

Numerische Mathematik für Elektrotechniker

Lineare Gleichungssysteme III

Benjamin Berkels

Karl-Heinz Brakhage, Thomas Jankuhn, Christian Löbbert

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2019/2020

Zusammenfassung der letzten Vorlesung

Definition 3.31. (Symmetrisch positiv definite Matrix)

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt **symmetrisch positiv definit** (s.p.d.), falls

$$A^T = A \quad (\text{Symmetrie})$$

und für alle $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ gilt

$$x^T A x > 0 \quad (\text{positiv definit}).$$

- ▶ A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
- ▶ A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.
- ▶ A hat nur strikt positive Diagonaleinträge und der betragsgrößte Eintrag von A liegt auf der Diagonalen.
- ▶ Bei **Gauß-Elimination ohne Pivotisierung** sind alle **Pivotelemente strikt positiv**.

Heute in der Vorlesung

Themen:

Dahmen & Reusken Kap. 3.6-3.9

- ▶ Cholesky-Verfahren
- ▶ Stabilität der LR- und Cholesky-Zerlegung
- ▶ QR-Zerlegung
- ▶ Methoden: Givens und Householder

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Was ist die Cholesky-Zerlegung und wie wird sie bestimmt?
- ▶ Sind die Gauß-Elimination und das Cholesky-Verfahren stabil?
- ▶ Was ist die QR-Zerlegung und wie wird sie berechnet?

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($\det A \neq 0$) und $b \in \mathbb{R}^n$, bestimme $x \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$A x = b.$$

Vorgehensweise: Bestimme eine Faktorisierung (Zerlegung) von A , so dass das Gleichungssystem “leichter” lösbar ist.

Verfahren:

- ▶ LR-Zerlegung: $PA = LR$, wobei L untere Dreiecksmatrix, R obere Dreiecksmatrix
- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$, wobei D Diagonalmatrix
- ▶ QR-Zerlegung: $A = QR$, wobei Q orthogonale Matrix

Satz 3.34.

Satz 3.34.

Jede s.p.d. Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ besitzt eine eindeutige Zerlegung

$$A = LDL^T,$$

wobei L eine normierte untere Dreiecksmatrix und D eine Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen

$$d_{i,i} > 0, i = 1, \dots, n,$$

ist. Umgekehrt ist jede Matrix der Form LDL^T , wobei D eine Diagonalmatrix ist, die $d_{i,i} > 0$ erfüllt, und L eine normierte untere Dreiecksmatrix ist, symmetrisch positiv definit.

Definition

Die obige Zerlegung $A = LDL^T$ heißt *Choleskey-Zerlegung*.

Beispiel 3.35. (Konstruktion der Cholesky-Zerlegung)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -2 \\ 6 & 21 & 0 \\ -2 & 0 & 16 \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix}.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} LDL^T &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell_{2,1} & \ell_{3,1} \\ 0 & 1 & \ell_{3,2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ \ell_{2,1}d_{1,1} & d_{2,2} & 0 \\ \ell_{3,1}d_{1,1} & \ell_{3,2}d_{2,2} & d_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell_{2,1} & \ell_{3,1} \\ 0 & 1 & \ell_{3,2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die elementare Auswertung der Gleichung $LDL^T = A$ kann man aufgrund der Symmetrie auf den unteren Dreiecksteil beschränken.

Beispiel 3.35.

$$\begin{pmatrix} 2 & * & * \\ 6 & 21 & * \\ -2 & 0 & 16 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ \ell_{2,1}d_{1,1} & d_{2,2} & 0 \\ \ell_{3,1}d_{1,1} & \ell_{3,2}d_{2,2} & d_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell_{2,1} & \ell_{3,1} \\ 0 & 1 & \ell_{3,2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(1,1)\text{-Element: } d_{1,1} = a_{1,1} = 2 \Rightarrow \boxed{d_{1,1} = 2}$$

$$(2,1)\text{-Element: } \ell_{2,1}d_{1,1} = a_{2,1} = 6 \Rightarrow \ell_{2,1} = 6/2 \Rightarrow \boxed{\ell_{2,1} = 3}$$

$$(3,1)\text{-Element: } \ell_{3,1}d_{1,1} = a_{3,1} = -2 \Rightarrow \ell_{3,1} = \frac{-2}{2} \Rightarrow \boxed{\ell_{3,1} = -1}$$

