

Computerorientierte Mathematik II

Vorlesungen: Christoph Wehmeyer, Frank Noé

Übungszettel: Christoph Wehmeyer

Tutorien: Anna Dittus, Felix Mann, Dominik Otto

1. Anmeldung im KVV und im Campus Management!
2. Übungsbetrieb:
 1. Es gibt sechs Übungsgruppen (siehe Website für Termine und Tutoren); die Anmeldung dazu findet übers KVV (**<https://kvv.imp.fu-berlin.de>**) statt.
 2. Abgabe in Zweier-/Dreiergruppen ist erwünscht.
 3. Das erste Übungsblatt gibt es nächste Woche Freitag. Ausgabe jeweils Freitags auf der Website, die Abgabe ist jeweils Freitag in der darauffolgenden Woche bis 12:15 in die Tutorenfächer (A3).
 4. In der kommenden Woche findet noch kein regulärer Übungsbetrieb statt; Tutoren bieten aber zu den Übungszeiten kurze Matlab-Einführungen an.
3. Klausurtermine bis nächste Woche
4. Scheinkriterien:
 1. 50% der Theoriepunkte in den Übungen
 2. 50% der Programmierpunkte in den Übungen.
 3. Klausur bestanden
5. website - für weitere Informationen (siehe Link im KVV oder:)
<http://www.mi.fu-berlin.de/w/CompMolBio/Lectures>

Inhalt

1	Polynominterpolation	1
1.1	Lagrange-Darstellung und Newtonsche Darstellung	1
1.2	Das Restglied bei der Polynominterpolation	8
2	Numerische Quadratur	12
2.1	Vorbemerkungen zum Integrationsoperator	12
2.2	Globale Newton-Côtes-Formeln	14
2.3	Summierte Newton-Côtes-Formeln	17
3	Lineare gewöhnliche Differentialgleichungen	23
3.1	Motivation	23
3.1.1	Bewegung eines Teilchens	23
3.1.2	Radioaktiver Zerfall	24
3.2	Lineare Differentialgleichungen 1. Ordnung	25
3.2.1	Existenz, Eindeutigkeit, Kondition	25
3.2.2	Euler-Verfahren	28
3.2.3	Konvergenz der Euler-Verfahren	34
3.3	Systeme linearer Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten	36
3.3.1	Existenz, Eindeutigkeit, Kondition	36
3.3.2	Euler-Verfahren	43
4	Nichtlineare Gleichungssysteme	49
4.1	Fixpunktiteration	49
4.2	Newton-Verfahren	54

Zentrale Begriffe

Kondition eines Problems:

Kleine Ursache, große Wirkung (Orkan Lothar, Moleküldynamik).

Stabilität eines Algorithmus:

Keine Äquivalenz von Multiplikation und mehrfacher Addition.

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 $\mathcal{D}(\mathcal{Z})$ hat abzählbar viele Elemente.

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.

Positionssystem zur Basis q

Definition:

Ziffernmenge: $\mathcal{Z} = \{z_0, z_1, \dots, z_{q-1}\}$

Zuordnung:

$$n \mapsto \varphi(n) = z_n, \quad n = 0, \dots, q-1,$$

und im Falle $n > q-1$

$$n \mapsto \varphi(n) = z_{r_k} z_{r_{k-1}} \dots z_{r_0} \quad \text{mit} \quad n = \sum_{i=0}^k r_i q^i, \quad 0 \leq r_i \leq q-1$$

Diese Zifferndarstellung heißt **q -adische Darstellung**.

Darstellung rationaler und reeller Zahlen

Rationale Zahlen:

Rationale Zahlen als Brüche ganzer Zahlen.

q -adische Brüche, periodische q -adische Brüche. Beispiele.

Satz: Jede rationale Zahl ist als **periodischer** q -adischer Bruch darstellbar.

Eindeutigkeit durch $0, \overline{9}$ statt 1 .

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!

Festkommazahlen:

Absoluter und relativer Fehler. Beispiele.

Definition von Festkommazahlen und Gleitkommazahlen. Beispiele.

