Computergestützte Mathematik zur Linearen Algebra

Gleitkommaarithmetik

HHU

12. Dezember 2024

Instabilitäten bei Gauß-Elimination

Aufgabe: Berechne LR-Zerlegung von

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

LR-Zerlegung von A ohne Zeilenvertauschung existiert nicht (Division durch 0)

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Pivotelement $10^{-20} \neq 0$, LR-Zerlegung von A existiert:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad R = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{bmatrix}$$

PYTHON liefert jedoch bei der Multiplikation $L \cdot R \neq A$

Gleitkommaarithmetik

Wie lässt sich dieser Fehler erklären?

- Wie werden Zahlen im Rechner dargestellt?
- Welche Fehler können bei Grundrechenarten passieren?
- Wie kann man Instabilitäten im Gauß-Algorithmus vermeiden?

Gleitkommazahlen

Eine Gleitkommazahl (engl. *floating point number*) zu einer gegebenen Basis b ist eine Zahl der Form

$$x = s \cdot m \cdot b^e,$$

wobei

- $s \in \{-1, 1\}$ das *Signum*
- $m \in [1, b)$ die *Mantisse* und
- $e \in \mathbb{Z}$ der *Exponent*

heißen.
Jede reelle Zahl lässt sich auf diese Weise eindeutig darstellen.

Gleitkommadarstellung reeller Zahlen

Sei $\overline{m}$ auf ℓ Ziffern gerundete Mantisse von $x = \pm m \cdot b^e$

$$\mathrm{fl}(x) := \pm \overline{m} \cdot b^e$$

Beispiel: $\ell = 8, b = 10, x = \pi = 3.141592653\ldots$

$$\mathrm{fl}(\pi) = 3.1415927 \cdot 10^0$$

Maschinengenauigkeit: Kleinste positive Zahl $\mathtt{eps}$, so dass

$$\mathrm{fl}(1 + \mathtt{eps}) > 1.$$

- Dezimalsystem $\quad \mathtt{eps} = 5 \cdot 10^{-\ell}$
- Binärsystem (Basis 2) $\quad \mathtt{eps} = 2^{-\ell}$

Beispiele

Dezimaldarstellung ($b = 10$)

$$x = s \cdot m \cdot 10^e, \qquad m \in [1, 10)$$

$$x = 1 \quad \Rightarrow \quad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$x = -10 \quad \Rightarrow \quad s = -1,\ e = 1,\ m = 1$$

$$x = -0{,}125 \quad \Rightarrow \quad s = -1,\ e = -1,\ m = 1{,}25$$

Beispiele

Binärdarstellung ($b = 2$)

$$x = s \cdot m \cdot 2^e, \qquad m \in [1, 2)$$

$$x = 1 \qquad \Rightarrow \qquad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$x = -10 \qquad \Rightarrow \qquad s = -1,\ e = 3,\ m = \frac{5}{4}$$

$$x = -0{,}125 \qquad \Rightarrow \qquad s = -1,\ e = -3,\ m = 1$$

Zahlendarstellung im Rechner

- Der Rechner hat nur endlich viel Speicher
- $\Rightarrow$ m und e können nur endlich viele Werte annehmen.
- Computer kann nur Nullen und Einsen speichern
- $\Rightarrow$ stelle m und e binär dar (d.h. $b = 2$).
- Verwende $p+1$ Stellen für die Mantisse, r Stellen für den Exponenten.

Zahlendarstellung im Rechner

- Der Rechner hat nur endlich viel Speicher
- $\Rightarrow$ m und e können nur endlich viele Werte annehmen.
- Computer kann nur Nullen und Einsen speichern
- $\Rightarrow$ stelle m und e binär dar (d.h. $b = 2$).
- Verwende $p+1$ Stellen für die Mantisse, r Stellen für den Exponenten.
- Erhalte endliche Gleitkommadarstellung

$$\mathrm{fl}(x) = s \cdot m \cdot b^e,\ s = (-1)^S,\ m = 1 + \sum_{k=1}^{p} M_{p-k} 2^{-k},\ e = \sum_{l=0}^{r-1} E_l 2^l - 2^{r-1} + 1,$$

wobei $S, M_i, E_l \in \{0, 1\}, i = 0, \ldots, p-1, l = 0, \ldots, r-1$.

Zahlendarstellung im Rechner

- Der Rechner hat nur endlich viel Speicher
- $\Rightarrow$ m und e können nur endlich viele Werte annehmen.
- Computer kann nur Nullen und Einsen speichern
- $\Rightarrow$ stelle m und e binär dar (d.h. $b = 2$).
- Verwende $p+1$ Stellen für die Mantisse, r Stellen für den Exponenten.
- Erhalte endliche Gleitkommadarstellung

$$\mathrm{fl}(x) = s \cdot m \cdot b^e,\ s = (-1)^S,\ m = 1 + \sum_{k=1}^{p} M_{p-k} 2^{-k},\ e = \sum_{l=0}^{r-1} E_l 2^l - \underbrace{2^{r-1}+1}_{\text{Bias}},$$

wobei $S, M_i, E_l \in \{0,1\}, i = 0, \ldots, p-1, l = 0, \ldots, r-1$.