$$(2,2)\text{-Element: } \ell_{2,1}^2 d_{1,1} + d_{2,2} = a_{2,2} = 21$$

$$\Rightarrow d_{2,2} = 21 - 9 \cdot 2 \Rightarrow \boxed{d_{2,2} = 3}$$

$$(3,2)\text{-Element: } \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1} + \ell_{3,2}d_{2,2} = a_{3,2} = 0$$

$$\Rightarrow \ell_{3,2} = -3 \cdot (-1) \cdot 2/3 \Rightarrow \boxed{\ell_{3,2} = 2}$$

$$(3,3)\text{-Element: } \ell_{3,1}^2 d_{1,1} + \ell_{3,2}^2 d_{2,2} + d_{3,3} = a_{3,3} = 16$$

$$\Rightarrow d_{3,3} = 16 - (-1)^2 \cdot 2 - 2^2 \cdot 3 \Rightarrow \boxed{d_{3,3} = 2}$$

Beispiel 3.35.

$$(1,1)\text{-Element: } d_{1,1} = a_{1,1} \Rightarrow d_{1,1} = 2$$

$$(2,1)\text{-Element: } \ell_{2,1}d_{1,1} = a_{2,1} \Rightarrow \ell_{2,1} = a_{2,1}/d_{1,1} \Rightarrow \ell_{2,1} = 3$$

$$(3,1)\text{-Element: } \ell_{3,1}d_{1,1} = a_{3,1} \Rightarrow \ell_{3,1} = \frac{a_{3,1}}{d_{1,1}} \Rightarrow \ell_{3,1} = -1$$

$$(2,2)\text{-Element: } \ell_{2,1}^2 d_{1,1} + d_{2,2} = a_{2,2} \\ \Rightarrow d_{2,2} = a_{2,2} - \ell_{2,1}^2 d_{1,1} \Rightarrow d_{2,2} = 3$$

$$(3,2)\text{-Element: } \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1} + \ell_{3,2}d_{2,2} = a_{3,2} \\ \Rightarrow \ell_{3,2} = -a_{3,2} - \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1}/d_{2,2} \Rightarrow \ell_{3,2} = 2$$

$$(3,3)\text{-Element: } \ell_{3,1}^2 d_{1,1} + \ell_{3,2}^2 d_{2,2} + d_{3,3} = a_{3,3} \\ \Rightarrow d_{3,3} = a_{3,3} - (\ell_{3,1}^2 d_{1,1} + \ell_{3,2}^2 d_{2,2}) \Rightarrow d_{3,3} = 2$$

$$\Rightarrow L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \text{ und } D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Cholesky-Verfahren

Ergebnis für die Einträge von L und D

Für die aufeinander folgenden Spalten , $k = 1, 2, \dots, n$, hat man explizite Formeln für $d_{k,k}$ und $\ell_{i,k}$ ($i > k$):

$$d_{k,k} = a_{k,k} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{k,j}^2 d_{j,j},$$

$$\ell_{i,k} = \frac{a_{i,k} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{i,j} d_{j,j} \ell_{k,j}}{d_{k,k}}$$

Programmmentwurf Cholesky-Verfahren

Für $k = 1, 2, \dots, n$:

$$\text{diag} \leftarrow a_{k,k} - \sum_{j < k} a_{k,j}^2 a_{j,j};$$

falls $\text{diag} < 10^{-5} a_{k,k}$ Abbruch

$$a_{k,k} \leftarrow \text{diag},$$

für $i = k + 1, \dots, n$

$$a_{i,k} \leftarrow (a_{i,k} - \sum_{j < k} a_{i,j} a_{j,j} a_{k,j}) / a_{k,k};$$

Rechenaufwand 3.36.

Man kann das Cholesky-Verfahren mit ca. $\frac{1}{6}n^3$ Multiplikationen und etwa ebenso vielen Additionen realisieren.

Der Rechenaufwand beträgt also etwa **die Hälfte des Aufwands der LR-Zerlegung**.

Bemerkung 3.37.

