa_3(1 + \kappa_2))) \cdots).$$

Effizientes Stabilitätsmodell I

Beweis:

Lemma 9.18 Es gilt:

$$\frac{\|R - \tilde{R}\|_\infty}{\|R\|_\infty} \leq \sigma_E \text{eps} + o(\text{eps}), \quad R = A^{(n-1)}$$

$$\frac{\|z - \tilde{z}\|_\infty}{\|z\|_\infty} \leq \sigma_E \text{eps} + o(\text{eps}) \quad z = b^{(n-1)}$$

mit

$$\begin{aligned} \sigma_E &= 1 + \sum_{k=1}^{n-2} \kappa_{k+1} \cdots \kappa_{n-1} \\ &= 1 + (\kappa_{n-1}(1 + \kappa_{n-2}(1 + \cdots \kappa_3(1 + \kappa_2))) \cdots) \end{aligned}$$

Effizientes Stabilitätsmodell II

$$A^{(k)} = (I - G_k)A^{(k-1)}, \quad A^{(0)} = A, \quad b^{(k)} = (I - G_k)b^{(k-1)}, \quad b^{(0)} = b$$
$$\tilde{x} = \tilde{R}^{-1}\tilde{z}, \quad \tilde{R} = \text{rd}(A^{(n-1)}), \quad \tilde{z} = \text{rd}(b^{(n-1)})$$

Weitere Vereinfachung:

- exakte Auswertung des gesamten Eliminationsschritts

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

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leq 2\kappa(R)\text{eps} + o(\text{eps}) \leq 2\kappa(A)\sigma_K\text{eps} + o(\text{eps})$$

Beweis: Satz 9.7

Abschätzung der Kondition von R

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

Satz: Es gilt

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

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

Numerisches Beispiel

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

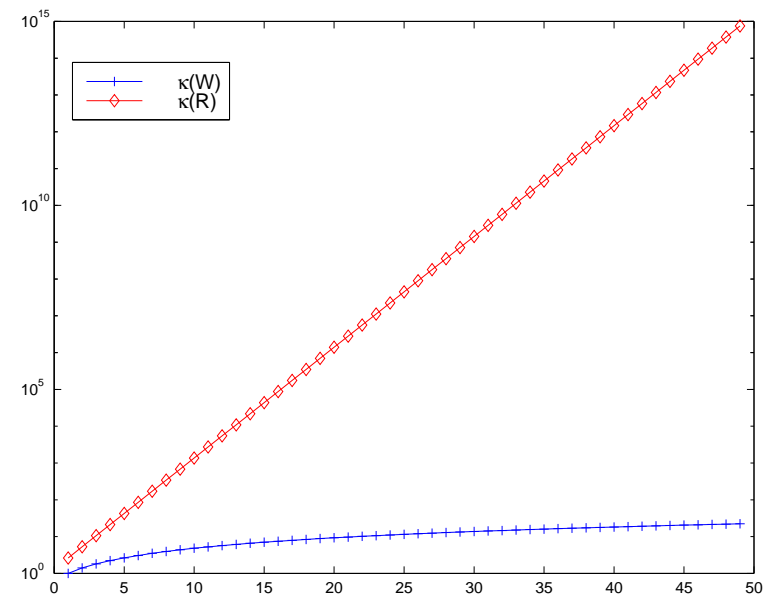
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = Ax, \quad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix}$$

Lösung mit dem Gaußschen Algorithmus: $\frac{\|x - \tilde{x}\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \approx 0.4 \cdot 10^{-2}$

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

Beispiel: Die Wilkinson–Matrix W_n

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



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

Algorithmische Konsequenzen

Satz 9.20:

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

Folgerungen:

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

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

}

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

k -ter Eliminationsschritt wie in Algorithmus 9.12.

}

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

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: $\kappa_{\infty}(A) = 32$

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

Gaußschen Algorithmus mit Spaltenpivotsuche:

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

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