Absoluter und Relativer Fehler

absoluter Fehler: $|x - \tilde{x}|$.

Beispiel: $x = 1000$, $\tilde{x} = 999$: $|x - \tilde{x}| = 1$

relativer Fehler: $\frac{|x - \tilde{x}|}{|x|}$, $x \neq 0$.

Beispiel: $x = 1000$, $\tilde{x} = 999$: $|x - \tilde{x}|/|x| = 10^{-3}$

Gleitkommazahlen $\mathbb{G}(\ell, q)$

Definition: (Gleitkommazahlen) Jede in der Form

$$\tilde{x} = (-1)^s a \cdot q^e \quad (1)$$

mit Vorzeichenbit $s \in \{0, 1\}$, Exponent $e \in \mathbb{Z}$ und *Mantisse* $a = 0$ oder

$$a = 0, a_1 \cdots a_\ell = \sum_{i=1}^{\ell} a_i q^{-i}, \quad a_i \in \{0, \dots, q-1\}, \quad a_1 \neq 0,$$

darstellbare Zahl $\tilde{x}$ heißt **Gleitkommazahl** mit *Mantissenlänge* $\ell \in \mathbb{N}$, $\ell \geq 1$.

Die Menge all dieser Zahlen heißt $\mathbb{G}(q, \ell)$.

Die Darstellung (1) heißt **normalisierte Gleitkommadarstellung**.

Rundungsfehler und Gleitkommaarithmetik

Runden und Rundungsfehler:

Der absolute Rundungsfehler ist nicht gleichmäßig beschränkt.

Der relative Rundungsfehler ist gleichmäßig beschränkt.

Obere Schranke: Maschinengenauigkeit $eps = eps(q, \ell)$.

Praktische Realisierung von Gleitkommazahlen:

Endlicher Exponentenbereich bewirkt endlichen Zahlenvorrat. Datentypen: `double`, `float`.

Zahlenmengen statt Zahlen:

Menge aller Gleitkomma-Approximationen von $x \in \mathbb{R}$ mit relativem Fehler $eps(q, \ell)$.

Menge aller reellen Zahlen, die auf $\tilde{x} \in \mathbb{G}(q, \ell)$ gerundet werden.

Folgerung: Gleichheitsabfragen von Gleitkommazahlen verboten.

Algebraische Eigenschaften:

Gleitkommaarithmetik, Verlust von Assoziativität, Distributivität, Invertierbarkeit.

Folgerung: Übliche Umformungen sind nicht mehr äquivalent.

Fehlerabschätzung: Relativer Fehler

Satz: Es sei q eine gerade Zahl. Dann gilt

$$\frac{|x - \text{rd}(x)|}{|x|} \leq \frac{1}{2}q^{-(\ell-1)} =: \text{eps}(q, \ell) \quad \forall x \in \mathbb{R}, x \neq 0 .$$

Die Zahl $\text{eps}(q, \ell)$ heißt **Maschinengenauigkeit**.

IEEE 754 - Standard

	float	double
Länge in Bits	32	64
Vorzeichen s Bits	1	1
Exponent e Bits	8	11
Mantisse a Bits	23	52
Maschinengenauigkeit eps	$6,0 \cdot 10^{-8}$	$1,1 \cdot 10^{-16}$
$e_{\min}$ $e_{\max}$ $x_{\min}$ $x_{\max}$	- 126 128 $1,2 \cdot 10^{-38}$ $3,4 \cdot 10^{+38}$	- 1022 1024 $2,2 \cdot 10^{-308}$ $1,8 \cdot 10^{+308}$

Computer können nicht rechnen!

Äquivalente Umformungen in $\mathbb{R}$ sind in Gleitkommaarithmetik nicht äquivalent.