- ▶ LDL^T entspricht der LR-Zerlegung für $R = DL^T$. Bei s.p.d. Matrizen ist Pivotisierung weder nötig noch sinnvoll. Beachte, dass Pivotisierung die Symmetrie der Matrix zerstören würde.
- ▶ Die Lösung des Problems $Ax = b$ reduziert sich auf

$$\underbrace{L DL^T x}_{=y} = b, \text{ d.h. } Ly = b \text{ und } L^T x = D^{-1}y.$$

- ▶ In obiger Version enthält das Verfahren die Abfrage

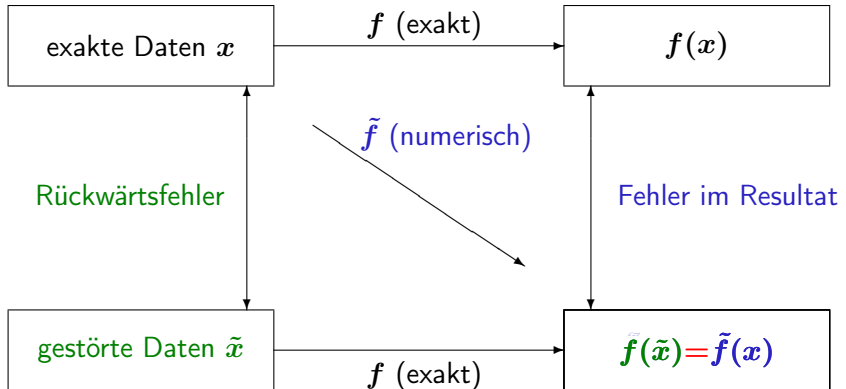
$$\text{diag} < 10^{-5} a_{k,k}$$

Falls dies gilt, kann nicht mehr gewährleistet werden, dass das entsprechende Pivotelement strikt positiv ist.

In diesem Sinne testet das Verfahren Positiv-Definitheit.

Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

Wiederholung: Rückwärtsanalyse



Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

Nach dem Prinzip der **Rückwärtsanalyse** wird das Ergebnis der Rechnung als **Ergebnis exakter Rechnung** zu **gestörten Eingabedaten** $A + \Delta A$ interpretiert.

Sei

$$Ax = b$$

mit A **symmetrisch positiv definit**.

Das **Cholesky-Verfahren** wird eingesetzt.

Man kann zeigen, dass die **berechnete** Lösung $\tilde{x}$ die **exakte** Lösung eines Systems

$$(A + \Delta A)\tilde{x} = b$$

ist, mit

$$\frac{\|\Delta A\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}} \lesssim c_n \cdot \text{eps.}$$

Hierbei ist c_n eine “kleine” Zahl und **eps** die Maschinengenauigkeit.

Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

Deshalb ist das Resultat $\tilde{x}$ mit einem Fehler von der Größenordnung des durch die Kondition bedingten **unvermeidbaren** Fehlers behaftet:

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \leq \frac{\kappa_{\infty}(A) \frac{\|\Delta A\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}}}{1 - \kappa_{\infty}(A) \frac{\|\Delta A\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}}} \lesssim \frac{\kappa_{\infty}(A) c_n \text{eps}}{1 - \kappa_{\infty}(A) c_n \text{eps}}$$

$$\approx \kappa_{\infty}(A) c_n \text{eps}$$

wenn $\kappa_{\infty}(A) c_n \text{eps} \ll 1$.

Damit ist das **Lösen eines s.p.d. Systems über das Cholesky-Verfahren stabil**.

Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

Falls A nicht symmetrisch positiv definit ist, kann man zur Lösung des Problems $Ax = b$ auf eine **LR-Zerlegung** der Matrix A zurückgreifen. Dazu wird die **Gauß-Elimination** eingesetzt.

Falls **Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung** angewendet wird, kann man Resultate wie beim Cholesky-Verfahren zeigen.

Damit kann man die Lösung eines linearen Gleichungssystems über die **Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung** als ein **stabiles Verfahren** einstufen (für praktische Anwendungen).

Die Lösung über die Gauß-Elimination **ohne Pivotisierung** ist **im allgemeinen nicht stabil**.

Hilbert-Matrix

$$H_n = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & & & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{3} & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \frac{1}{2n-3} & \frac{1}{2n-2} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}$$

$n \times n$ -Matrix
regulär
symmetrisch
positiv-definit

$$x := \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n, \quad \tilde{b} := H_n * x, \quad (\text{in Matlab, } \text{eps} \approx 10^{-16})$$

$H_n \tilde{x} = \tilde{b}$ gelöst mit stabiler Matlab-Methode. Matlab-Demo

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($\det A \neq 0$) und $b \in \mathbb{R}^n$, bestimme $x \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$A x = b.$$

Vorgehensweise: Bestimme eine Faktorisierung (Zerlegung) von A , so dass das Gleichungssystem “leichter” lösbar ist.

