Computerorientierte Mathematik I

14. Vorlesung

Carsten Gräser

Freie Universität Berlin

31.01.2020

Freie Universität Berlin

Rückblick: Vorlesung vom 24.12.2019

Der Gaußsche Algorithmus und Varianten

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: Löse das lineare Gleichungssystem $Ax = b$.

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

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

Freie Universität Berlin

Problem: Löse das lineare Gleichungssystem $Ax = b$.

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

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.

Gaußsche Elimination

for $k = 1$ to $n-1$ **do**
    for $i = k+1$ to n **do**
        $\ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ {Nur erlaubt, wenn $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$!}
        $b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \ell_{ik} b_k^{(k-1)}$
        $a_{ik}^{(k)} = 0$
        for $j = k$ to n **do**
            $a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \ell_{ik} a_{kj}^{(k-1)}$
        end for
    end for
end for

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):

1: $x_n = \frac{1}{a_{nn}^{(n-1)}} b_n^{(n-1)}$
2: **for** $i = n-1$ to 1 **do**
3: $\quad x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(n-1)}} \left(b_i^{(n-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(n-1)} x_j \right)$
4: **end for**

Aufwand des Gaußschen Eliminationsverfahrens

Aufwandsmaß: Anzahl der Punktoperationen

Gaußsches Eliminationsverfahren

- Eliminationsschritts: $\frac{1}{3}\left(n^3 - n\right) + \frac{1}{2}\left(n^2 - n\right) = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}\left(n^2\right)$
- Rückwärtssubstitution $\frac{1}{2}\left(n^2 + n\right) = O(n^2)$
- Gesamtaufwand: $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}\left(n^2\right)$.
- Tridiagonalmatrizen: $5n - 4 = O(n)$

Cramersche Regel: $x_i = \frac{\det B_i}{\det A}, \quad B_i = (A_1, \ldots, b, \ldots, A_n)$

Invertierung von A: Berechne A^{-1} aus LR-Terlegung, $x = A^{-1}b$.

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

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-14} & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \qquad b = Ax, \qquad x = \begin{pmatrix} 1/7 \\ 1/11 \\ 1/13 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.\overline{142857} \\ 0.0\overline{909090} \\ 0.0\overline{769230} \end{pmatrix}$$

Lösung mit dem Gaußschen Algorithmus:

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

Von 15 gültigen Stellen sind höchstens noch 2 übrig!

Algorithmus: Zerlegung des Lösungsoperators in Elementaroperationen

- 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: Kleinste Zahl σ mit der Eigenschaft

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

Wirklichkeit und Modell

- Exakt: $Ax = b, b \neq 0$
- Gestört: $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$
- Auswirkung von Störungen:

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

- Exakt: $Ax = b, b \neq 0$
- Gestört: $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$
- Linearisiertes Modell

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

Hochauflösendes Stabilitätsmodell (nur Elimination)

for $k = 1$ to $n-1$ **do**
    for $i = k+1$ to n **do**
        $\ell_{ik} = \mathrm{rd}\left(\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right)$ {Nur erlaubt, wenn $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$!}
        $b_i^{(k)} = \mathrm{rd}(b_i^{(k-1)} - \mathrm{rd}(\ell_{ik} b_k^{(k-1)}))$
        $a_{ik}^{(k)} = 0$
        for $j = k$ to n **do**
            $a_{ij}^{(k)} = \mathrm{rd}(a_{ij}^{(k-1)} - \mathrm{rd}(\ell_{ik} a_{kj}^{(k-1)}))$
        end for
    end for
end for

Freie Universität Berlin

Gaußelimination in Matrix-Schreibweise

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

Berechnung der Lösung

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

Eliminationsmatrizen

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

LR-Zerlegung

$$A = LR, \qquad R = \prod_{k=1}^{n-1}(I - G_{n-k})A, \qquad L = I + \sum_{k=1}^{n-1} G_k.$$

Effizientes Stabilitätsmodell I

Inexakte Gaußelimination

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

Inexakte Berechnung der Lösung

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

Elementaroperationen

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

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

Inexakte Gaußelimination

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

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

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

Satz

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

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

mit

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

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

Freie Universität Berlin

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

Inexakte Berechnung der Lösung

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

Weitere Vereinfachungen

- Exakte Auswertung des gesamten Eliminationsschritts

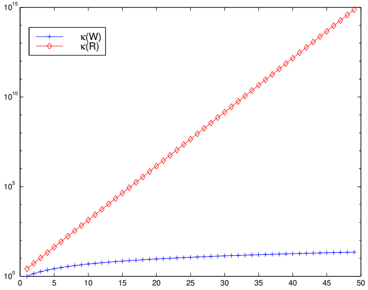
Satz

Es gelte $\|R - \tilde{R}\| / \|R\| \le 1/\kappa(R)$. *Dann gilt*

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

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 $\kappa_\infty(R_n)$

Rückblick: 1.Vorlesung vom 18.10.2019

Freie Universität Berlin

Fehlerkonzepte

- Modellfehler
- Diskretisierungsfehler
- Rundungsfehler

Kondition des Problems

- Kleine Ursache kann große Wirkung haben (Orkan Lothar)

