Numerik für Informatiker und Bioinformatiker

Daniel Weiß

SS 2012

Folgende Literatur bildet die Grundlage dieser Vorlesung:

- P. Deuflhard, A. Hohmann, *Numerische Mathematik 1, Eine algorithmisch orientierte Einführung*, de Gruyter, 2002[3].
- R.W. Freund, R.H.W. Hoppe, *Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1*, Springer, 2007[10].
- F. Locher, *Numerische Mathematik für Informatiker*, Springer-Verlag, 1991.
- Ch. Lubich, Vorlesung zur Numerik.
- J. Schropp, Vorlesung zur Algorithmischen Mathematik.

Kapitel 1

Lineare Gleichungssysteme

Problem: Für vorgegebene $(n \times n)$-Matrix A und rechte Seite $b \in \mathbb{R}^n$ finde Lösungsvektor $x \in \mathbb{R}^n$ mit

$$Ax = b \tag{1.1}$$

oder ausführlich

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}x_n & = & b_n, \end{array} \tag{1.2}$$

wobei wir mit a_{ij} das Element von A in der i-ten Zeile und j-ten Spalte bezeichnen.

Fragen: Wann hat das Problem (1.1) eine (eindeutige) Lösung? Wenn eine Lösung existiert, wie berechne ich diese?

Beispiel 1.
(i) *Der einfache Fall $n = 1$:*

$$ax = b$$

mit Lösung $x = \frac{b}{a}$ für $a \neq 0$.

(ii) *Das gestaffelte lineare Gleichungssystem*

$$\begin{array}{ccccccccc} r_{11}x_1 & + & r_{12}x_2 & + & \ldots & + & r_{1n}x_n & = & c_1 \\ & & r_{22}x_2 & + & \ldots & + & r_{2n}x_n & = & c_2 \\ & & & \ddots & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & r_{n-1,n-1}x_{n-1} & + & r_{n-1,n}x_n & = & c_{n-1} \\ & & & & & & r_{nn}x_n & = & c_n \end{array} \tag{1.3}$$

lässt sich im Fall $r_{ii} \neq 0$ für $i = 1, \ldots, n$ durch die so genannte Rückwärtssubstitution lösen: Lösen der letzten Gleichung ergibt:

$$x_n = \frac{c_n}{r_{nn}}.$$

Lösen der vorletzten Gleichung:

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

Allgemein gilt:

$$x_i = \left(c_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij}x_j\right)/r_{ii} \tag{1.4}$$

für $i = n, n-1, ..., 1.$

Satz 1. *(Existenz einer eindeutigen Lösung) Das Problem* (1.1) *besitzt genau dann eine eindeutige Lösung* x^**, wenn* A *invertierbar ist. Die Lösung ist in diesem Fall gegeben durch*

$$x^* = A^{-1}b.$$

Wiederholung: Eine Matrix quadratische A heißt invertierbar, falls A^{-1} existiert mit

$$A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Beispiel 2.

(i) *Das Gleichungssystem*

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

besitzt die eindeutige Lösung

$$x^* = \frac{1}{14}\begin{pmatrix} 5 \\ -3 \end{pmatrix}.$$

(ii) *Das Gleichungssystem*

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

besitzt offenbar keine Lösung.

(iii) *Das Gleichungssystem*

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

besitzt unendlich viele Lösungen:

$$\frac{1}{14}\begin{pmatrix} 5 \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix},\ \lambda \in \mathbb{R}.$$

1.1 Gaußsches Eliminationsverfahren

Problem: Löse $Ax = b$, wobei A invertierbar ist.

Motivation des Gaußschen Eliminationsverfahrens an einem Beispiel:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 4 & -1 \\ 3 & 0 & 5 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}}_{=:A} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Erstes Ziel: Elimination der Variablen x_1 aus den unteren beiden Gleichungen. Diese "Zeilenoperationen" können durch Multiplikation des Gleichungssystems von links mit der Matrix

$$L_1 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

realisiert werden:

$$L_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & -1 \\ 0 & -12 & 8 \\ 0 & -6 & 3 \end{pmatrix}, \qquad L_1 b = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Da die Matrix L_1 invertierbar ist, sind die Lösungen des Gleichungssystems $Ax = b$ genau die Lösungen von $L_1 Ax = L_1 b$.
Nächstes Ziel: Elimination der Variablen x_2 aus der unteren Gleichung. Diese "Zeilenoperation" kann durch Multiplikation des bereits modifizierten Gleichungssystems $L_1 Ax = L_1 b$ von links mit der Matrix

$$L_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

realisiert werden. Wir finden insgesamt:

$$L_2 L_1 A = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 4 & -1 \\ 0 & -12 & 8 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{=:R} \qquad L_2 L_1 b = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}}_{=:c}.$$