Zahlendarstellung im Rechner, Anordnung

$$\mathrm{fl}(x) \quad = \quad s \cdot m \cdot b^e,$$

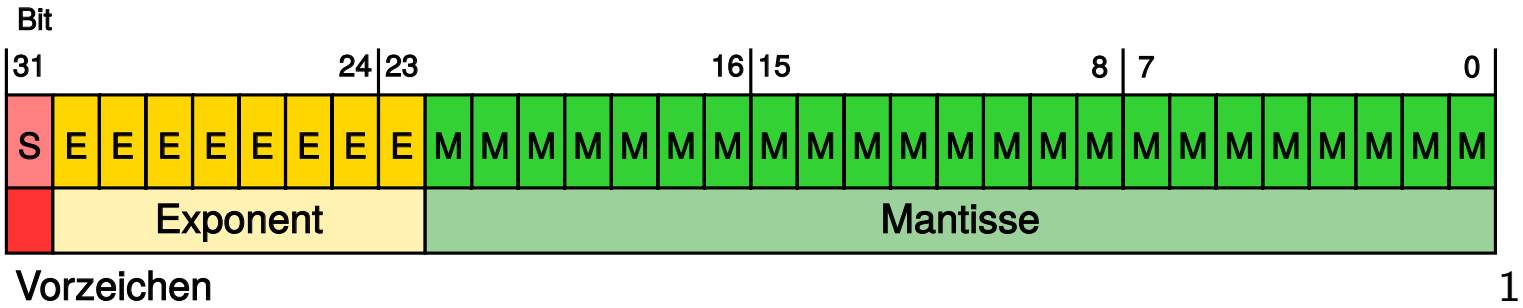
$$\text{mit} \quad s = (-1)^S, \quad m \ = 1 + \sum_{k=1}^{p} M_{p-k} 2^{-k}, \quad e = \sum_{l=0}^{r-1} E_l 2^l - 2^{r-1} + 1,$$

Zahlendarstellung im Rechner, Anordnung

$$\mathrm{fl}(x) \quad = \quad s \cdot m \cdot b^e,$$

$$\text{mit} \quad s = (-1)^S, \quad m \ = 1 + \sum_{k=1}^{p} M_{p-k} 2^{-k}, \quad e = \sum_{l=0}^{r-1} E_l 2^l - 2^{r-1} + 1,$$

Anordnung im Speicher bei einfacher Genauigkeit, d.h. $p = 23$, $r = 8$:



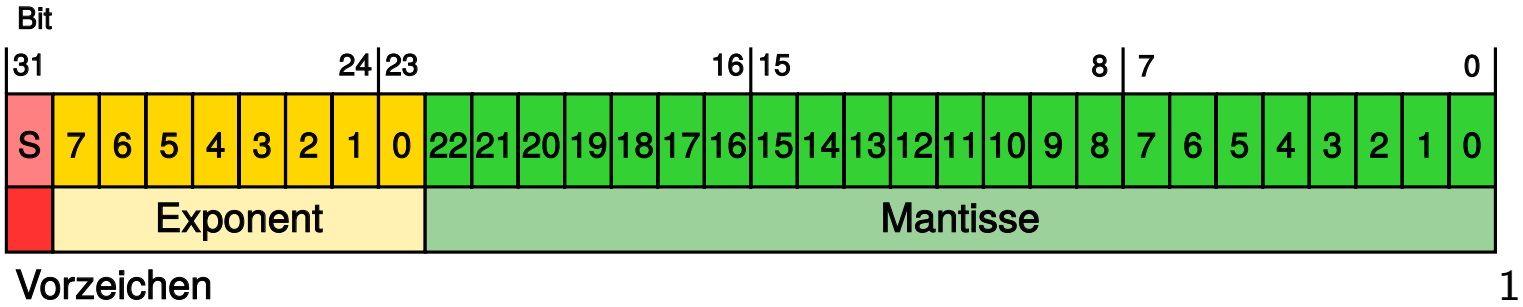
[1] Quelle: Wikipedia

Zahlendarstellung im Rechner, Anordnung

$$\mathrm{fl}(x) \quad = \quad s \cdot m \cdot b^e,$$

$$\text{mit} \quad s = (-1)^S, \quad m \ = 1 + \sum_{k=1}^{p} M_{p-k} 2^{-k}, \quad e = \sum_{l=0}^{r-1} E_l 2^l - 2^{r-1} + 1,$$

