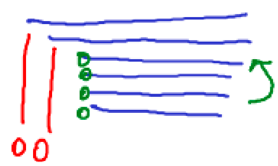
13. Numerische Lösung von LGS

▼ Arbeiten mit Pivotelementen

Als Konsequenz gilt allgemein, dass es zur Minimierung von Rundungsfehlern ratsam ist, diejenige Zeile (von der $i+1$–ten bis zur N–ten) zu verwenden, für die der Wert in der i–ten Spalte dem Betrag nach am größten ist. Das betragsgrößte Element der i-ten Spalte wird als Pivot–Element bezeichnet, der Vorgang des Aufsuchens des Pivot–Elementes und die Vertauschung der Zeilen als Pivotisierung.

Damit ergibt sich für die Umformung des LGS in die Diagonalform der folgende Ablauf:

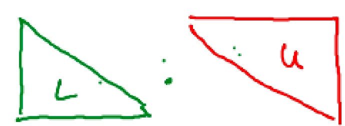


13.4. LU–Zerlegung

▼ Zerlegung der Matrix

Der Gauß-Algorithmus zerlegt in Matrix $\boldsymbol{A}$ in ein Produkt aus zwei eindeutig bestimmten Dreiecksmatrizen

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U}$$



- U ist die obere Dreiecksmatrix, die durch den Gaußalgorithmus entsteht
- Die untere Dreiecksmatric L besteht im Wesentlichen aus den unterwegs berechneten Eliminationskoeffizienten

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \ell_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \ell_{N-1,1} & \dots & \ell_{N-1,N-2} & 1 & 0 \\ \ell_{N1} & \ell_{N2} & \dots & \ell_{N,N-1} & 1 \end{pmatrix}$$

Modifiziert man beim Programmieren den Algorithmus also so, dass man die Eliminationskoeffizienten ℓ_{ik} anstelle von $a_{ik} = 0$ einträgt, so entsteht unterhalb der Hauptdiagonalen von $\boldsymbol{A}$ eine untere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{L}$, bei der lediglich die Hauptdiagonalelemente (Einsen) fehlen:

$$\begin{array}{ccccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,N-1} & a_{1N} \\ \ell_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,N-1} & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \ell_{N-1,1} & \ell_{N-2,2} & \cdots & a_{N-1,N-1} & a_{N-1,N} \\ \ell_{N1} & \ell_{N2} & \cdots & \ell_{N,N-1} & a_{NN} \end{array}$$

▼ Lösung mit LU–Zerlegung

Die Lösung eines LGS $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ kann mit Hilfe dieser $\boldsymbol{LU}$–Zerlegung interpretiert werden als

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{L}\underbrace{\boldsymbol{Ux}}_{=:\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{b}$$

und mit

$$\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$$

entspricht die Lösung des LGS der Lösung von zwei gestaffelten Systemen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Ly} &= \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{Ux} &= \boldsymbol{y} \end{aligned}$$

Das erste System kann durch Vorwärtseinsetzen, das zweite durch Rückwärtseinsetzen gelöst werden.

Diese gestaffelte Lösung ist praktisch, wenn ein System mehrfach für verschiedene rechte Seiten gelöst werden soll. Die Zerlegung $\boldsymbol{LU}$ ist nämlich unabhängig von der rechten Seite.

1. Schritt: Zerlegung $\boldsymbol{LU}$ bestimmen (Rechenaufwand $\frac{1}{3}(N^3 - N)$ Operationen) — 1x
2. Schritt: Vorwärtseinsetzen, d.h. Lösung von $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ (Rechenaufwand $\frac{1}{2}(N^2 + N)$ Operationen)
3. Schritt: Rückwärtseinsetzen d.h. Lösung von $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ (Rechenaufwand $\frac{1}{2}(N^2 + N)$ Operationen)

für jede rechte Seite

▼ Lösung mit LU–Zerlegung mit Pivotisierung

Ist es aus Gründen der numerischen Stabilität erforderlich zu pivotisieren, so wird vor jeder Multiplikation mit $\boldsymbol{G}_k$ (s.o.) eine Vertauschungsmatrix eingeschaltet und insgesamt ergibt sich die Zerlegung

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$$

mit einer „Permutationsmatrix" $\boldsymbol{P}$, die Zeilen von $\boldsymbol{A}$ vertauscht.

Das Lösen erfolgt entsprechend in gestaffelter Form:

$$\boldsymbol{PAx} = \boldsymbol{Pb} = \boldsymbol{LUx}$$

führt auf die Einzel-Gleichungssysteme

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Ly} &= \boldsymbol{Pb} \\ \boldsymbol{Ux} &= \boldsymbol{y} \end{aligned}$$

Eine Permutationsmatrix kann man sich als Einheitsmatrix mit vertauschten Zeilen vorstellen, z.B. sind hier die 2. und 3. Zeile vertauscht

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & & 1 & & \\ & 1 & & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

In der neuen Matrix $\boldsymbol{PA}$ wird also die 2. Zeile von $\boldsymbol{A}$ zur 1., Die 3. Zeile wird 2., die 1. Zeile wird 3. Genau das bildet auch unser Vektor p ab, in dem wir uns in unserem Gauß-Programm die Vertauschung merken: $p(1) = 2$, $p(2) = 3$, $p(3) = 1 \ldots$

13.5. Einflüsse von Fehlern

13.6. Das Residuum

▼ Das Residuum

Setzt man eine Näherungslösung $\tilde{\boldsymbol{x}}$ in das Ausgangssystem $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ ein, so erhält man den Residuenvektor (das Residuum) als Differenz zur rechten Seite

$$\boldsymbol{r}(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$$

Ist

$$\boldsymbol{r}(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{0},$$

so ist $\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{x}}$ die exakte Lösung.