Das Gleichungssystem $Rx = c$ kann nun durch Rückwärtssubstitution gelöst werden (vgl. System (1.3) mit Lösung (1.4)).

Idee des Gaußschen Eliminationsverfahrens

Wir wollen das Gleichungssystem (1.2) in ein gestaffeltes System der Form (1.3) umformen. Erster Schritt: Wir lassen die erste Zeile unverändert und eliminieren die Variable x_1 in den restlichen Zeilen, d.h. wir ersetzen die Zeile i durch

$$(\text{Zeile } i) - \frac{a_{i1}}{a_{11}} \cdot (\text{Zeile } 1), \qquad a_{11} \neq 0,$$

für $i = 2, ..., n$. Wegen der Invertierbarkeit von A lässt sich nach einem eventuellen Zeilentausch $a_{11} \neq 0$ immer garantieren. Das Element a_{11} heißt *Pivotelement*. Wir erhalten

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ & & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array} \tag{1.5}$$

mit $b_1^{(1)} = b_1$ und $a_{1j}^{(1)} = a_{1j}$ für $j = 1, ..., n$ (die erste Zeile bleibt unverändert) und

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j} \\ b_i^{(1)} &= b_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}} b_1 \end{aligned}$$

für $i, j = 2, ..., n$. Kennen wir nun die Lösung $(x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}}$ des reduzierten Systems (System (1.5) ohne die erste Gleichung), so lässt sich x_1 mit Hilfe der ersten Gleichung in (1.5) bestimmen.
Wir wenden dasselbe Verfahren auf das reduzierte System an und erhalten so rekursiv ein gestaffeltes System:

$$(\underbrace{A^{(0)}}_{:=A}, \underbrace{b^{(0)}}_{:=b}) \to (A^{(1)}, b^{(1)}) \to (A^{(2)}, b^{(2)}) \to \ldots \to (\underbrace{A^{(n-1)}}_{=:R}, \underbrace{b^{(n-1)}}_{=:c})$$

Konkret gilt:

$$A^{(k)} \; = \; L_k P_k A^{(k-1)}, \qquad b^{(k)} \; = \; L_k P_k b^{(k-1)}.$$

Hier ist P_k eine *Permuationsmatrix*, welche im Fall $a_{kk}^{(k)} = 0$ (oder bei bestimmter Pivotwahl, s.u.) zwei Zeilen vertauscht und L_k die *Frobenius-Matrix*

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

(alle unbestimmten Einträge sind 0) mit $l_{ik} := \frac{\bar{a}_{ik}^{(k)}}{\bar{a}_{kk}^{(k)}}$, wobei $\bar{a}_{ij}^{(k)}$ die Elemente von $P_k A^{(k-1)}$ sind.

Permutationsmatrix: Die Spalten einer Permutationsmatrix bestehen aus Einheitsvektoren
$e_i = (0, \ldots, 0, \underbrace{1}_{\text{Stelle } i}, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$, wobei jeder Enheitsvektor genau einmal auftritt. z.B.

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

Daher folgt $|\det P| = 1$ und somit auch die Invertierbarkeit der Permutationsmatrizen.
Gilt $P = (e_1, \ldots, e_{j-1}, \underbrace{e_l}_{\text{Stelle } j}, e_{j+1}, e_j, \ldots, e_{l-1}, \underbrace{e_j}_{\text{Stelle } l}, e_{l+1}, \ldots, e_n)$, so bewirkt die Multiplikation mit P von links eine Vertauschung der j-ten und l-ten Zeilen:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ x_1 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

Das Gaußsche Eliminationsverfahren liefert:

Satz 2. *(über die LR-Zerlegung) Für jede invertierbare Matrix A existiert eine Permutationsmatrix P derart, dass eine Dreieckszerlegung*

$$PA = LR$$

möglich ist, wobei R eine obere Dreiecksmatrix und

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

eine untere unipotente Dreiecksmatrix ist. Eine Dreiecksmatrix heißt unipotent, falls die Elemente auf der Hauptdiagonalen alle geich 1 sind.

