

Numerisches Rechnen

Lineare Gleichungssysteme

M. Grepl

J. Berger & R. O'Connor

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2015/16

Vorlesungsinhalt

1. Fehleranalyse: Kondition, Rundungsfehler, Stabilität
 - a) $y = f(x)$, Eingabefehler $\Delta x \rightarrow$ Ausgabefehler Δy
 - b) Fehler aufgrund Gleitpunktdarstellung
 - c) Fehler (durch Algorithmus) \approx Fehler (durch Kondition)
2. **Lineare Gleichungssysteme, direkte Lösungsverfahren**
geg.: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$;
ges.: $x \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax = b$
3. **Lineare Ausgleichsrechnung**
geg.: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $m > n$;
ges.: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $x^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 3.1-3.5

- ▶ Kondition und Störungssätze
- ▶ Zeilenskalierung
- ▶ Dreiecksmatrizen
- ▶ Gauß-Elimination und LR-Zerlegung

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Wie ist das Problem $Ax = b$ konditioniert?
- ▶ Warum benötige ich Zeilenskalierung und Pivotisierung?
- ▶ Wie und weshalb funktioniert die LR-Zerlegung?

Motivation

- ▶ Diskretisierung von Integralgleichungen und gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen (z.B. Filtern verrauschter Bilder).
- ▶ In der linearen Ausgleichsrechnung entsteht auf natürliche Weise ein lineares Gleichungssystem (*Normalgleichungen*, siehe nächstes Kapitel).
- ▶ Zur Lösung eines *nichtlinearen* Gleichungssystems werden oft Linearisierungsverfahren, wie z.B. das Newton-Verfahren, eingesetzt. Bei so einem Verfahren ergibt sich eine Reihe von linearen Gleichungssystemen (siehe übernächstes Kapitel).

Wahl des Lösungsverfahrens hängt vom Problem ab

- ▶ dünnbesetztes vs. vollbesetztes Gleichungssystem
- ▶ Struktur (Tridiagonal-, Bandmatrizen)

Problemstellung

Notation: $\mathbb{R}^{m \times n}$ ist die Menge der Matrizen

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,n} \end{bmatrix}$$

mit Einträgen $a_{i,j} \in \mathbb{R}$.

Aufgabe

Zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b = (b_1, \dots, b_n)^T \in \mathbb{R}^n$ bestimme ein $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$\begin{array}{ccccccc} a_{1,1} x_1 & + & \cdots & + & a_{1,n} x_n & = & b_1 \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} x_1 & + & \cdots & + & a_{n,n} x_n & = & b_n \end{array}$$

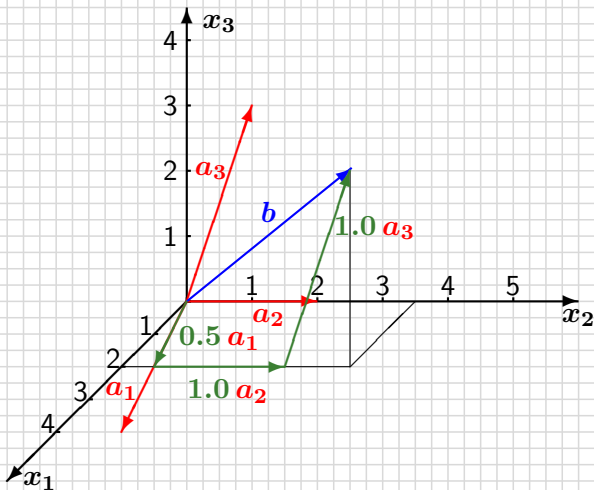
bzw. kurz $Ax = b$ erfüllt.

Geometrische Interpretation $Ax = b$ ($n = 3$)

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1.0 \\ 1.0 \end{bmatrix}$$



Bemerkung

Folgende Aussagen sind äquivalent für das System $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$:

- ▶ Das System hat für jedes $b \in \mathbb{R}^n$ eine eindeutige Lösung $x \in \mathbb{R}^n$.
- ▶ Die Matrix A hat vollen Rang n .
- ▶ Das *homogene* System $Ax = 0$ hat nur die triviale Lösung $x = 0$.
- ▶ Es gilt $\det A \neq 0$.

A heißt *regulär* oder *nichtsingulär*, wenn $\det A \neq 0$.