Beispiele:

keine binomische Formel:

$$(a \tilde{+} b) \tilde{*} (a \tilde{+} b) \neq a \tilde{*} a \tilde{+} 2 \tilde{*} a \tilde{*} b \tilde{+} b \tilde{*} b$$

kein Assoziativgesetz:

$$(a \tilde{*} a \tilde{+} 2 \tilde{*} a \tilde{*} b) \tilde{+} b \tilde{*} b \neq a \tilde{*} a \tilde{+} (2 \tilde{*} a \tilde{*} b \tilde{+} b \tilde{*} b)$$

Kondition

Relative Kondition der Grundrechenarten:

Addition, Multiplikation und Division liefern beruhigende Resultate.

Die Subtraktion ist hingegen beliebig schlecht konditioniert (**Auslöschung**).

Deshalb: **Subtraktion fast gleich großer Zahlen vermeiden.**

Absolute Kondition von Funktionsauswertungen:

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

$$|f(x_0) - f(x)| \leq \kappa_{\text{abs}} |x_0 - x| + o(|x_0 - x|) .$$

Sätze zur **absoluten** Kondition:

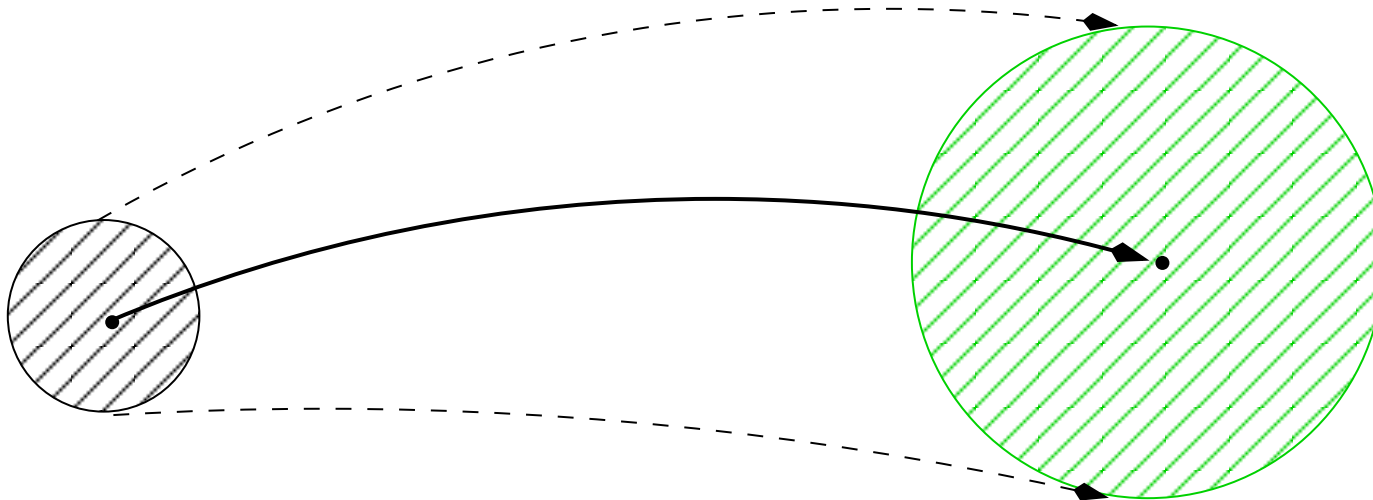
Ist f differenzierbar in x_0 , so gilt $\kappa_{\text{abs}} = |f'(x_0)|$.

Ist f Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante L , so gilt $\kappa_{\text{abs}} \leq L$.

Für geschachtelte Funktionen $f(x) = g(h(x))$ gilt $\kappa_{\text{abs}} \leq \kappa_{\text{abs}}(g, y_0) \kappa_{\text{abs}}(h, x_0)$.

Kondition

Auswirkung von Eingabefehlern auf das Ergebnis



Relative Kondition der Multiplikation

gegeben: $x, y \in \mathbb{R}$, $x, y \neq 0$.