Verfahren:

- ▶ LR-Zerlegung: $PA = LR$, wobei L untere Dreiecksmatrix, R obere Dreiecksmatrix
- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$, wobei D Diagonalmatrix
- ▶ QR-Zerlegung: $A = QR$, wobei Q orthogonale Matrix

Warum QR?

Orthogonale Matrizen

Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ heißt **orthogonal**, falls

$$Q^T Q = I.$$

Das bedeutet,

- ▶ die Spalten von Q bilden eine Orthonormalbasis des $\mathbb{R}^m$;
- ▶ die Inverse von Q ist einfach zu bestimmen

$$Q^{-1} = Q^T.$$

Warum QR?

QR-Zerlegung

Gegeben sei eine rechteckige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, bestimme eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, so dass

$$A = QR.$$

- Lösung eines linear Gleichungssystems ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär)

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = \underbrace{Q^T b}_{\substack{\text{Matrix-Vektor-} \\ \text{Produkt}}}$$

Rückwärtseinsetzen

- QR-Zerlegung **auch für rechteckige Matrizen durchführbar.**

Satz 3.41.

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.
- (iii) $\kappa_2(Q) = 1$.
- (iv) Für beliebiges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ bzw. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \in \mathbb{N}$ beliebig, gilt $\|A\|_2 = \|QA\|_2 = \|AQ\|_2$.
- (v) Es gilt (für A wie vorhin) $\kappa_2(A) = \kappa_2(QA) = \kappa_2(AQ)$.
- (vi) Sei $\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann ist $Q\tilde{Q}$ orthogonal.

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

- ▶ **Givens-Rotation**

Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von A

- ▶ **Householder-Transformation**

Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von A

Givens-Rotationen

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s, r \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

Die Lösung ist: $r = \pm \sqrt{a^2 + b^2}$, $c := \frac{a}{r}$, $s := \frac{b}{r}$

Beachte

Drehung verändert nicht die Euklidische Länge eines Vektors, d.h.

$$\|(r, 0)^T\|_2 = |r| = \sqrt{a^2 + b^2} = \|(a, b)^T\|_2.$$

- Die obige (Rotations-)Matrix ist **orthogonal**.

Givens-Rotations-Matrix

Die orthogonale Matrix $G_{i,k} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ist gegeben durch

$$G_{i,k} = \begin{matrix} & & i \downarrow & & & & k \downarrow & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ i \rightarrow & \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & 0 & \dots & 0 & s \\ & & & 0 & 1 & & & 0 \\ & & & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & & & 1 & 0 \\ k \rightarrow & & & -s & 0 & \dots & 0 & c \\ & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Givens-Rotations-Matrix

... und damit ergibt sich

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & \begin{matrix} \textcolor{blue}{c} & 0 & \dots & 0 & \textcolor{blue}{s} \\ 0 & 1 & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & 1 & 0 \\ -\textcolor{blue}{s} & 0 & \dots & 0 & \textcolor{blue}{c} \end{matrix} & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ \textcolor{blue}{x}_i \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ \textcolor{blue}{x}_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ \textcolor{blue}{r} \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ \textcolor{blue}{0} \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}$$

für $r = \pm\sqrt{x_i^2 + x_k^2}$, $c = x_i/r$, $s = x_k/r$.

Beispiel 3.43.

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} \sqrt{26} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ und } G_{1,3} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{26}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{5}{\sqrt{26}} \end{pmatrix}.$$

Beispiel 3.45.

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & (*) & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{3,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & (*) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ Mit $*$ werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.
- ▶ Die Reihenfolge $G_{1,2}, G_{1,3}, G_{1,4}, G_{2,3}, G_{2,4}, G_{3,4}$ wäre auch möglich.

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim G_{1,4}} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim G_{2,4}} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ und } G_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}.$$

QR-Zerlegung über Givens-Rotation

Die obige Konstruktion mit Givens-Rotationen zeigt, dass für **jede** Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine **QR-Zerlegung existiert**.

Satz 3.47.

Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$A = Q R.$$

Merke:

Bei der Implementierung der QR-Zerlegung über Givens-Rotation werden die Matrizen $G_{i,k}$ **nie explizit aufgestellt**.