Annahme: Wir nehmen bei der Lösung linearer Gleichungssysteme stets an, dass $\det A \neq 0$ gilt.

Störung in der rechten Seite b

Satz 3.7

Sie $x + \Delta x$ die Lösung von $A(x + \Delta x) = b + \Delta b$. Dann gilt:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \underbrace{\|A^{-1}\| \|A\|}_{\kappa_{\|\cdot\|}(A)} \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

wobei

$$\kappa_{\|\cdot\|}(A) \equiv \|A^{-1}\| \|A\|$$

die (relative) **Konditionszahl der Matrix A** (bzgl. der Norm $\|\cdot\|$) ist.

Der relative Fehler der Lösung läßt sich durch das Vielfache

$$\kappa(A) = \kappa_{\|\cdot\|}(A) \equiv \|A^{-1}\| \|A\|$$

des relativen Fehlers der rechten Seite (Eingabedaten) abschätzen.

Störung in A und b

Satz 3.9

Sie $x + \Delta x$ die Lösung von

$$(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b.$$

Falls $\kappa(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} < 1$ gilt, folgt für den relativen Fehler

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right).$$

Beachte: Falls

$$\kappa(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} = \|A^{-1}\| \|\Delta A\| \ll 1,$$

beschreibt die Konditionszahl $\kappa(A)$ auch maßgeblich die Störungen in den übrigen Eingabedaten.

N3.1

Beispiel 3.11

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1.001 \\ 6 & 1.997 \end{pmatrix}, \text{ und } b = \begin{pmatrix} 1.999 \\ 4.003 \end{pmatrix},$$

sowie die gestörten Daten

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 6 & 1.997 \end{pmatrix}, \text{ und } \tilde{b} = \begin{pmatrix} 2.002 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Schätzen Sie den relativen Fehler in der Lösung ab.

1. Schritt: Berechne Konditionszahl von A

$$A^{-1} = \frac{-1}{0.015} \begin{pmatrix} 1.997 & -1.001 \\ -6 & 3 \end{pmatrix}$$

und damit erhalten wir

$$\|A^{-1}\|_{\infty} = 600, \|A\|_{\infty} = 7.997 \Rightarrow \kappa_{\infty}(A) = 4798.2.$$

Beispiel 3.11

2. Schritt: Abschätzen der Störungen

$$\Delta A = \tilde{A} - A = \begin{pmatrix} 0 & -0.001 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \|\Delta A\|_{\infty} = 0.001,$$

$$\Delta b = \tilde{b} - b = \begin{pmatrix} 0.003 \\ -0.003 \end{pmatrix} \Rightarrow \|\Delta b\|_{\infty} = 0.003.$$

3. Schritt: Aus Satz 3.9 ergibt sich somit als Schranke für den relativen Fehler der Lösung \tilde{x} von $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$.

$$\frac{\|\Delta x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \leq 10.49.$$

Mit exakter Lösung $x = (1, -1)^T$ von $Ax = b$ und gestörter Lösung $\tilde{x} = (0.2229, 1.3333)^T$ von $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ ergibt sich der tatsächliche relative Fehler

$$\frac{\|\Delta x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \approx 2.333.$$

Bemerkung 3.10

In einer Maschine mit Maschinengenauigkeit eps seien die Daten A und b mit relativen Fehlern $\leq \text{eps}$ behaftet, d.h.

$$\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \leq \text{eps} \quad \text{und} \quad \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \leq \text{eps}.$$

Nach Satz 3.9 ist wegen der Kondition des Problems $(A, b) \rightarrow x = A^{-1}b$ der unvermeidliche Fehler in der Lösung x gegeben durch

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} = \mathcal{O}(\kappa(A) \text{eps}).$$

N3.2

Residuum als Maß für Genauigkeit

Gegeben: – Gleichungssystem $Ax = b$
– Näherungslösung \tilde{x} .

Definition

Das Residuum \tilde{r} ist definiert als

$$\tilde{r} = b - A\tilde{x}.$$

Beachte: – Residuum ist ohne Kenntnis der Lösung x berechenbar
– $\tilde{r} = 0 \Leftrightarrow \tilde{x} = x$.

Frage: Wie aussagekräftig ist die Größe des Residuums in Bezug auf den tatsächlichen Fehler?