Approximationen mit relativem Fehler ε :

$$\tilde{x} = x(1 + \varepsilon_x), \quad \tilde{y} = y(1 + \varepsilon_y), \quad \varepsilon = \max\{|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y|\}$$

Satz: Es gilt

$$\frac{|(x \cdot y) - (\tilde{x} \cdot \tilde{y})|}{|x \cdot y|} \leq 2 \varepsilon + \varepsilon^2.$$

Dominierender Fehleranteil: 2ε

Die relative **Kondition** ist der Verstärkungsfaktor κ von ε : $\kappa = 2$

Vernachlässigung des *Terms höherer Ordnung* $o(\varepsilon) = \varepsilon^2$

Relative Kondition der Division und Addition

Satz: (Division)

Es gilt
$$\frac{|(x/y) - (\tilde{x}/\tilde{y})|}{|x/y|} \leq 2 \varepsilon + o(\varepsilon) .$$

relative Kondition der Division: $\kappa = 2$.

Satz: (Addition)

Es sei $x, y > 0$. Dann gilt
$$\frac{|(x + y) - (\tilde{x} + \tilde{y})|}{|x + y|} \leq 1 \varepsilon .$$

relative Kondition der Addition: $\kappa = 1$.

Relative Kondition der Subtraktion

Satz: (Subtraktion)

Es sei $x, y > 0$. Dann gilt
$$\frac{|(x - y) - (\tilde{x} - \tilde{y})|}{|x - y|} \leq \left(\frac{|x| + |y|}{|x - y|} \right) \varepsilon .$$

relative Kondition der Subtraktion: $\kappa = \frac{|x| + |y|}{|x - y|}$

Auslöschung: Ist $x \approx y$, so wird $\kappa = \frac{|x| + |y|}{|x - y|}$ beliebig groß!!!

Nieder mit der Auslöschung

Subtraktion fast gleich großer Zahlen vermeiden!

Relative Kondition von Funktionsauswertungen

gegeben: Intervall $I \subset \mathbb{R}$, $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, $0 \neq x_0 \in I$, $f(x_0) \neq 0$

Problem: (*)

Auswertung von f an der Stelle x_0

Definition 3.6 (Relative Kondition)

Die **relative Kondition** κ_{rel} von (*) ist die kleinste Zahl mit der Eigenschaft

$$\frac{|f(x_0) - f(x)|}{|f(x_0)|} \leq \kappa_{\text{rel}} \frac{|x_0 - x|}{|x_0|} + o(|x_0 - x|) .$$

Liegt dies für keine reelle Zahl κ_{rel} vor, so wird $\kappa_{\text{rel}} = \infty$ gesetzt.

Stabilitätsanalyse

Stabilität:

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

Gesamtfehlerabschätzungen:

Satz 7.5: Der Gesamtfehler lässt sich abschätzen durch die Summe von Eingabefehler, verstärkt durch die Kondition, und Auswertungsfehler, verstärkt durch die Stabilität.

Stabilitätsabschätzungen:

Kondition der Elementarfunktionen und Stabilität:
Grundrechenarten (Satz 7.9) und Elementarfunktionen (Satz 7.8). Beispiele.
Schlecht konditionierte Elementarfunktionen vermeiden!
Unvermeidbare, schlecht konditionierte Elementarfunktionen an den Anfang!
Das Polynom-Desaster in MATLAB: Grobe Stabilitätsanalyse.

Auswertung eines Polynoms mit Matlab

Problem: Auswertung von $f(x) = x^3 + 12a^2x - 6ax^2 - 8a^3$
an der Stelle $x_0 = 10\,000\,000$ für $a = 4\,999\,999$.

```
>> a = 4999999;  
>> x = 10000000;  
>> f = x^3 + 12*a^2*x - 6*a*x^2 - 8*a^3
```

```
f =  
393216
```

```
>> f = (x-2*a)^3
```

```
f =  
8
```

Was ist hier schief gelaufen?

Algorithmen zur Funktionsauswertung

gegeben: $f : I \rightarrow \mathbb{R}$, $x_0 \in I \subset \mathbb{R}$

Ein **Algorithmus** ist eine Zerlegung

$$f(x_0) = g_n \circ g_{n-1} \circ \cdots \circ g_1(x_0)$$

der Funktion f in elementare Funktionen g_i , $i = 1, \dots, n$.