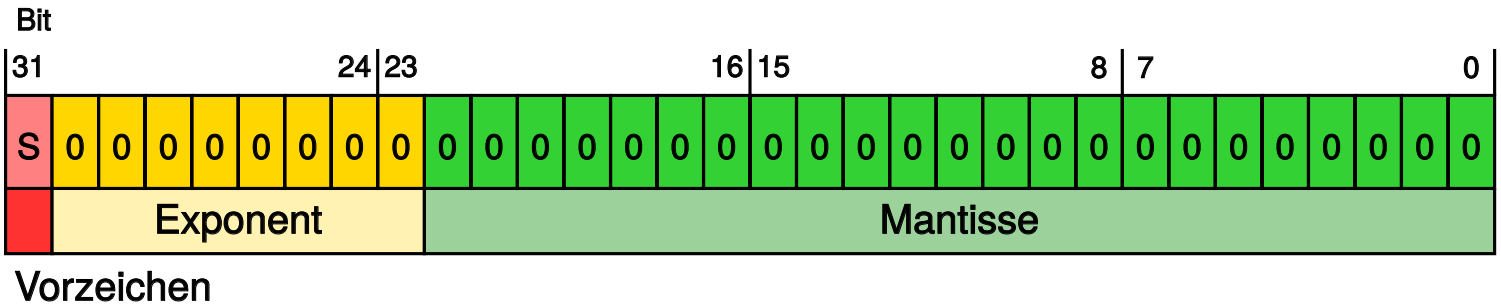
Anordnung im Speicher bei einfacher Genauigkeit, d.h. $p = 23$, $r = 8$:



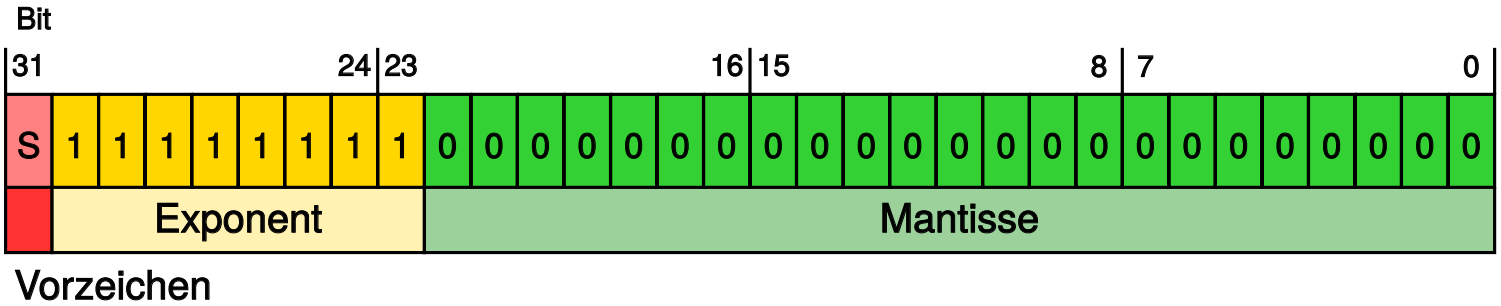
- Jedes farbige Feld enthält entweder eine Null oder eine Eins.
- Das Vorzeichenbit S steht für „+“(0) oder „-“(1).
- Das vorderste Bit (7) des Exponenten bestimmt, ob er positiv (1) oder nicht-positiv (0) ist.
- Das vorderste Bit (22) der Mantisse steht für $\frac{1}{2}$, das nächste (21) für $\frac{1}{4}$, etc.

Zahlendarstellung im Rechner, spezielle Werte

- ± 0: $e = -2^{r-1} + 1$, $m = 1$ (eigentlich nicht darstellbar)



- $\pm \infty$: $e = 2^{r-1}$, $m = 1$



Beispiele

$$x = 1 = 1 \cdot 1 \cdot 2^0 \qquad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = \underbrace{\sum_{l=0}^{r-2} 1 \cdot 2^l}_{=2^{r-1}-1} + 0 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = 1 = 1 \cdot 1 \cdot 2^0 \qquad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = \underbrace{\sum_{l=0}^{r-2} 1 \cdot 2^l}_{=2^{r-1}-1} + 0 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = 1 = 1 \cdot 1 \cdot 2^0 \qquad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = \underbrace{\sum_{l=0}^{r-2} 1 \cdot 2^l}_{=2^{r-1}-1} + 0 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

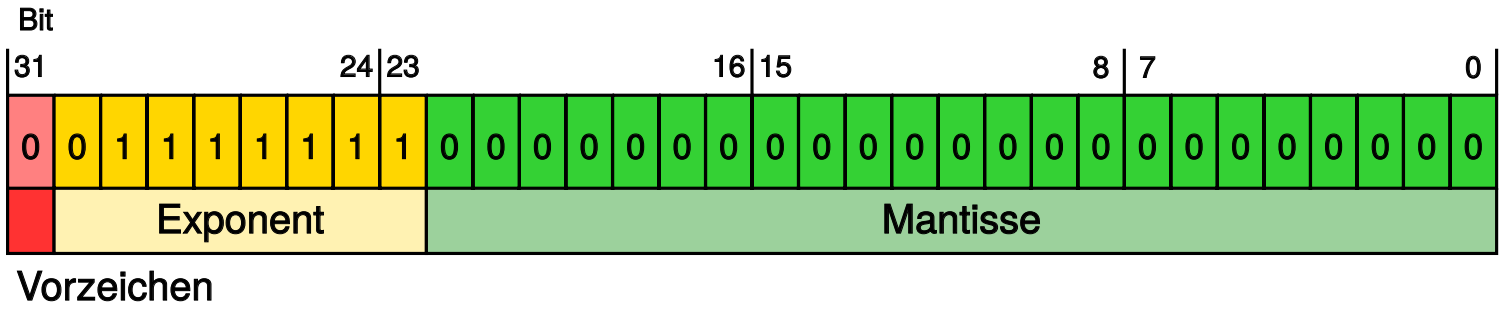
Beispiele

$$x = 1 = 1 \cdot 1 \cdot 2^0 \qquad s = 1,\ e = 0,\ m = 1$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = \underbrace{\sum_{l=0}^{r-2} 1 \cdot 2^l}_{=2^{r-1}-1} + 0 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$