Stabilität eines Algorithmus

Komplexität eines Problems

Effizienz eines Algorithmus

Darstellung natürlicher und ganzer Zahlen

Ziffernsysteme

- Axiomatische Charakterisierung der natürlichen Zahlen
- Ziffernsysteme: Definition und Beispiele
- Satz: Die MEnge aller Ziffernketten $\mathcal{D}(\mathcal{Z})$ ist abzählbar.
- Darstellung natürlicher Zahlen im Rechner

Positionssysteme

- Definition und Beispiele
- Dezimal- und Dualdarstellung natürlicher Zahlen
- Darstellung natürlicher Zahlen im Rechner

Ganze Zahlen

- Erweiterung der Zifferndarstellung von $\mathbb{N}$ auf $\mathbb{Z}$
- Dualdarstellung mit Vorzeichenbit
- Darstellung negativer ganzer Zahlen im Rechner: Zweierkomplement

Rückblick: 3.Vorlesung vom 01.11.2019

Darstellung rationaler und reeller Zahlen

Rationale Zahlen

- Rationale Zahlen als Brüche ganzer Zahlen
- Endliche und periodische q-adische Brüche
- Satz: Jede rationale Zahl ist ein periodischer q-adischer Bruch
- Eindeutigkeit: $0,\overline{9}$ statt $1 = 1,\overline{0}$
- Praktische Realisierung: Dynamische Ziffernzahl, Aufwand pro Addition problemabhängig (Hauptnenner, Kürzen)

Reelle Zahlen

- Reelle Zahlen als unendliche q-adische Brüche
- Satz: $\mathbb{R}$ ist nicht abzählbar.
- Folgerung: Es gibt keine Zifferndarstellung von $\mathbb{R}$
- Konsequenz: Numerisches Rechnen mit reellen Zahlen ist nicht möglich!

Fest- und Gleitkommazahlen

- Absoluter und relativer Fehler, Beispiele
- Definition von Festkommazahlen und Gleitkommazahlen, Beispiele

Rundungsfehler und Gleitkommaarithmetik

Runden und Rundungsfehler

- Der absolute Rundungsfehler ist nicht gleichmäßig beschränkt.
- Der relative Rundungsfehler ist gleichmäßig beschränkt.
- Obere Schranke: Maschinengenauigkeit $\mathrm{eps} = \mathrm{eps}(q, l)$

Praktische Realisierung von Gleitkommazahlen

- Endlicher Exponentenbereich bewirkt endlichen Zahlenvorrat: `float`,`double`

Zahlenmengen statt Zahlen

- Mengen aller Gleitkomma-Approximationen von $x \in \mathbb{R}$ mit relativem Fehler $\mathrm{eps}(q, l)$
- Mengen aller reellen Zahlen, die auf $\tilde{x} \in \mathbb{G}(q, l)$ gerundet werden.
- Folgerung: Gleichheitsabfragen von Gleitkommazahlen verboten!

Algebraische Eigenschaften

- Gleitkommaarithmetik, Verlust von Assoziativgesetz, Distributivgesetz, Invertierbarkeit
- Folgerung: Übliche Umformungen sind nicht mehr äquivalent.

Kondition

Relative Kondition der Grundrechenarten

- Addition, Multiplikation, Division sind gut konditioniert
- Subtraktion ist schlecht konditioniert (Auslöschung)
- Subtraktion fast gleicher Zahlen vermeiden!

Absolute Kondition der Funktionsauswertung

- Die absolute Kondition ist die kleinste Zahl κ_{abs} mit der Eigenschaft

$$|f(x_0) - f(x)| \le \kappa_{\text{abs}}(f, x_0)|x_0 - x| + o(|x_0 - x|) \qquad \text{für } x \to x_0$$

Sätze zur absolute Kondition

- Ist f differenzierbar in x_0, so gilt $\kappa_{\text{abs}}(f, x_0) = |f'(x_0)|$
- Ist f Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante L, so gilt

$$\kappa_{\text{abs}}(f, x_0) \le L.$$

- Für geschachtelte Funktionen $f(x) = g(h(x))$ gilt

$$\kappa_{\text{abs}}(f, x_0) \le \kappa_{\text{abs}}(g, h(x_0))\kappa_{\text{abs}}(h, x_0).$$

Rückblick: 6.Vorlesung vom 22.11.2019

Freie Universität Berlin

Kondition nichtlinearer Gleichungen

Problem: Finde x^*, so dass $g(x^*) = y^*$

- Definition der absoluten Kondition
- Auswirkungen von Fehlern in der rechten Seite y^* auf die Lösung
- Satz: Hinreichende Bedingung für Existenz von g^{-1} an der Stelle y^*

Äquivalentes Problem: Auswertung der Umkehrfunktion g^{-1} an y^*

- Satz: $\kappa_{\text{abs}} = |((g^{-1})'(y^*)| = |g'(x^*)|^{-1}$
- Definition und Berechnung des relativen Kondition (klar)
- Grenzen der Genauigkeit