Für die Norm des Residuums im Vergleich zu der des Fehlers gilt:

$$\kappa(A)^{-1} \frac{\|\tilde{r}\|}{\|b\|} \leq \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\tilde{r}\|}{\|b\|}$$

\Rightarrow hängt wieder von der Kondition ab.

Beispiel 3.12

Sei $b = (3, 6)^T$ und $A = \begin{pmatrix} 3 & 1.001 \\ 6 & 1.997 \end{pmatrix}$ ($\kappa_\infty(A) = 4798.2$).

Exakte Lösung: $x = (1, 0)^T$.

Für die Annäherungen

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.99684 \\ 0.00949 \end{pmatrix}, \quad \hat{x} = \begin{pmatrix} 1.000045 \\ 0.000089 \end{pmatrix},$$

gilt

$$\|\tilde{r}\|_\infty = \|b - A\tilde{x}\|_\infty = 1.95 \times 10^{-5},$$

$$\|\hat{r}\|_\infty = \|b - A\hat{x}\|_\infty = 4.48 \times 10^{-4}.$$

Die Norm des Residuums für \tilde{x} ist also viel kleiner als für \hat{x} :

$$\|\tilde{r}\|_\infty \ll \|\hat{r}\|_\infty.$$

Der Fehler in \tilde{x} ist aber viel größer als in \hat{x} :

$$\|\tilde{x} - x\|_\infty = 9.49 \times 10^{-3} \gg \|\hat{x} - x\|_\infty = 8.90 \times 10^{-5}.$$

Zeilenskalierung

Motivation

Kondition einer Matrix ist verantwortlich für die Fehlerverstärkung
⇒ wesentlicher Faktor in der Lösung linearer Gleichungssysteme.

Frage: Kann man die Kondition einer Matrix verbessern?

⇒ Zeilenskalierung (Zeilenäquilibration), d.h. Multiplikation der i -ten Zeile der Matrix mit einer Zahl $d_i \neq 0$ ($1 \leq i \leq n$).

Forme das Gleichungssystem $Ax = b$ in ein äquivalentes Systems

$$\underbrace{D_z A}_{A_{\text{neu}}} x = \underbrace{D_z b}_{b_{\text{neu}}}$$

um, wobei D_z die Diagonalmatrix $D_z = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ bezeichnet.

Ziel: Wähle D_z so, dass die Kondition der Matrix (wesentlich) verbessert wird.

Zeilenskalierung

Sei D_z die Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen definiert durch

$$d_i = \left(\sum_{j=1}^n |a_{i,j}| \right)^{-1}$$

Für die skalierte Matrix gilt

$$\sum_{j=1}^n |(D_z A)_{i,j}| = 1 \quad \text{für alle } i,$$

also sind die Betragssummen aller Zeilen gleich eins. Eine Matrix mit dieser Eigenschaft heißt zeilenweise äquilibriert.

Die Skalierung mit D_z hat folgende

Optimalitätseigenschaft

$\kappa_\infty(D_z A) \leq \kappa_\infty(DA)$ für jede reguläre Diagonalmatrix D .

\Rightarrow Zeilenskalierung mit D_z liefert die minimale Konditionszahl bezüglich der Maximumnorm.

N3.3

Beispiel 3.14

Für

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 10000 \\ 50 & -60 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \xrightarrow{\sum_{j=1}^2 |a_{1,j}|} \text{10008} \\ \xrightarrow{\sum_{j=1}^2 |a_{2,j}|} \text{110} \end{array}$$

erhält man $\kappa_{\infty}(A) = 201.2$.

Mit der Diagonalmatrix

$$D_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{10008} & 0 \\ 0 & \frac{1}{110} \end{pmatrix}$$

ergibt sich

$$D_z A = \begin{pmatrix} 0.799 \times 10^{-3} & 0.999 \\ 0.455 & -0.545 \end{pmatrix}$$

und damit $\kappa_{\infty}(D_z A) = 3.40$.