Beispiele

$$x = -10 = -1 \cdot \tfrac{5}{4} \cdot 2^3 \qquad s = -1,\ e = 3,\ m = \tfrac{5}{4}$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = 3 = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^2 + \sum_{l=0}^{r-2} 0 \cdot 2^l + 1 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = \frac{5}{4} = 1 + 0 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{4} + \sum_{k=3}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = -10 = -1 \cdot \tfrac{5}{4} \cdot 2^3 \qquad s = -1,\ e = 3,\ m = \tfrac{5}{4}$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = 3 = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^2 + \sum_{l=0}^{r-2} 0 \cdot 2^l + 1 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = \frac{5}{4} = 1 + 0 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{4} + \sum_{k=3}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = -10 = -1 \cdot \tfrac{5}{4} \cdot 2^3 \qquad s = -1,\ e = 3,\ m = \tfrac{5}{4}$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = 3 = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^2 + \sum_{l=0}^{r-2} 0 \cdot 2^l + 1 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = \frac{5}{4} = 1 + 0 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{4} + \sum_{k=3}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

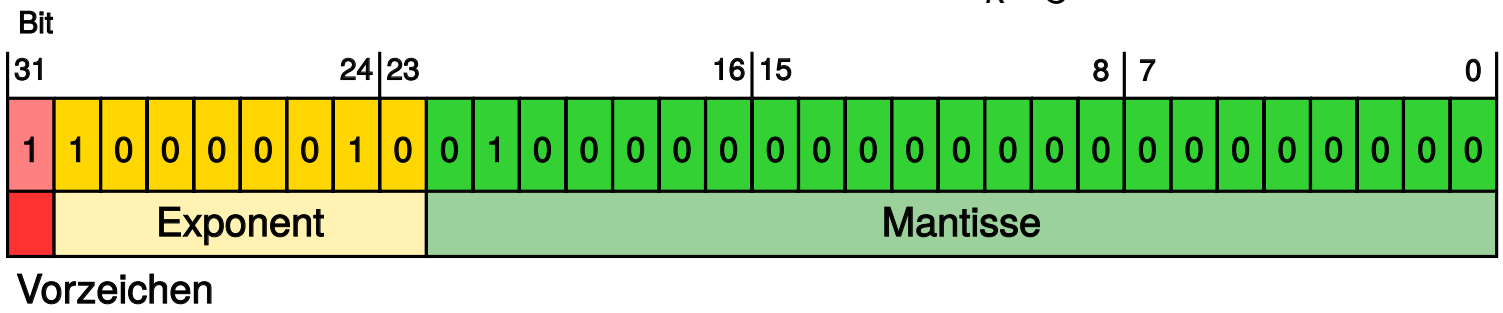
Beispiele

$$x = -10 = -1 \cdot \frac{5}{4} \cdot 2^3 \qquad s = -1,\ e = 3,\ m = \frac{5}{4}$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = 3 = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^2 + \sum_{l=0}^{r-2} 0 \cdot 2^l + 1 \cdot 2^{r-1} - 2^{r-1} + 1$$

$$m = \frac{5}{4} = 1 + 0 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{4} + \sum_{k=3}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$



Beispiele

$$x = -0{,}125 = -\frac{1}{8} = -1 \cdot 1 \cdot 2^{-3} \qquad s = -1,\ e = -3,\ m = 1$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = -3 = 64+32+16+8+4-128+1 = \sum_{l=0}^{2} 0 \cdot 2^l + \sum_{l=3}^{6} 1 \cdot 2^l + 0 \cdot 2^7 - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = -0{,}125 = -\frac{1}{8} = -1 \cdot 1 \cdot 2^{-3} \qquad s = -1,\ e = -3,\ m = 1$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = -3 = 64+32+16+8+4-128+1 = \sum_{l=0}^{2} 0 \cdot 2^l + \sum_{l=3}^{6} 1 \cdot 2^l + 0 \cdot 2^7 - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

Beispiele

$$x = -0{,}125 = -\frac{1}{8} = -1 \cdot 1 \cdot 2^{-3} \qquad s = -1,\ e = -3,\ m = 1$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = -3 = 64+32+16+8+4-128+1 = \sum_{l=0}^{2} 0 \cdot 2^l + \sum_{l=3}^{6} 1 \cdot 2^l + 0 \cdot 2^7 - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$

