IV ELIMINATIONSVERFAHREN

S. BARTELS, 27.11.2013

IV.A. **Gaußsches Eliminationsverfahren.** Lineare Gleichungssysteme treten in verschiedensten Bereichen der Mathematik auf. Sie erlauben es, aus gewissen äußeren, messbaren Größen (approximativ) innere Größen zu bestimmen, die oft nicht direkt zugänglich sind.

Beispiel IV.1. *Lässt sich der Gesamtwert von in einem Glas befindlichen Münzen durch das Gewicht und das Volumen bestimmen?*

Das Gaußsche Verfahren überführt ein lineares Gleichungssystem sukzessive in ein äquivalentes lineares Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix.

Algorithmus IV.2 (Gauß-Elimination)**.** *Seien $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$.*
(1) Setze $A^{(1)} = A$ und $b^{(1)} = b$ sowie $k = 1$.
(2) Für $A^{(k)}$ gelte $a_{ij}^{(k)} = 0$ für und $1 \le j \le k-1$ und $i \ge j+1$ und mit $\ell_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ für $i = k+1,\dots,n$ sei die normalisierte untere Dreiecksmatrix $L^{(k)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ wie folgt definiert:

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \dots & & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}, \quad L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -\ell_{k+1,k} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -\ell_{nk} & & 1 \end{bmatrix}.$$

Dann gilt für $A^{(k+1)} = L^{(k)}A^{(k)}$, dass $a_{ij}^{(k+1)} = 0$ für $1 \le j \le k$ und $i \ge j+1$, das heißt

$$A^{(k+1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \dots & & & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & & & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \dots & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{nn}^{(k+1)} \end{bmatrix}.$$

Setze ferner $b^{(k+1)} = L^{(k)}b^{(k)}$.
(3) Stoppe falls $k+1 = n$; andernfalls erhöhe $k \to k+1$ und wiederhole (2).

Satz IV.3. *Ist $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regulär, so ist das Gauß-Verfahren genau dann durchführbar, wenn A eine LU-Zerlegung besitzt. Das Verfahren liefert dann die normalisierte LU-Zerlegung mit $U = A^{(n)}$ und $L = \big(L^{(n-1)} \dots L^{(1)}\big)^{-1}$. Die modifizierte rechte Seite $y = b^{(n)}$ ist gegeben durch $y = L^{-1}b$ und die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ durch die von $Ux = y$.*

Beweis. Siehe Vorlesung. □

Bemerkung IV.4. *Der Beweis zeigt, dass zur Bestimmung von L keine zusätzlichen Berechnungen erforderlich sind.*

Für die Durchführung des Gauß-Verfahrens müssen die Matrizen $L^{(k)}$ nicht explizit aufgestellt werden.

Algorithmus IV.5 (Gauß-Verfahren)**.** *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine LU-zerlegbare Matrix und $b \in \mathbb{R}^n$.*

$\texttt{for}\ k = 1 : n-1$

$\quad \texttt{for}\ i = k+1 : n;\ \ell_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)};\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \ell_{ik} b_k^{(k)};\ \texttt{end;}$

$\qquad \texttt{for}\ j = k+1 : n;\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \ell_{ik} a_{kj}^{(k)};\ \texttt{end;}$

$\texttt{end}$

Bemerkung IV.6. *Der Algorithmus liefert mit $(2/3)n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ Rechenschritten die nicht-trivialen Einträge der LU-Zerlegung der Matrix A und die modifizierte rechte Seite y. Die Einträge von U sind gegeben durch $u_{ij} = a_{ij}^{(i)}$. Die Matrix A kann mit den berechneten Größen überschrieben werden.*

IV.B. **Pivot-Strategie.** Das oben definierte Gauß-Verfahren ist einersetis nicht für jede Matrix durchführbar und kann andererseits zu Instabilitäten führen.