Rechenaufwand

Gegeben seien Matrizen $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Wie hoch ist der Rechenaufwand zur Bestimmung von

- ▶ Skalarprodukt $x^T y$: $2n - 1$ $\mathcal{O}(n)$
- ▶ Dyadisches Produkt $x y^T$: n^2 $\mathcal{O}(n^2)$
- ▶ Matrix-Vektor Produkt Ax : $2n^2 - n$ $\mathcal{O}(n^2)$
- ▶ Matrix-Matrix Produkt AB : $2n^3 - n^2$ $\mathcal{O}(n^3)$

Beachte

Bei der Zählung der Rechenoperationen in einem Algorithmus werden

- ▶ (traditionsgemäß) **nur Multiplikationen und Divisionen**, und
- ▶ nur Terme höchster Ordnung gezählt.

Beispiel 3.16

Löse das Gleichungssystem $Rx = b$, wobei

$$R = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Die spezielle Struktur von R (obere Dreiecksmatrix) erlaubt eine einfache Lösung:

$$x_3 = 4/2 = 2$$

$$x_2 = 1 - 3 \cdot 2 = -5$$

$$x_1 = \frac{1}{3}(0 - (-1)(-5) - 2 \cdot 2) = -3$$

\Rightarrow Rückwärtseinsetzen

Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

Definition

Eine Matrix $R = (r_{i,j})_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *obere Dreiecksmatrix*, falls

$$r_{i,j} = 0 \text{ für } i > j$$

gilt.

Allgemeiner Fall:

$$\begin{array}{ccccccc}
 r_{1,1} x_1 & + & r_{1,2} x_2 & + & \dots & + & r_{1,n} x_n & = & b_1 \\
 & & r_{2,2} x_2 & + & \dots & + & r_{2,n} x_n & = & b_2 \\
 & & & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & & & r_{n-1,n-1} x_{n-1} & + & r_{n-1,n} x_n & = & b_{n-1} \\
 & & & & & & & & r_{n,n} x_n & = & b_n.
 \end{array}$$

Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

Lösbarkeit

Da

$$\det R = r_{1,1} r_{2,2} \dots r_{n,n},$$

ist $Rx = b$ genau dann stets eindeutig lösbar, wenn alle Diagonaleinträge $r_{j,j}$, $j = 1, \dots, n$, von Null verschieden sind.

Vorgehen:

- ▶ Beginnend bei der letzten Gleichung

$$x_n = b_n / r_{n,n}.$$

- ▶ Einsetzen von x_n in die zweitletzte Gleichung

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - r_{n-1,n} x_n) / r_{n-1,n-1}.$$

- ▶ ...

Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

Rückwärtseinsetzen

Für $j = n, n-1, \dots, 2, 1$ berechne

$$x_j = \left(b_j - \sum_{k=j+1}^n r_{j,k} x_k \right) / r_{j,j},$$

wobei die Summe für $j = n$ leer ist und als Null interpretiert wird.

Analog: untere Dreiecksmatrix L

- ▶ $L = (l_{i,j})_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $l_{i,j} = 0$ für $i < j$
- ▶ Eindeutig lösbar, wenn $l_{j,j}$, $j = 1, \dots, n$, von Null verschieden
- ▶ Vorwärtseinsetzen

D:MV

Rechenaufwand

Für jedes $j = n - 1, \dots, 1$:

$n - j$ Multiplikationen / Additionen,

eine Division,

und für $j = n$ eine Division. Also insgesamt

- ▶ $\sum_{j=1}^{n-1} (n - j) = \frac{n(n - 1)}{2}$ Additionen / Multiplikationen,
- ▶ n Divisionen.

Rechenaufwand für Rückwärtseinsetzen

ca. $\frac{1}{2}n^2$ Operationen

Operation = Multiplikation oder Division.

Eigenschaften 3.18

- ▶ Das Produkt von oberen (unteren) Dreiecksmatrizen ist wieder eine obere (untere) Dreiecksmatrix.
- ▶ Die Inverse einer oberen (unteren) nichtsingulären Dreiecksmatrix ist wieder eine obere (untere) Dreiecksmatrix.
- ▶ Die Determinante einer Dreiecksmatrix ist gerade das Produkt aller Diagonaleinträge.
- ▶ Die Eigenwerte einer Dreiecksmatrix sind gerade die Diagonaleinträge.

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($\det A \neq 0$) und $b \in \mathbb{R}^n$, bestimme $x \in \mathbb{R}^n$ so dass

$$A x = b.$$

Vorgehensweise: Bestimme eine Faktorisierung (Zerlegung) von A , so dass das Gleichungssystem “leichter” lösbar ist.