Givens-Rotation: Zusammenfassung

QR-Zerlegung über Givens-Rotationen:

- ▶ Das Verfahren ist **sehr stabil**. Pivotisierung ist **nicht erforderlich**.
- ▶ Durch Berücksichtigung von schon vorhandenen **0**-Einträgen bei dünnbesetzten Matrizen läßt sich das Verfahren **flexibel an die Struktur einer Matrix anpassen**.
- ▶ Der **Aufwand** für die QR-Zerlegung einer vollbesetzten $m \times n$ -Matrix über Givens-Rotationen beträgt etwa $\frac{4}{3}n^3$ Operationen, falls $m \approx n$, und etwa $2mn^2$ Operationen, falls $m \gg n$. Zu beachten ist aber, dass für dünnbesetzte Matrizen der Aufwand wesentlich niedriger ist.
- ▶ Bei der sogenannten **schnellen Givens-Rotation** wird der **Aufwand etwa halbiert**
 $(\sim \frac{2}{3}n^3, \text{ falls } n \approx m; \quad \sim mn^2, \text{ falls } m \gg n).$

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

- ▶ **Givens-Rotation**

Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von A

- ▶ **Householder-Transformation**

Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von A

Householder-Transformationen

Definition

Für $v = (v_1, \dots, v_n)^T \in \mathbb{R}^n$, $v \neq 0$ ist die Householder-Transformation definiert als

$$Q_v = I - 2 \frac{v v^T}{v^T v},$$

wobei die Dyade (Tensorprodukt), $v v^T$, gegeben ist durch

$$v v^T = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \cdot (v_1, \dots, v_n) = \begin{pmatrix} v_1 v_1 & \dots & v_1 v_n \\ \vdots & & \vdots \\ v_n v_1 & \dots & v_n v_n \end{pmatrix}.$$

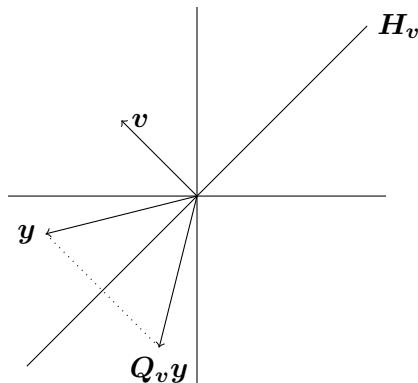
- Die Householder Transformation Q_v ist orthogonal, d.h.

$$Q_v^T Q_v = I, \quad Q_v^{-1} = Q_v^T$$

Householder-Transformationen

Geometrische Interpretation: Spiegelung an der Ebene normal zu v

$$H_v := \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^T v = 0\}$$



Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- ▶ $Q_v = Q_v^T$ **symmetrisch**, da $(vv^T)^T = vv^T$
- ▶ $Q_v^2 = I$
Zweimalige Spiegelung ergibt den ursprünglichen Punkt.
- ▶ $Q_{\alpha v} = Q_v, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$
Skalierung des Normalenvektors ändert nicht die Spiegelebene.
- ▶ $Q_v y = y \iff y^T v = 0$
Ursprünglicher und gespiegelter Punkt sind nur identisch, wenn der Punkt in der Spiegelebene liegt.
- ▶ $Q_v v = -v.$
Spiegelung des Normalenvektors vertauscht das Vorzeichen.

Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Zu $y \in \mathbb{R}^n$, $y \notin \text{span}(e^1)$, finde $v \in \mathbb{R}^n$, so dass gilt:

$$Q_v \cdot y = \pm \|y\|_2 \cdot e^1$$

- Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$v = y \mp \|y\|_2 \cdot e^1$$

- Um Auslöschung zu vermeiden, wählt man

$$v = y + \text{sign}(y_1) \cdot \|y\|_2 \cdot e^1, \text{ mit } \text{sign}(0) := 1.$$

Zusammenfassend

$$\begin{aligned} \alpha &= \text{sign}(y_1) \cdot \|y\|_2 \\ v &= y + \alpha \cdot e^1 \\ Q_v y &= -\alpha \cdot e^1 \end{aligned}$$

Beispiel 3.51.

Aufgabe

Zu $y = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ wird $v \in \mathbb{R}^3$ gesucht, so dass gilt:

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 \cdot e^1 = \pm 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Wir erhalten $\alpha = 3$, und $v = y + \alpha \cdot e^1 = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$, und damit

$$Q_v y = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beispiel 3.51.

Zur Berechnung von $Q_v y$ wird die explizite Form von Q_v

$$Q_v = I - 2 \frac{v v^T}{v^T v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \frac{\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} (5, 2, 1)}{(5, 2, 1) \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}} = \frac{1}{15} \begin{pmatrix} -10 & -10 & -5 \\ -10 & 11 & -2 \\ -5 & -2 & 14 \end{pmatrix}$$

nicht benötigt.