Aber: Die Größe des Residuums ist kein geeignetes Maß für die Güte einer Näherungslösung.

Vermutung: Liegt $\boldsymbol{r}(\tilde{\boldsymbol{x}})$ nahe beim Nullvektor, z.B. $\|\boldsymbol{r}(\tilde{\boldsymbol{x}})\| \ll 1 \Longrightarrow \tilde{\boldsymbol{x}}$ umso bessere Lösung, je mehr erfüllt.

Die Größe des Residuums ist kein Maß für die Güte einer Näherungslösung !

Begründung:

$$\boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{b} - \tilde{\boldsymbol{b}}$$

Wir brauchen also einen Zusammenhang zwischen dem relativen Fehler der Lösung

$$\frac{\|\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}$$

und dem relativen Fehler der rechten Seite

$$\frac{\|\boldsymbol{b} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}.$$

13.7. Die Kondition einer Matrix

▼ Konditionszahl

Satz 13.7 (Konditionszahl)

Es sei $\boldsymbol{A}$ nichtsingulär und $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}$. Nennt man

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) := \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\|$$

die Konditionszahl von $\boldsymbol{A}$, so gilt für den relativen Fehler der Lösung

$$\frac{1}{\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})} \frac{\|\boldsymbol{r}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \leq \frac{\|\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) \frac{\|\boldsymbol{r}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}.$$

rel. Fehler der Lösung

rel. Fehler Residuum

▼ Frage - Beispiel für Konditionszahl

Frage

Sei

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

Berechnen Sie die Konditionszahl

- bezüglich der Spaltensummennorm: $\operatorname{cond}_1(\boldsymbol{A})$
- bezüglich der Zeilensummennorm: $\operatorname{cond}_\infty(\boldsymbol{A})$

Konditionszahlen von

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

- bezüglich der Spaltensummennorm: $\operatorname{cond}_1(\boldsymbol{A})$

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\{4,6\} = 6, \quad \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_1 = \left|\frac{1}{-2}\right| \max\{7,3\} = \frac{7}{2}$$

$$\operatorname{cond}_1(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|_1 \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_1 = 6 \cdot \frac{7}{2} = 21$$

- bezüglich der Zeilensummennorm: $\operatorname{cond}_\infty(\boldsymbol{A})$

$$\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\{3,7\} = 7, \quad \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty = \left|\frac{1}{-2}\right| \max\{6,4\} = 3$$

$$\operatorname{cond}_\infty(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|_\infty \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty = 7 \cdot 3 = 21$$

▼ Empfindlichkeit der Näherungslösung gegenüber Änderungen in Matrix oder rechter Seite

Definition 13.8 (klein gegenüber einer Matrix)

Die Matrix $\Delta\boldsymbol{A}$ heißt klein gegenüber einer Matrix $\boldsymbol{A}$, wenn gilt

$$\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta\boldsymbol{A}\| = \operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) \cdot \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|} < 1.$$

Mit dieser Definition kann man nun Aussagen zur Empfindlichkeit der Näherungslösung gegenüber kleinen Änderungen in Matrix oder rechter Seite machen.

(Große Änderungen verfälschen das Ergebnis viel zu stark, darüber kann man dann gar nichts mehr aussagen.)

Satz 13.9 (Fehlerabschätzung)

Seien $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{y}$ (exakte) Lösungen der beiden linearen Gleichungssysteme

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

und

$$(\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$$

und sei $\Delta\boldsymbol{A}$ klein gegenüber $\boldsymbol{A}$. Dann gilt die Abschätzung

$$\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \frac{\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})}{1 - \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta\boldsymbol{A}\|} \left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|} + \frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \right)$$

relativer Fehler in der Lösung — Fehlerverstärkungsfaktor — rel. Fehler Matrix — rel. Fehler rechte Seite

Folgerung 13.10 (Fehlerabschätzungen)

Falls nur die Matrix oder nur die rechte Seite fehlerbehaftet sind, vereinfacht sich obige Abschätzung zu

$$\Delta\boldsymbol{A} = 0 \Longrightarrow \quad \frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) \frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

bzw.

$$\Delta\boldsymbol{b} = 0 \Longrightarrow \quad \frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \frac{\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})}{1 - \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta\boldsymbol{A}\|} \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}.$$

▼ Bedeutung der Konditionszahl

Die Konditionszahl von $\boldsymbol{A}$ spielt also auch bei a priori–Fragestellungen bezüglich Fehlern in den Ausgangsdaten und ihrer Auswirkungen auf die Lösung eine entscheidende Rolle als „Verstärkungsfaktor“ für maximale relative Fehler.

Wegen der Submultiplikativität der Matrixnormen gilt

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \geq \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}\| = \|\boldsymbol{I}\| \geq 1.$$

Definition 13.11 (gut/schlecht konditioniert)

Ein lineares Gleichungssystem mit Koeffizientenmatrix $\boldsymbol{A}$ heißt gut konditioniert, wenn $\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})$ relativ klein, schlecht konditioniert, wenn $\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})$ sehr groß ist.

Was heißt relativ klein?

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) \quad \text{relativ klein, falls} \quad \operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) \leq \sqrt{10^t}$$

für t = Anzahl der verfügbaren Dezimalstellen.

Man kann nicht erwarten, dass ein schlecht konditioniertes LGS durch eine numerisch besonders stabile Methode gut gelöst wird.