Verfahren:

- ▶ **LR-Zerlegung:** $A = L R$, wobei L untere Dreiecksmatrix, R obere Dreiecksmatrix
- ▶ **Cholesky-Zerlegung:** $A = L D L^T$, wobei D Diagonalmatrix
- ▶ **QR-Zerlegung:** $A = Q R$, wobei Q orthogonale Matrix

Gauß-Elimination

Die bekannteste Methode, das System

$$A x = b \quad (\det A \neq 0)$$

auf Dreiecksgestalt zu bringen, ist die *Gauß-Elimination*.

$$A = A^{(1)}$$

\circledast	*	*
*	*	*
\vdots	\vdots			\vdots
\vdots	\vdots			\vdots
*	*	*

*	*	*
0	\circledast	*
\vdots	\vdots	$\tilde{A}^{(2)}$		\vdots
\vdots	\vdots			\vdots
0	*	*

*	*	*	...	*
0	*	*	...	*
0	0	\circledast	...	*
\vdots	\vdots	\vdots	$\tilde{A}^{(3)}$	\vdots
0	0	*	...	*

- ▶ Einträge der Matrix $A^{(k)}$ werden mit $a_{i,j}^{(k)}$ notiert.
- ▶ Eintrag $a_{k,k}^{(k)}$ (\circledast oben) heißt *Pivotelement*.
- ▶ In entsprechender Weise ist auch die rechte Seite b umzuformen.

Beispiel 3.19.

Löse das Gleichungssystem $Ax = b$, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 4 & 0 & -3 & 1 \\ 6 & 1 & -1 & 6 \\ -2 & -5 & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ -8 \\ -16 \\ -12 \end{pmatrix}$$

mit Hilfe der Gauß-Elimination.

Wir benutzen die folgende Notation

$$\rightarrow (A | b) = \left(\begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 4 & 0 & -3 & 1 & -8 \\ 6 & 1 & -1 & 6 & -16 \\ -2 & -5 & 4 & 1 & -12 \end{array} \right)$$

Beispiel 3.19.

Gauß-Elimination:

- 1. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,1} \times \text{Zeile 1})$ von Zeile i

$$j = 1$$

$$\begin{array}{l} \rightarrow \\ \ell_{2,1} = \frac{4}{2} \\ \ell_{3,1} = \frac{6}{2} \\ \ell_{4,1} = \frac{-2}{2} \end{array} \left(\begin{array}{cccc|c} \textcolor{red}{2} & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 4 & 8 & -3 & -19 \\ 0 & -6 & 1 & 4 & -11 \end{array} \right)$$

- 2. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,2} \times \text{Zeile 2})$ von Zeile i

$$\begin{array}{l} j = 2 \\ \rightarrow \\ \ell_{3,2} = \frac{4}{2} \\ \ell_{4,2} = \frac{-6}{2} \end{array} \left(\begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & \textcolor{red}{2} & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 10 & -11 & -41 \end{array} \right)$$

Beispiel 3.19.

- 3. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,3} \times \text{Zeile } 3)$ von Zeile i

$$\begin{array}{l}
 j = 3 \\
 \rightarrow \\
 \ell_{4,3} = \frac{10}{2}
 \end{array}
 \left(\begin{array}{cccc|c}
 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\
 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\
 0 & 0 & \color{red}{2} & 7 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & -46 & -46
 \end{array} \right) = (R | c)$$

Wegen

$$Ax = b \Leftrightarrow Rx = c$$

liefert Rückwärtseinsetzen die Lösung

$$x = \left(-\frac{9}{2}, \quad 2, -3, \quad 1\right)^T.$$

Gauß-Elimination ohne Pivotisierung

- Bestimme $(A | b) \rightarrow (R | c)$
- Löse $Rx = c$

Beispiel 3.22.

Für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 4 & 0 & -3 & 1 \\ 6 & 1 & -1 & 6 \\ -2 & -5 & 4 & 1 \end{pmatrix}$$

gilt

$$A = L R,$$

wobei

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 5 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 0 & 2 & 3 & -5 \\ 0 & 0 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & -46 \end{pmatrix}$$

die bei der Gauß-Elimination berechneten Dreiecksmatrizen sind.