Beachte

$$Q_v w = \left(I - 2 \frac{v v^T}{v^T v} \right) w = w - \frac{2 v^T w}{v^T v} v.$$

Reduktion auf obere Dreiecksform

- ▶ Sei $\mathbf{a}^1$ die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- ▶ Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an:

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(a_{1,1}) \cdot \|\mathbf{a}^1\|_2 \cdot \mathbf{e}^1 \rightarrow Q_1 := Q_{v^1} \rightarrow Q_1 A$$

- ▶ Sei $\tilde{\mathbf{a}}^{(2),1}$ die erste Spalte der Matrix $\tilde{A}^{(2)} \dots$

$$A = A^{(1)}$$

*	*	...	...	*
*	*	...	...	*
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
*	*	...	...	*

$$Q_1 A = A^{(2)}$$

*	*	...	...	*
0	*	...	...	*
⋮	⋮	$\tilde{A}^{(2)}$		⋮
⋮	⋮			⋮
0	*	...	...	*

$$Q_2 Q_1 A = A^{(3)}$$

*	*	*	...	*
0	*	*	...	*
0	0	*	...	*
⋮	⋮	⋮	$\tilde{A}^{(3)}$	⋮
0	0	*	...	*

$$Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R, \text{ bzw. } A = Q_1^T Q_2^T \dots Q_{n-1}^T R = QR$$

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

1. Grundaufgabe mit $y = a^1$ (erste Spalte von A) ergibt

$$v^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} + 3 \cdot e^1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \rightarrow Q_1 = Q_{v^1}.$$

2. Für die zwei Spalten der Matrix $Q_1 A$ ergibt sich

$$Q_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{siehe Beispiel 3.51.})$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

3. Daraus folgt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

4. Grundaufgabe mit y gleich erster Spalte von $\tilde{A}^{(2)}$, d.h.
 $y = (-\frac{2}{3}, -\frac{2}{3})^T$, ergibt

$$v^2 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} - \frac{2}{3} \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3}(1+\sqrt{2}) \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \rightarrow \tilde{Q}_2 = \tilde{Q}_{v^2}.$$

Beispiel 3.52.

$$\tilde{Q}_2 \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} - \frac{2 \cdot (v^2)^T \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}}{(v^2)^T v^2} v^2 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

5. Damit ergibt sich

$$\tilde{Q}_2 \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

6. Insgesamt erhält man

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{Q}_2 \\ 0 & \end{pmatrix}}_{Q_2} Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Householder-Transformation: Zusammenfassung

- ▶ Die QR-Zerlegung über Householder-Transformationen ist ebenfalls **sehr stabil**.
- ▶ Gesonderte Pivotisierung ist **nicht erforderlich**.
- ▶ Der **Aufwand** für die QR-Zerlegung einer vollbesetzten $m \times n$ -Matrix über Householder-Transformationen ist etwa $\frac{2}{3}n^3$ Operationen, falls $m \approx n$, und etwa mn^2 Operationen, falls $m \gg n$.

Wichtige Anwendungen der **QR**-Zerlegung:

- ▶ Ausgleichsrechnung (siehe nächstes Kapitel)
- ▶ Berechnung von Eigenwerten

Zusammenfassung

- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$
 - ▶ Nur für symmetrisch positiv definite Matrizen (“symmetrische” LR-Zerlegung)
 - ▶ Berechnung durch elementweise Auswertung von $A = LDL^T$: Cholesky-Verfahren
- ▶ QR-Zerlegung: $A = QR$
 - ▶ Existiert auch für rechteckige Matrizen
 - ▶ Berechnung über Givens-Rotation, Housholder-Transformation (oder Gram-Schmidt)

Verständnisfragen

f Für die Matrix $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ ex. eine Cholesky-Zerlegung

Es sei $A = LDL^T$ mit $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10 & 1 \end{pmatrix}$ und $D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2.5 \end{pmatrix}$.

Geben Sie $\det A^{-1}$ an. **0.2**

w Für jede symmetrische orthogonale Matrix Q gilt $Q^2 = I$.

Es seien $v, x \in \mathbb{R}^2$ mit $v \neq 0$, $x = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix}$, und $Q_v = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v}$
eine Householder-Transformation.

Geben Sie $\|Q_v x\|_2^2$ an. **10**