Wiederholung: Eine quadratische Matrix A heißt untere (obere) Dreiecksmatrix, falls

$$a_{ij} = 0 \text{ für } i < j \quad (i > j)$$

gilt.

Beweis: Das Gaußsche Eliminationsverfahren liefert

$$R \;=\; A^{(n-1)} \;=\; L_{n-1}P_{n-1}A^{(n-2)} \;=\; L_{n-1}P_{n-1} \cdot \ldots \cdot L_1P_1A.$$

Wir wollen nun die unipotenten und die Permutationsmatrizen "trennen" und fügen hierzu Identitäten der Form $I = P^{-1}P$ ein

$$\begin{aligned} R &= L_{n-1}P_{n-1}L_{n-2}\underbrace{P_{n-1}^{-1}P_{n-1}}_{=I}P_{n-2}L_{n-3}\underbrace{(P_{n-1}P_{n-2})^{-1}P_{n-1}P_{n-2}}_{=I}P_{n-3} \cdot \ldots \\ &\qquad \cdot L_2\underbrace{(P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_3)^{-1}P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_3}_{=I}P_2L_1\underbrace{(P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_2)^{-1}P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_2}_{=I}P_1A \\ &= \hat{L}_{n-1}\hat{L}_{n-2} \cdot \ldots \cdot \hat{L}_1\underbrace{P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_1}_{=:P}A \end{aligned}$$

mit $\hat{L}_{n-1} := L_{n-1}$ und $\hat{L}_k := P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_{k+1}L_k(P_{n-1} \cdot \ldots \cdot P_{k+1})^{-1}$ für $k = n-2, \ldots, 1$. Die Matrizen $\hat{L}_k$ sind wiederum Frobenius-Matrizen der Form (1.6), wobei die Einträge $\hat{l}_{jk}$ bis auf Permutation genau den l_{jk} entsprechen.

□

Algorithmus:

(i) Bestimme Matrizen P, L und R gemäß Satz 2
mit $PA = LR$ (Dreieckszerlegung)

(ii) Löse $Lc = Pb$ (Vorwärtssubstitution, vgl. Ü)

(iii) Löse $Rx = c$ (Rückwärtssubstitution)

Rechenaufwand der LR-Zerlegung:
$A \to A^{(1)}$: $n-1$ Divisionen, $(n-1)^2$ Multiplikationen und Additionen
$A \to L, R$: Also insgesamt $\sum_{j=1}^{n-1}(j^2+j) = \frac{n^3}{3} - \frac{n}{3}$ Multiplikationen und Divisionen
Hauptarbeit des Algorithmus liegt somit in der Berechnung der LR-Zerlegung.

Beachte:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n-1} j^2 + \sum_{j=1}^{n-1} j &= \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + \frac{n(n-1)}{2} \\ &= \frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{6} - \frac{2n^2}{6} + \frac{n}{6} + \frac{n^2}{2} - \frac{n}{2}. \end{aligned}$$

Speicherplatz: Da Elemente mit Werten 0 und 1 nicht notwendigerweise gespeichert werden müssen, lässt sich das Gaußsche Eliminationsverfahren bei Speicherung der Permutationsmatrix mit $n(n+2)$ Speicherplätzen realisieren. Die relevanten Einträge der Frobenius-Matrizen können im Array der Matrix A bzw. $A^{(k)}$ gespeichert werden. Die Projektionsmatrix P kann durch weitere n Speicherplätze repräsentiert werden.

Spaltenpivotwahl: Selbst wenn $a_{11} \neq 0$ bzw. im k-ten Schritt $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ gilt, kann eine Zeilenvertauschung sinnvoll sein. Bei der Spaltenpivotwahl wählt man als Pivotelement im k-ten Schritt das Element $a_{jk}^{(k-1)}$ mit

$$|a_{jk}^{(k-1)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{i,k}^{(k-1)}|.$$

Dies führt zu

$$|l_{ij}| \le 1 \text{ für alle } i, j$$

und somit zu einer besseren Stabilität des Verfahrens (zur Stabilität: siehe unten).