N3.4

B3.1

Zusammenfassung

Ein bemerkenswertes “Nebenprodukt” der Gauß-Elimination ist also eine *Faktorisierung* von A in ein Produkt einer normierten unteren Dreiecksmatrix L und oberen Dreiecksmatrix R .

Satz 3.21.

Sind im Gauß-Algorithmus stets alle Pivotelemente ungleich null, dann erhält man

$$A = LR,$$

wobei R eine obere Dreiecksmatrix und L eine normierte untere Dreiecksmatrix ist.

N3.5

D:ML

Frage:

- ▶ Was passiert, wenn das Pivotelement identisch null ist?
- ▶ Was passiert, wenn das Pivotelement “sehr klein” ist?

B3.2

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

- ▶ Ein verschwindendes Pivotelement bedeutet nicht, dass das lineare Gleichungssystem keine Lösung besitzt.
- ▶ Bei verschwindendem Pivotelement ist das Vertauschen von Zeilen notwendig.
- ▶ Selbst wenn das Pivotelement ungleich null, ist eine Vertauschung von Zeilen angebracht, um die Stabilität der Gauß-Elimination (bzw. LR-Zerlegung) zu verbessern.
- ▶ Als Pivotelement wählt man das *betragsgrößte* Element der jeweiligen Spalte.
- ▶ Da man das j -te Pivotelement in der j -ten Spalte sucht, nennt man diesen Vertauschungsvorgang *Spaltenpivotisierung*. Die Matrix sollte zuvor äquilibriert werden.

Beispiel 3.23.

Löse das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 0.00031 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -7 \end{pmatrix}.$$

Mit $l_{2,1} = 1/0.00031$ ergibt die Gauß-Elimination

$$(R | c) = \left(\begin{array}{cc|c} 0.00031 & 1 & -3 \\ 0 & 1 - \frac{1}{0.00031} & -7 - \frac{-3}{0.00031} \end{array} \right),$$

und bei 4-stelliger Rechnung schließlich

$$(R | c) = \left(\begin{array}{cc|c} 0.00031 & 1 & -3 \\ 0 & -3225 & 9670 \end{array} \right).$$

Rückwärtseinsetzen liefert dann ...

Beispiel 3.23.

$$\tilde{x}_1 \approx -6.452, \quad \tilde{x}_2 \approx -2.998.$$

Exakte Rechnung ergibt sich allerdings

$$x_1 = -4.00124\dots, \quad x_2 = -2.998759\dots,$$

d.h., \tilde{x}_1 ist auf keiner Stelle korrekt.

Dieses Ergebnis ist *unakzeptabel*, weil die Kondition des Problems sehr gut ist: $\kappa_\infty(A) = 4.00$.

Nach Spaltenpivotisierung mit 4-stelliger Rechnung erhält man

$$(R | c) = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & -7 \\ 0 & 0.9997 & -2.998 \end{array} \right)$$

und damit

$$x_1 \approx -4.001, \quad x_2 \approx -2.999,$$

also völlig akzeptable Werte.

Spaltenpivotisierung

Ziel: Vertauschen der Zeilen in Matrix A während LR-Zerlegung.

Fragen

1. Möglich durch Matrix-Matrix-Multiplikation (vgl. Elimination)?
2. Auswirkung auf die LR-Zerlegung?

1. Permutationsmatrix: Die Permutationsmatrix

$$P_\pi : (e^{\pi(1)} \ e^{\pi(2)} \ \dots \ e^{\pi(n)})^T.$$

entsteht aus der Einheitsmatrix durch Vertauschen der Zeilen gemäß der Permutation $\pi \in S_n$, wobei

- ▶ e^i den i -ten Basisvektor bezeichnet, und
- ▶ S_n die Permutationen auf der Menge $\{1, \dots, n\}$ bezeichnet.

Beispiel: $\pi : \{1, 2, 3\} \rightarrow \{1, 2, 3\}$ mit $\pi(1) = 3$, $\pi(2) = 1$, $\pi(3) = 2$ (oder $\pi = (3, 1, 2)$) ist eine Permutation in S_3 .

Permutationsmatrix

Wir bezeichnen mit $P_{i,k}$ die Permutationsmatrix, die durch Vertauschen der i -ten und k -ten Zeile der Einheitsmatrix I entsteht.