Beispiel:

$$f(x_0) = ax_0 + b = g_2 \circ g_1(x_0), \quad g_1(x_0) = ax_0, \quad g_2(y) = y + b$$

$$f(x_0) = ax_0 + b = a \left(x_0 + \frac{b}{a} \right) = h_2 \circ h_1(x_0), \quad h_1(x_0) = x_0 + \frac{b}{a}, \quad h_2(y) = ay$$

Relative Stabilität: Auswirkung von Gleitkommarechnung

Bezeichnung: $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ gegeben. Wir setzen $\|\varepsilon\| = \max_{i=1, \dots, n} |\varepsilon_i|$.

Definition 7.4: Die **relative Stabilität** σ_{rel} des Algorithmus'

$$f(x_0) = g_n \circ g_{n-1} \circ \dots \circ g_1(x_0) \neq 0$$

gegenüber Rundungsfehlern $\tilde{g}_i(y) = g_i(y)(1 + \varepsilon_i)$, $|\varepsilon_i| \leq \text{eps}$,
ist die kleinste Zahl σ_{rel} mit der Eigenschaft

$$\frac{|f(x_0) - \tilde{f}(\varepsilon, x_0)|}{|f(x_0)|} \leq \sigma_{\text{rel}} \|\varepsilon\| + o(\|\varepsilon\|) .$$

Liegt dies für keine reelle Zahl σ_{rel} vor, so wird $\sigma_{\text{rel}} = \infty$ gesetzt.

Gesamtfehler

Eingabefehler: $\frac{|x_0 - \tilde{x}_0|}{|x_0|}$ max. Rundungsfehler: $\|\varepsilon\|$

resultierender Gesamtfehler: $\frac{|f(x_0) - \tilde{f}(\varepsilon, \tilde{x}_0)|}{|f(x_0)|}$

Satz 7.5: Es sei $x_0 \neq 0$ und $f(x_0) \neq 0$. Dann gilt

$$\frac{|f(x_0) - \tilde{f}(\varepsilon, \tilde{x}_0)|}{|f(x_0)|} \leq \kappa_{\text{rel}}(x_0) \frac{|x_0 - \tilde{x}_0|}{|x_0|} + \sigma_{\text{rel}}(\tilde{x}_0) \|\varepsilon\| + o(|x_0 - \tilde{x}_0| + \|\varepsilon\|) .$$

$\sigma_{\text{rel}}(\tilde{x}_0)$: Stabilität der Funktionsauswertung an der Stelle $\tilde{x}_0$.

$\kappa_{\text{rel}}(x_0)$: rel. Kondition der Auswertung von f an der Stelle x_0 .

Aufwand und Komplexität

Komplexität und Effizienz

Aufwand: Anzahl dominanter Operationen (worst-case). Beispiel.

Landau-Symbol $O(n)$. Beispiel.

Definition: Aufwand eines Algorithmus. Komplexität eines Problems.

Summation

Aufwand: rekursive und hierarchische Summation. Komplexität.

Sortieren

Aufwand: TumbSort, BubbleSort und MergeSort. Komplexität.

Berechnung des größten gemeinsamen Teilers von $a \geq b$:

Naiver Algorithmus (Ausprobieren): Aufwand: $O(b)$ Divisionen.

Variante (Ausprobieren rückwärts): Aufwand: $O(b)$ Divisionen (worst-case!).

Strukturelle Einsicht: Kongruenzen (Gauß 1801), Rekursionssatz.

Euklidischer Algorithmus: Aufwand: $O(\log(b))$ Divisionen.

Komplexität und Effizienz

Wie lange muß ich auf das Ergebnis warten?