Stabilitätsanalyse

Stabilität

- Motivation des Stabilitäts- und Algorithmusbegriffs, Abgrenzung zur Kondition
- Relative Stabilität von Algorithmen zur Funktionsauswertung
- Definition und Beispiele

Stabilitätsabschätzungen

- Kondition der Elementarfunktionen und Stabilität
- Grundrechenarten (Satz 7.9) und Elementarfunktionen (Satz 7.8)
- Schlecht konditionierte Elementarfunktionen vermeiden!
- Unvermeidbare, schlecht konditionierte Elementarfunktionen an den Anfang!
- Beispiel: Polynom-Desaster

Stabilitätsabschätzungen

Auswertungsbäume zur systematischen Stabilitätsabschätzung

- Auswertungsbaum: Knoten, gerichtete Kanten, Wurzel, Blätter
- Zerlegung in Teilbäume
- Von den Blättern zur Wurzel:
  rekursive Funktionsauswertung und Stabilitätsabschätzung
- Theoretische Grundlagen: Satz 7.6 und Satz 7.9
- Beispiele

Freie Universität Berlin

Stabilitätsabschätzungen und Effizienz

Auswertungsbäume zur systematischen Stabilitätsabschätzung

- Gesamtfehlerabschätzung

Summationsalgorithmen

- Rekursive Summation, Auswertungsbäume, Stabilitätsanalyse
- Hierarchische Summation

Komplexität und Aufwand

- Aufwand: Anzahl dominanter Operationen
- Landau-Symbol: $O(n)$, Beispiel
- Definition: Aufwand eines Algorithmus, Komplexität eines Problems
- Beispiel: Summationsalgorithmen (Aufwand, Komplexität)

Aufwand und Komplexität

Komplexität und Effizienz

- Aufwand: Anzahl dominanter Operationen (worst-case), Beispiel
- Landau-Symbole $O(n)$, Beispiel
- Definition: Aufwand eines Algorithmus, Komplexität eines Problems

Sortieren

- Aufwand: TumbSort, BubbleSort und MergeSort. Komlexität

Berechnung des größten gemeinsamen Teilers von $a \geq b$ $(ggT(a, b))$

- Naiver Algorithmus (Ausprobieren): Aufwand $O(b)$ Divisionen
- Variante (Ausprobieren rückwärts): Aufwand $O(b)$ Divisionen (worst-case!)
- <u>Strukturelle Einsicht:</u> Kongruenz (Gauß 1801), Rekursionssatz
- Euklidischer Algorithmus: Aufwand: $O(\log(b))$ Divisionen

Vektor- und Matrixnormen

Grundlagen

- Matrix-Vektor- und Matrix-Matrix-Produkt, lineare Räume, Beispiele

Problem

- Berechne die Lösung x von $Ax = b$ zu gegebenem $b \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$
- Ziel: Konditionsanalyse des Problems, Stabilitätsanalyse des Gaußschen Algorithmus

Normen auf linearen Räumen:

- Motivation: Erweiterung des Betrags von $\mathbb{R}$ auf $\mathbb{R}^n$ und $\mathbb{R}^{n\times n}$
- Definition: Axiomatisierung des Längenbegriffs, Beispiele: $\|\cdot\|_p$, $1 \le p \le \infty$ auf $\mathbb{R}^n$
- Zu einer gegebenen Vektornorm $\|\cdot\|$ gehört die Matrixnorm:

$$\|A\|_M = \sup_{x\in\mathbb{R}^n, x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

- Beispiel: Zur Maximumsnorm $\|\cdot\|_\infty$ gehört die Zeilensummen-Norm
- Definition: Äquivalenz von Normen
- Satz: In endlichdim. linearen Räumen sind alle Normen äquivalent

Konvergenz in normierten Räumen:

- Defintion: $x^{(\nu)} \to x \Leftrightarrow \|x - x^{(\nu)}\| \to 0 \quad$ für $\nu \to \infty$.
- Satz: Die Konvergenz in $\mathbb{R}^n$ und $\mathbb{R}^{n\times n}$ ist äquivalent zur komponentenweisen Konvergenz.

Existenz und Eindeutigkeit:

- Reguläre und singuläre Matrizen. Inverse Matrix.
- Die Regularität von A ist äquivalent zur Existenz eindeutig bestimmer Lösungen.

Störungen von Koeffizientenmatrix A und rechter Seite b:

- Normweiser absoluter und relativer Fehler.
- Definition: $\kappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$ heißt Kondition von A. Beispiele.
- Satz: $\kappa(A)$ ist der maximale Verstärkungsfaktor des rel. Fehlers bei Störungen von b.
- Satz: $\kappa(A)$ ist der maximale Verstärkungsfaktor des rel. Fehlers bei Störungen von A.
- Satz: $\kappa(A)$ ist der maximale Verstärkungsfaktor des rel. Fehlers bei Störungen von A und b.

Der Gaußsche Algorithmus und Varianten

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 $\mathcal{O}(n)$