Beispiel: für $n = 4$, $i = 2$, $k = 4$ erhält man

$$P_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es gelten die folgenden Resultate

$$\det P_{i,k} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = k, \\ -1 & \text{für } i \neq k, \end{cases}$$

und

$$P_{i,k}^{-1} = P_{i,k}^T.$$

Permutationsmatrix: Beispiel

Berechne die folgenden Matrix-Produkte für

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \textcolor{red}{a} & 1 & 0 \\ \textcolor{green}{b} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$P_{2,3} A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \textcolor{green}{b} & 0 & 1 \\ \textcolor{red}{a} & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der 2. und 3. Zeile}$$

$$A P_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \textcolor{red}{a} & 0 & 1 \\ \textcolor{green}{b} & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der 2. und 3. Spalte}$$

$$P_{2,3} A P_{2,3}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \textcolor{green}{b} & 1 & 0 \\ \textcolor{red}{a} & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der Einträge } a \text{ und } b$$

LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung

Gauß-Elimination *mit* Spaltenpivotisierung ist für *jede* nicht-singuläre Matrix durchführbar und es gilt folgende Verallgemeinerung von Satz 3.21.

Satz 3.25.

Zu jeder nichtsingulären Matrix A existiert eine Permutationsmatrix P , eine (dazu) eindeutige untere normierte Dreiecksmatrix L , deren Einträge sämtlich betragsmäßig durch eins beschränkt sind, und eine eindeutige obere Dreiecksmatrix R , so dass

$$PA = LR.$$

Die Matrizen P , L und R ergeben sich aus der Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung.

N3.6

Durchführung der LR-Zerlegung

Skalierung und Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

- ▶ Bestimme die Diagonalmatrix

$$D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n),$$

so dass DA zeilenweise äquilibriert ist, d.h.

$$d_i = \left(\sum_{k=1}^n |a_{i,k}| \right)^{-1}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- ▶ Wende Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung auf DA an. Im j -ten Schritt der Gauß-Elimination wählt man diejenige Zeile als Pivotzeile, die das betragsmäßig größte Element in der ersten Spalte der $(n+1-j) \times (n+1-j)$ rechten unteren Restmatrix hat. Falls diese Pivotzeile und die j -te Zeile verschieden sind, werden sie vertauscht.

Aufwand

- ▶ Zeilensummenberechnung: $n(n - 1)$ Additionen;
- ▶ Berechnung der Skalierung: n Divisionen;
- ▶ Für $j = 1, 2, \dots, n - 1$
 - ▶ Berechnung der neuen Einträge in L : $(n - j)$ Divisionen;
 - ▶ Berechnung der neuen Einträge in R : $(n - j)^2$ Multiplik./Additionen

Dominierender Aufwand: $\sum_{j=1}^{n-1} (n - j)^2 = \sum_{j=1}^{n-1} j^2 \sim n^3/3.$

Rechenaufwand 3.29

LR-Zerlegung über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung kostet ca.

$$\frac{1}{3}n^3 \text{ Operationen.}$$

Die Skalierung (falls nötig) kostet nur $\mathcal{O}(n^2)$ Operationen.

Beispiel 3.30

D:ML

D:SC

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 0 \\ 2 & 2 & 2 \\ -2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow D = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \Rightarrow DA = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung:

1. Schritt:

 $DA \xrightarrow{\text{Vertauschung}}$

$$\begin{array}{ccc} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & 0 \end{array}$$

 $\xrightarrow{\text{Elimination}}$

$$\begin{array}{ccc} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \end{array}$$

2. Schritt:

 $\xrightarrow{\text{Vertauschung}}$

$$\begin{array}{ccc} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{array}$$

 $\xrightarrow{\text{Elimination}}$

$$\begin{array}{ccc} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{5} & \frac{3}{5} \end{array}$$

$$\text{Ergebnis: } L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{5} & 1 \end{pmatrix}, \text{ und } R = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}.$$

Man rechnet einfach nach, dass

$$LR = PDA$$

gilt, wobei

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix P ist das Produkt von $P_{2,3}$ und $P_{1,3}$.

N3.7

Merke

- ▶ Skalierung/Äquilibrierung verbessert die *Kondition* des Problems.
- ▶ Pivotisierung verbessert die *Stabilität* der Gauß-Elimination/LR-Zerlegung.