- a) Ist das Problem schwierig? (Komplexität)
- b) Ist mein Algorithmus zu langsam? (Effizienz)

Theoretische Informatik/Diskrete Mathematik:

Komplexitätstheorie, Berechenbare Funktionen

BubbleSort

Algorithmus: BubbleSort: Sukzessive Maximierung

Beispiel:

$$S = \{7, 1, 5\} , k = 3 : \quad SMax = \max\{7, 1, 5\} = 7, \quad iMax = 1$$

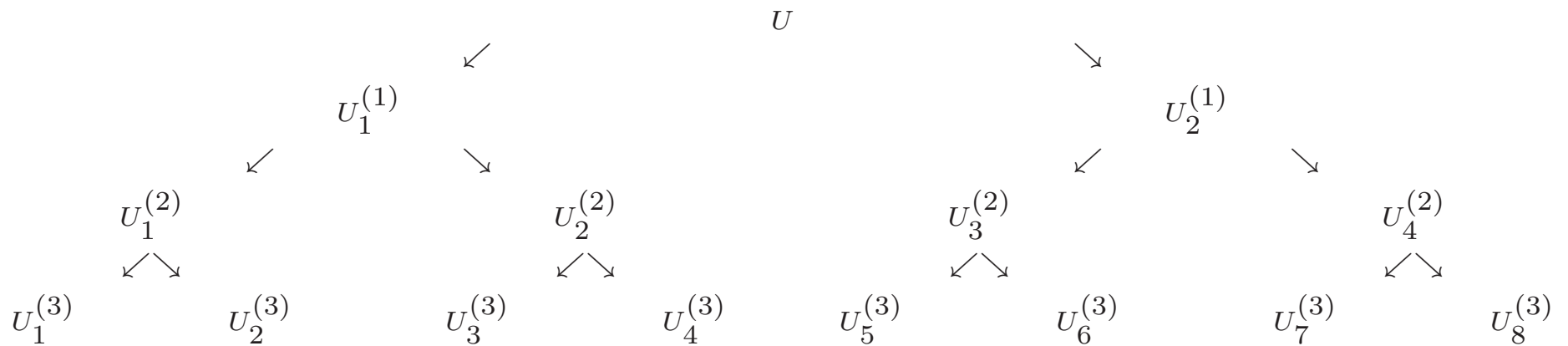
$$S = \{5, 1, 7\} , k = 2 : \quad SMax = \max\{5, 1\} = 5, \quad iMax = 1$$

$$S = \{1, 5, 7\}$$

Aufwand von BubbleSort:

$$(n - 1) + (n - 2) + \cdots + 1 = \sum_{k=1}^{n-1} k = \frac{1}{2}n(n - 1) = O(n^2) \ll O(n^n)$$

MergeSort



Aufwand von MergeSort: $T_{\text{MergeSort}}(n) \leq n \log_2 n$ optimal!

Vektor- und Matrixnormen

Grundlagen:

Matrix-Vektor- und Matrixprodukt. Lineare Räume. Beispiele.

Problem:

Berechne die Lösung x von $Ax = b$ zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$.

Ziele: Konditionsanalyse dieses Problems, Stabilitätsanalyse des Gaußschen Algorithmus.

Normen auf linearen Räumen:

Motivation: Erweiterung des Betrags von $\mathbb{R}$ auf $\mathbb{R}^n$ und $\mathbb{R}^{n,n}$.

Definition: Axiomatisierung des Längenbegriffs. Beispiele: $\|\cdot\|_p$, $1 \leq p \leq \infty$, auf $\mathbb{R}^n$.

Zu einer gegebenen Vektornorm $\|\cdot\|$ gehörige Matrixnorm:

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

Beispiel: Zur Maximumsnorm $\|\cdot\|_\infty$ gehört die Zeilensummenorm.

Beispiele: Vektornormen

$$x = (x_i)_{i=1}^n \in V = \mathbb{R}^n$$

Euklidische Norm:

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2}$$

p -Norm:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty$$

Maximumsnorm (∞ -Norm): $\|x\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|$

Die von der Maximumsnorm induzierte Matrixnorm

Satz 8.10 (Zeilensummennorm) Die Matrixnorm

$$\|A\|_{\infty} = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \quad A = (a_{ij})_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n,n},$$

gehört zur Maximumsnorm $\|\cdot\|_{\infty}$ auf $\mathbb{R}^n$.