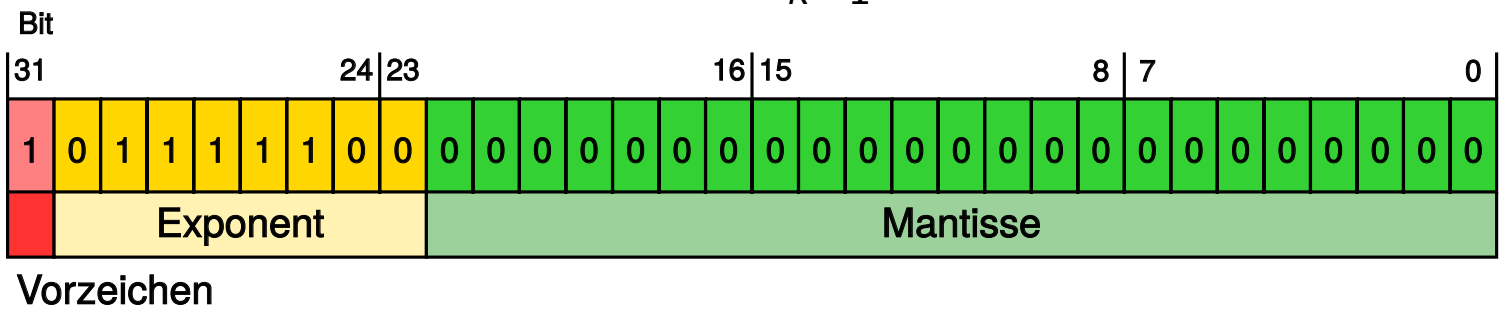
Beispiele

$$x = -0{,}125 = -\frac{1}{8} = -1 \cdot 1 \cdot 2^{-3} \qquad s = -1,\ e = -3,\ m = 1$$

$$s = -1 = (-1)^1$$

$$e = -3 = 64+32+16+8+4-128+1 = \sum_{l=0}^{2} 0 \cdot 2^l + \sum_{l=3}^{6} 1 \cdot 2^l + 0 \cdot 2^7 - 2^{r-1} + 1$$

$$m = 1 = 1 + \sum_{k=1}^{p} 0 \cdot 2^{-k}$$



Beispiele – Rundung!

$$x = 0{,}1 = 1 \cdot \tfrac{8}{5} \cdot 2^{-4} \qquad s = 1,\ e = -4,\ m = \tfrac{8}{5}$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = -4 = 64 + 32 + 16 + 8 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{8}{5} = 1 + \frac{3}{5} \approx 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{512} + \frac{1}{4096} + \frac{1}{8192} + \frac{1}{655} + \frac{1}{131072} + \frac{1}{1048576} + \frac{1}{2097152} + \frac{1}{8388608}$$

Beispiele – Rundung!

$$x = 0{,}1 = 1 \cdot \tfrac{8}{5} \cdot 2^{-4} \qquad s = 1,\ e = -4,\ m = \tfrac{8}{5}$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = -4 = 64 + 32 + 16 + 8 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{8}{5} = 1 + \frac{3}{5} \approx 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{512} + \frac{1}{4096} + \frac{1}{8192} + \frac{1}{655} + \frac{1}{131072} + \frac{1}{1048576} + \frac{1}{2097152} + \frac{1}{8388608}$$

Beispiele – Rundung!

$$x = 0{,}1 = 1 \cdot \tfrac{8}{5} \cdot 2^{-4} \qquad s = 1,\ e = -4,\ m = \tfrac{8}{5}$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = -4 = 64 + 32 + 16 + 8 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{8}{5} = 1 + \frac{3}{5} \approx 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{512} + \frac{1}{4096} + \frac{1}{8192} + \frac{1}{655}$$
$$+ \frac{1}{131072} + \frac{1}{1048576} + \frac{1}{2097152} + \frac{1}{8388608}$$

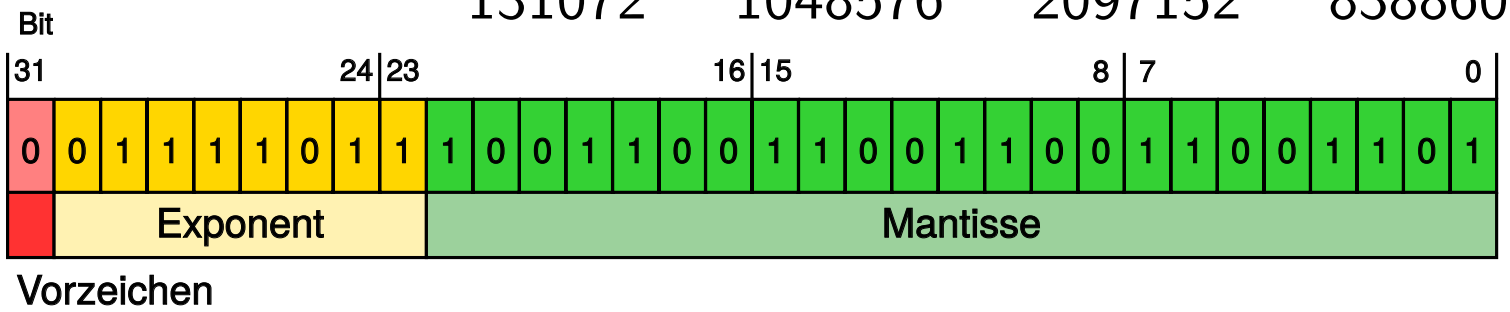
Beispiele – Rundung!