Anwendungen der LR-Zerlegung

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Matrix, die schon zeilenweise äquilibriert ist.
Sei für diese Matrix die LR-Zerlegung $PA = LR$ bekannt.

1. Lösen eines Gleichungssystems

Die Lösung von

$$Ax = b$$

ergibt sich über die Lösung zweier Dreieckssysteme

$$Ax = b \iff PAx = Pb \iff L \underbrace{Rx}_{=y} = Pb$$

1. Bestimme y durch Vorwärtseinsetzen aus $Ly = Pb$.
2. Berechne x aus $Rx = y$ durch Rückwärtseinsetzen.

Anwendungen der LR-Zerlegung

2. Mehrere rechte Seiten

Gesucht seien die Lösungen x^k des linearen Gleichungssystems

$$A x^k = b^k, \quad k = 1, \dots, K,$$

wobei A eine konstante Matrix ist und b^k , $k = 1, \dots, K$, verschiedene rechte Seiten sind (Bsp. Zeitdiskretisierung).

Vorgehen

- ▶ Bestimme (einmalig) LR-Zerlegung von A , d.h.

$$P A = L R$$

- ▶ Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen für jede rechte Seite

$$\begin{aligned} L y^k &= P b^k \\ R x^k &= y^k \end{aligned}$$

Aufwand: $\frac{1}{3}n^3 + Kn^2$ (vs. $K\frac{1}{3}n^3$ ohne LR-Zerlegung)

Anwendungen der LR-Zerlegung

3. Berechnung der Inversen

Sei $x^i \in \mathbb{R}^n$ die i -te Spalte der Inversen von A :

$$A^{-1} = (x^1 \ x^2 \ \dots \ x^n).$$

Aus $AA^{-1} = I$ folgt

$$Ax^i = e^i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Zur Berechnung der Inversen bietet sich folgende Strategie an:

- ▶ Bestimme die LR-Zerlegung $PA = LR$ über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung,
- ▶ Löse die Gleichungssysteme

$$LRx^i = Pe^i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Gesamtaufwand: etwa $\frac{4}{3}n^3$ Operationen.

Anwendungen der LR-Zerlegung

4. Berechnung von Determinanten

Aus $PA = LR$ folgt

$$\det P \det A = \det L \det R = \det R.$$

Wegen

$$\begin{aligned}\det P &= \det P_{n,r_n} \dots \det P_{n-1,r_{n-1}} \\ &= (-1)^{\# \text{Zeilenvertauschungen}},\end{aligned}$$

folgt

$$\det A = (-1)^{\# \text{Zeilenvertauschungen}} \prod_{j=1}^n r_{j,j}.$$

Anwendungen der LR-Zerlegung

5. Nachiteration

- ▶ Rechnerarithmetik: statt L , R erhält man Näherungen \tilde{L} , \tilde{R} .
- ▶ Lösung \tilde{x} ist daher nicht exakte Lösung von $Ax = L R x = b$.
- ▶ **Ziel der Nachiteration:** Näherung *iterativ* verbessern
- ▶ Zur Erinnerung: Sei $x^0 := \tilde{x}$, $r = r^0 := b - Ax^0$. Der Fehler $\delta^0 := x - x^0$ ist gerade die Lösung des *Defektsystems*
$$A\delta^0 = Ax - Ax^0 = b - Ax^0 = r^0.$$
- ▶ Verfahren:

Für $k = 0, 1, 2, \dots$, gegeben r^0 , berechne:

$$\tilde{L} y^k = r^k, \quad \tilde{R} \delta^k = y^k;$$

$$x^{k+1} := x^k + \delta^k;$$

$$r^{k+1} := b - A x^{k+1};$$

Zusammenfassung

- ▶ Die Kondition des Problems $Ax = b$ wird im wesentlichen durch die Konditionszahl $\kappa(A)$ der Matrix A beschrieben.
- ▶ Dreiecksmatrizen ergeben leicht lösbare Systeme: Aufwand ca. $\frac{1}{2}n^2$ Operationen.
- ▶ Zeilenskalierung vs. Pivotisierung
 - ▶ Skalierung/Äquilibration verbessert die *Kondition* des Problems.
 - ▶ Pivotisierung verbessert die *Stabilität* der Gauß-Elimination/LR-Zerlegung.
- ▶ LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung **N3.8**