Kondition linearer Gleichungssysteme

Konvergenz in normierten Räumen

Definition: $x^{(\nu)} \rightarrow x \iff \|x - x^{(\nu)}\| \rightarrow 0, \quad \text{für } \nu \rightarrow \infty$

Satz: Die Konvergenz in $\mathbb{R}^n$ und $\mathbb{R}^{n,n}$ ist äquivalent zur komponentenweise Konvergenz.

Existenz und Eindeutigkeit:

Reguläre und singuläre Matrizen. Inverse Matrix.

Die Regularität von A ist äquivalent zur Existenz eindeutig bestimmter 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, b .

Numerische Beispiele.

Die Kondition einer Matrix

Definition 9.2 Sei $A \in \mathbb{R}^{n,n}$. Ist A eine reguläre Matrix, so heißt

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

Kondition von A . Ist A singulär, so wird $\kappa(A) = \infty$ gesetzt.

Bemerkung: Es gilt

- $\kappa(A) \geq 1$ und $\kappa(I) = 1$
- $\kappa(AB) \leq \kappa(A)\kappa(B)$

Auswirkungen von Störungen von A und b

Satz 9.7 Sei x die Lösung von $Ax = b$, $b \neq 0$, und $\tilde{x}$ die Lösung des gestörten Systems

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

mit $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ und $\|A - \tilde{A}\| < \|A^{-1}\|^{-1}$ sowie $\tilde{b} \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt

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

Es existieren rechte Seiten $b, \tilde{b} \in \mathbb{R}^n$ und Koeffizientenmatrizen $A, \tilde{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$, so daß in dieser Abschätzung Gleichheit vorliegt.

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 $\mathcal{O}(n)$.

Gaußscher Algorithmus

eliminieren von x_1 :

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & | & 5 \\ 2 & 5 & 8 & | & -1 \\ 3 & 6 & 10 & | & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} -2 * 1. \text{ Zeile} \\ -3 * 1. \text{ Zeile} \end{array} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & | & 5 \\ 0 & -3 & -6 & | & -11 \\ 0 & -6 & -11 & | & -15 \end{pmatrix}$$

eliminieren von x_2 :

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & | & 5 \\ 0 & -3 & -6 & | & -11 \\ 0 & -6 & -11 & | & -15 \end{pmatrix} \xrightarrow{-2 * 2. \text{ Zeile}} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & | & 5 \\ 0 & -3 & -6 & | & -11 \\ 0 & 0 & 1 & | & 7 \end{pmatrix}$$

Gestaffeltes Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -11 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$R \quad x = z$$

Lösung durch Rückwärtssubstitution:

$$\begin{pmatrix} x_1 & +4x_2 & +7x_3 \\ & -3x_2 & -6x_3 \\ & & x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -11 \\ 7 \end{pmatrix} \implies x = \begin{pmatrix} -8/3 \\ -31/3 \\ 7 \end{pmatrix}$$

Gesetz oder Zufall?

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 10 \end{pmatrix}$$

$L \qquad \qquad R \qquad \qquad = \qquad A$

LR-Zerlegung

Lösung von $Ax = b$ mit LR -Zerlegung

Gauß–Elimination: Berechnung von $A = LR$ Aufwand: $\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$

Vorwärtssubstitution: Löse $Lz = b$ $\mathcal{O}(n^2)$

Rückwärtssubstitution: Löse $Rx = z$ $\mathcal{O}(n^2)$

Viele Systeme mit verschiedenen rechten Seiten:

$$Ax^j = b^j, \quad j = 1, \dots, J, \quad \text{Aufwand: } \frac{1}{3}n^3 + J \cdot \mathcal{O}(n^2)$$

Stabilitätsanalyse des Gaußsche Algorithmus'

LR-Zerlegung mit Spaltenpivotsuche:

Auswirkung von Auswertungsfehlern am Beispiel, Definition der Stabilität.

Stabilitätsanalyse in drei verschiedenen Auflösungen:

Konditionsverschlechterung durch Elimination.

Extrembeispiel: Wilkinsonmatrix.

Algorithmische Konsequenzen: Pivotsuche.

Abschätzung der Stabilität durch $\kappa(A)$ und n .

***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:

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