$$x = 0{,}1 = 1 \cdot \tfrac{8}{5} \cdot 2^{-4} \qquad s = 1,\ e = -4,\ m = \tfrac{8}{5}$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = -4 = 64 + 32 + 16 + 8 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{8}{5} = 1 + \frac{3}{5} \approx 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{512} + \frac{1}{4096} + \frac{1}{8192} + \frac{1}{655}$$
$$+ \frac{1}{131072} + \frac{1}{1048576} + \frac{1}{2097152} + \frac{1}{8388608}$$



Beispiele – Rundung!

$$x = 0{,}1 = 1 \cdot \tfrac{8}{5} \cdot 2^{-4} \qquad s = 1,\ e = -4,\ m = \tfrac{8}{5}$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = -4 = 64 + 32 + 16 + 8 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{8}{5} = 1 + \frac{3}{5} \approx 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \frac{1}{256} + \frac{1}{512} + \frac{1}{4096} + \frac{1}{8192} + \frac{1}{655}$$
$$+ \frac{1}{131072} + \frac{1}{1048576} + \frac{1}{2097152} + \frac{1}{8388608}$$

$\mathrm{fl}(0{,}1) \neq 0{,}1$ **ist nicht exakt darstellbar, denn**

$$\frac{8}{5} = \sum_{k \geq 0} \frac{1}{2^{4k}} + \frac{1}{2^{4k+1}}$$

ist eine periodische Binärzahl.

Beispiele – Rundung!

$$x = 1+10^{-8} = 1{,}00000001 = 1\cdot 1{,}00000001\cdot 2^0 \quad s = 1,\ e = 0,\ m = 1{,}000000$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = 64 + 32 + 16 + 8 + 4 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{100000001}{100000000} = 1 + \frac{1}{100000000} \approx 1, \quad \text{da } 1 + 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$$

Beispiele – Rundung!

$x = 1+10^{-8} = 1{,}00000001 = 1\cdot 1{,}00000001\cdot 2^0 \quad s = 1,\ e = 0,\ m = 1{,}000000$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = 64 + 32 + 16 + 8 + 4 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{100000001}{100000000} = 1 + \frac{1}{100000000} \approx 1, \quad \text{da} \ \ 1 + 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$$

Beispiele – Rundung!

$$x = 1+10^{-8} = 1{,}00000001 = 1\cdot 1{,}00000001\cdot 2^0 \quad s = 1,\ e = 0,\ m = 1{,}000000$$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = 64 + 32 + 16 + 8 + 4 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{100000001}{100000000} = 1 + \frac{1}{100000000} \approx 1, \quad \text{da} \quad 1 + 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$$

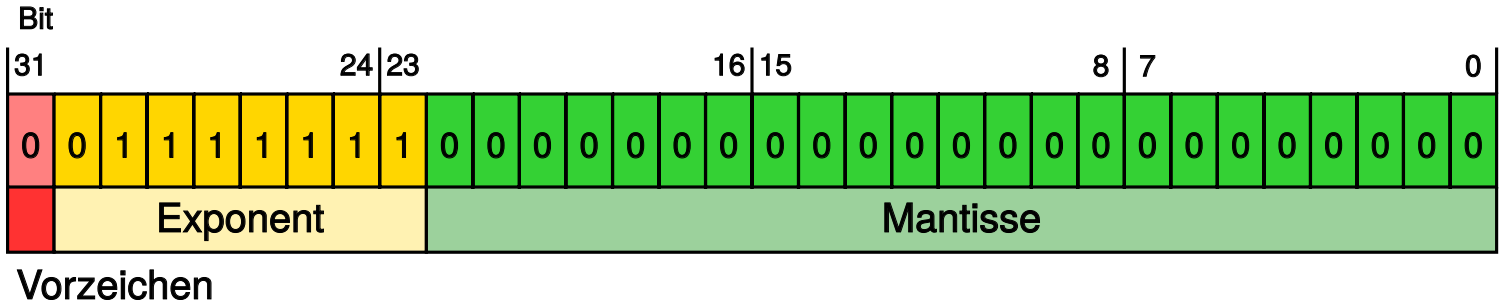
Beispiele – Rundung!

$x = 1+10^{-8} = 1{,}00000001 = 1\cdot 1{,}00000001\cdot 2^0 \quad s = 1,\ e = 0,\ m = 1{,}000000$

$$s = 1 = (-1)^0$$

$$e = 0 = 64 + 32 + 16 + 8 + 4 + 2 + 1 - 128 + 1$$

$$m = \frac{100000001}{100000000} = 1 + \frac{1}{100000000} \approx 1, \quad \text{da} \quad 1 + 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$$



Wieder $\mathrm{fl}(x) \neq x$.