Beispiel IV.7. *Das lineare Gleichungssystem*

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

ist gut konditioniert und besitzt die Lösung $x_1 = 1/(1-\varepsilon)$ und $x_2 = (1-2\varepsilon)/(1-\varepsilon)$. Der erste Schritt der Rückwärtssubstitution im Gauß-Verfahren liefert zunächst eine Approximation für x_2, die für sehr kleine Zahlen ε unter Berücksichtigung von Rundung gegeben ist durch $\widetilde{x}_2 = 1$. Wird dieses Ergebnis zur Berechnung von $\widetilde{x}_1$ in der Gleichung $\varepsilon\widetilde{x}_1 + \widetilde{x}_2 = 1$ verwendet, so ergibt sich $\widetilde{x}_1 = 0$, was keine gute Näherung von x_1 ist. Betrachtet man hingegen das äquivalente Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix},$$

so treten im Gauß-Verfahren keine Instabilitäten auf.

Die Vermeidung von Instabilitäten im Gauß-Verfahren erfolgt durch eine sogenannte *(Spalten-)Pivotsuche*. Dazu wird das obige Vorgehen in der k-Schleife vor der i-Schleife wie folgt erweitert:

- bestimme $p \in \{k, \dots, n\}$ mit $|a_{pk}^{(k)}| = \max_{i=k,\dots,n} |a_{ik}^{(k)}|$;
- vertausche die Zeilen p und k in $[A^{(k)}|b^{(k)}]$ und erhalte $[\widetilde{A}^{(k)}|\widetilde{b}^{(k)}]$;
- eliminiere Einträge in $[\widetilde{A}^{(k)}|\widetilde{b}^{(k)}]$ und erhalte $[A^{(k+1)}|b^{(k+1)}]$.

Praktisch wird das Vertauschen nicht tatsächlich durchgeführt, sondern entsprechende Indizes werden einfach umbenannt. Dazu führt man einen Vektor $\pi \in \mathbb{N}^n$ ein, der die Vertauschungen beschreibt:

- initialisiere π mit $\pi = [1, \dots, n]$;
- sollen die Zeilen k und p vertauscht werden, so vertausche $\pi(k)$ und $\pi(p)$.

Die Vertauschung von Zeilen lässt sich auch mit einer *Permutationsmatrix* darstellen. Es gilt $\widetilde{A}^{(k)} = P^{(k)} A^{(k)}$, wobei $P^{(k)}$ durch Vertauschen der Zeilen p und k in der Einheitsmatrix I_n entsteht.

Bemerkung IV.8. *Statt der Spalten-Pivotsuche kann man auch eine* totale Pivotsuche *durchführen, wobei dann auch Spalten vertauscht werden. Dies führt jedoch zu einem hohen Aufwand.*

Satz IV.9. *Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär und $b \in \mathbb{R}^n$, so ist das Gauß-Verfahren mit Pivotsuche durchführbar. Es liefert die normalisierte LU-Zerlegung $PA = LU$ mit $|\ell_{ij}| \leq 1$ für alle $1 \leq i, j \leq n$ sowie die modifizierte rechte Seite $b^{(n)} = L^{-1}Pb$. Dabei ist $P = P^{(n-1)} \dots P^{(1)}$.*

Beweis. Siehe Vorlesung. □

Bemerkungen IV.10. *(i) Zur Lösung von $Ax = b$ mit LU-Zerlegung $PA = LU$ löst man die Gleichungssysteme $Ly = Pb$ und $Ux = y$. Im modifizierten Gauß-Verfahren gilt $y = b^{(n)} = L^{-1}Pb$ und man löst $Ux = b^{(n)}$.*
(ii) In einer Implementation muss der Vektor π angelegt werden, um U und L aus der überschriebenen Matrix A zu gewinnen, das heißt es wird zusätzlicher Speicherplatz benötigt. Der Aufwand für das Gauß-Verfahren mit Pivotsuche beträgt ebenfalls $2n^3/s + \mathcal{O}(n^2)$ Operationen.