Maschinengenauigkeit

Maschinengenauigkeit: Kleinste positive Zahl $\mathtt{eps}$, so dass

$$\mathrm{fl}(1 + \mathtt{eps}) > 1.$$

Für einfache Genauigkeit: $\mathtt{eps} = 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$.

Maschinengenauigkeit

Maschinengenauigkeit: Kleinste positive Zahl $\texttt{eps}$, so dass

$$\mathrm{fl}(1 + \texttt{eps}) > 1.$$

Für einfache Genauigkeit: $\texttt{eps} = 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$.

Bemerkung: $\texttt{eps}$ ist der Abstand zwischen je zwei benachbarten Mantissen.

IEEE Standard 754 - 1985/2008: Gleitkommazahlen

Genauigkeit	Bit	Byte	Vorzeichen s	Exponent e	Mantisse m
single	32	4	$1(31)$	$8(30-23)$	$23(22-0)$
double	64	8	$1(63)$	$11(62-52)$	$52(51-0)$
quadruple	128	16	$1(127)$	$15(126-113)$	$113(112-0)$
octuple	256	32	$1(255)$	$19(254-237)$	$237(236-0)$

Normalisierte Zahlendarstellung (s.o.):

$$s \cdot 1.M \cdot 2^{e-bias}, \quad bias = 127 \text{ bzw. } 1023 \text{ bzw. } 16383 \text{ bzw. } 262143$$

Damit ergeben sich die Maschinengenauigkeiten

- single: $\mathtt{eps} = 2^{-23} \approx 1{,}2 \cdot 10^{-7}$
- double: $\mathtt{eps} = 2^{-52} \approx 2{,}2 \cdot 10^{-16}$
- quadruple: $\mathtt{eps} = 2^{-113} \approx 9{,}6 \cdot 10^{-35}$
- octuple: $\mathtt{eps} = 2^{-237} \approx 4{,}5 \cdot 10^{-72}$

In PYTHON wird standardmäßig doppelt genau gerechnet.

Relativer Fehler der endlichen Gleitkommadarstellung

Satz

Für jedes $0 \neq x \in [-2^{r-1}, 2^{r-1}] \setminus [-2^{-r+1}, 2^{-r+1}]$ ist

$$\frac{|\operatorname{fl}(x) - x|}{|x|} \leq \text{eps},$$

das heißt der relative Fehler ist beschränkt durch eps.

Beweis: $\mathcal{M} = \{1 + n \cdot 2^{-p} \mid n \in \{0, \ldots, 2^p\}\}$ = Menge der Mantissen.
Sei $\operatorname{fl}(x) = \overline{m} \cdot 2^{\overline{e}}$ und $x = m \cdot 2^{\overline{e}}$, wobei $m, \overline{m} \in \mathcal{M}$. Sei $\Delta m := m - \overline{m}$.
Nach Bemerkung ist $|\Delta m| \leq \text{eps}$. Damit

$$\frac{|\operatorname{fl}(x) - x|}{|x|} = \frac{|\overline{m} - m| \cdot 2^{\overline{e}}}{|m| \cdot 2^{\overline{e}}} = \frac{|\Delta m|}{|m|} \leq \text{eps},$$

da $m \geq 1$. □
Schreibe daher $\operatorname{fl}(x) = x(1 + \varepsilon)$ mit $|\varepsilon| \leq \text{eps}$.

Kondition eines Problems

Ein Problem sei durch (Auswertung einer) Abbildung

$$F : U \to V \quad x \mapsto F(x)$$

beschrieben, wobei U und V normierte Räume sind und F die Problemstellung. Die Problemstellung könnte etwas sein:

- ein Polynom auszuwerten,
- die Wurzeln einer quadratischen Gleichung zu bestimmen,
- die Lösung von $Ax = b$ zu berechnen oder
- die Lösung eines Eigenwertproblems $Ax = \lambda x$ ist.

Frage: Wie wirken sich Störungen in den Daten (Koeffizienten des Polynoms, Einträgen von A und b, ...) auf das Resultat $F(x)$ aus?

Kondition eines Problems

Sei $U = \mathbb{R}^n$ und $V = \mathbb{R}$, dann ist:
Definition: Die Kondition κ von F ist die kleinste Zahl, so dass

$$\frac{|\hat{x}_i - x_i|}{|x_i|} \leq \text{eps}, \quad \forall\ i \Longrightarrow \frac{|F(\hat{x}) - F(x)|}{|F(x)|} \leq \kappa \cdot \text{eps}.$$

Das Problem heißt gut konditioniert, falls κ nicht zu groß ist (ideal $\kappa = 1$) und anderenfalls schlecht konditioniert.

Die Kondition kann näherungsweise durch Linearisierung mithilfe der Ableitung bestimmt werden.

Kondition der Grundrechenarten in Gleitkommaarithmetik

Multiplikation zweier reeller Zahlen

Sei $F(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$. Für die gestörten Werte

$$\hat{x}_1 = x_1(1+\varepsilon_1), \qquad \hat{x}_2 = x_2(1+\varepsilon_2), \qquad |\varepsilon_i| \leq \texttt{eps}$$

erhalten wir für $\dfrac{|F(\hat{x}) - F(x)|}{|F(x)|}$:

$$\frac{\hat{x}_1\hat{x}_2 - x_1x_2}{x_1x_2} = (1+\varepsilon_1)(1+\varepsilon_2) - 1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_1\varepsilon_2.$$

Da $\texttt{eps} < 1$, ist $|\varepsilon_1\varepsilon_2| \leq \texttt{eps}^2 < \texttt{eps}$.

$$\left|\frac{\hat{x}_1\hat{x}_2 - x_1x_2}{x_1x_2}\right| \leq 3\texttt{eps}.$$

Also $\kappa(F) = 3$, die Multiplikation ist gut konditioniert!

Kondition der Grundrechenarten in Gleitkommaarithmetik

Subtraktion zweier reeller Zahlen

Für $F(x_1, x_2) = x_1 - x_2$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \left| \frac{(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) - (x_1 - x_2)}{x_1 - x_2} \right| &= \left| \frac{x_1\varepsilon_1 - x_2\varepsilon_2}{x_1 - x_2} \right| \\ &\leq \frac{|x_1| + |x_2|}{|x_1 - x_2|}\mathtt{eps} =: \kappa\mathtt{eps}. \end{aligned}$$

- Mit $\operatorname{sign} x_1 = -\operatorname{sign} x_2$ (Addition) ist $\kappa(F) = 1$.
  Die Addition ist gut konditioniert.
- Mit $\operatorname{sign} x_1 = \operatorname{sign} x_2$ (Subtraktion) und $x_1 \approx x_2$ ist $\kappa(F) \gg 1$ sehr groß.
  Die Subtraktion zweier etwa gleich großer Zahlen ist sehr schlecht konditioniert (Auslöschung).

Gauss-Elimination

In double precision mit eps $= 10^{-16}$

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Pivotelement $10^{-20} \neq 0$, LR-Zerlegung von A existiert:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad R = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{bmatrix}$$

Jedoch wird das Ergebnis auf double precision gerundet!

$$\mathrm{fl}(L) = \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathrm{fl}(R) = \tilde{R} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}$$

und damit erhalten wir numerisch (vgl. PYTHON)

$$\tilde{L}\tilde{R} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \neq A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Lösung eines Gleichungssystemes mit $\tilde{L}\tilde{R}$-Zerlegung

$$\mathrm{fl}(L) = \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathrm{fl}(R) = \tilde{R} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}$$

Löst man mit $\tilde{L}$ und $\tilde{R}$ das LGS $Ax = b$ mit $b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, so ergibt sich aus $\tilde{L}\tilde{y} = b$ zunächst

$$\tilde{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ -10^{20} \end{bmatrix} \qquad \text{(richtig)}$$

und dann aus $\tilde{R}\tilde{x} = \tilde{y}$ die Lösung

$$\tilde{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{(statt richtig } x \approx \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} \text{)}$$

Spaltenpivotsuche

Problem: L-Faktor enthält ein großes Element.

Erinnerung: $k-1$ Schritte Gauß-Elimination liefern

$$A \to A_{k-1} = \begin{bmatrix} \times & \cdots & \times & \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & \times & \alpha_{k-1} & \times & \cdots & \times \\ & & & \alpha_k & \times & \cdots & \times \\ & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & \alpha_n & \times & \cdots & \times \end{bmatrix}$$

Spaltenpivotsuche: Wählt man $|\alpha_j| = \max\limits_{k \le i \le n} |\alpha_i|$ als Pivotelement, gilt $|\ell_{ik}| \le 1$

Beispiel für $n = 3$

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

$PA = LR$:

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

Beispiel für $n = 4$

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

Python-Demo: `lrdemo`

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \frac{3}{4} & 1 & & \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotsuche

Nach $n-1$ Schritten Gauß-Elimination erhält man

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1A = R$$

mit Permutationsmatrizen $P_1, \ldots, P_{n-1}$ oder

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1 = (L'_{n-1}\cdots L'_2L'_1)(P_{n-1}\cdots P_2P_1)$$

mit

$$L'_k = P_{n-1}\cdots P_{k+1}L_kP_{k+1}^{-1}\cdots P_{n-1}^{-1}$$

Da P_j nur Vertauschungen Zeilen j und m mit $m > j$ vertauscht, bleibt die Struktur von L'_k unverändert, lediglich die Elemente unterhalb der Diagonalen werden permutiert

LR-Zerlegung mit Spaltenpivotsuche

Satz: Jede nichtsinguläre Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ hat eine Zerlerung $PA = LR$ mit

- P Permutationsmatrix
- L untere Dreiecksmatrix mit $\ell_{i,i} = 1$ und $|\ell_{j,k}| \leq 1$
- R obere Dreiecksmatrix mit $r_{j,j} \neq 0$

Lösung linearer Gleichungssysteme $Ax = b$ in drei Schritten

1. Permutieren der rechten Seite $P \cdot b$
2. Lösen von $Ly = Pb$
3. Lösen von $Rx = y$

Beachte: Die Permutationsmatrix kann platzsparend mit Hilfe eines Vektors gespeichert werden