6. Großübung

Rechenaufwand der LR- und LDL^T-Zerlegung

Rückwärtseinsetzen

Der Algorithmus kann der Folie 3.20 entnommen werden. Dieser kann in die folgenden Rechenoperationen aufgesplittet werden:

Für jedes $j = n-1, ..., 1$:

- $n - j$ Multiplikationen/Additionen und eine Division
- Ausnahme: für $j = n$ erfolgt nur eine Division

Insgesamt ergibt sich:

- $\sum_{j=1}^{n-1}(n-j) = \frac{n(n-1)}{2}$ Multiplikationen/Additionen
- n Divisionen

Beachte:

Wir werden im Folgenden nur die Multiplikationen und Divisionen zählen. Der höhere Aufwand bei einer Division im Vergleich zur Multiplikation wird nicht berücksichtigt, da die Anzahl der Divisionen in den verwendeten Algorithmen stets um eine Größenordnung geringer ist als die Anzahl der Multiplikationen.

Aufwandsabschätzung:

Es ergibt sich ein Aufwand von

$$\frac{n(n-1)}{2} + n = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n + n = \frac{1}{2}n^2 + \mathcal{O}(n)$$

Rechenoperationen (d.h. Multiplikationen oder Divisionen).

Vorwärtseinsetzen

Der Aufwand für das Vorwärtseinsetzen ist vergleichbar mit dem Rückwärtseinsetzen, allerdings entfällt aufgrund der Normierung der unteren Dreiecksmatrix L die Division.

Insgesamt ergibt sich:

- $\sum_{j=1}^{n-1}(n-j) = \frac{n(n-1)}{2}$ Multiplikationen/Additionen

Aufwandsabschätzung:

Bei alleiniger Betrachtung der Multiplikationen ergibt sich ein Aufwand von

$$\frac{n(n-1)}{2} = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n = \frac{1}{2}n^2 + \mathcal{O}(n)$$

Rechenoperationen.

Gauß-Elimination zur Erzeugung von L und R

Der Algorithmus der LR-Zerlegung (durch Gauß-Elimination) ist in Folie 3.25 beschrieben. Für eine LR-Zerlegung ohne Pivotisierung und Zeilenskalierung ergeben sich die folgenden Rechenoperationen:

Für jedes $j = 1, ..., n-1$:

- Einträge in L: $(n-j)$ Divisionen
- Einträge in R: $(n-j)^2$ Multiplikationen/Additionen

Aufwandsabschätzung:

Bei alleiniger Betrachtung der Multiplikationen und Divisionen ergibt sich ein Aufwand von

$$\sum_{j=1}^{n-1} \left[(n-j)^2 + (n-j)\right] = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n + \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n)$$

Zeilenskalierung

Bei der Zeilenskalierung werden die folgenden Rechenoperationen zur Bestimmung der Diagonalisierungsmatrix D_z durchgeführt:

- Zeilensummenberechnung: $n(n-1)$ Additionen
- Berechnung der d_{ii} aus den Zeilensummen: n Divisionen

Bei der Anwendung der Diagonalisierungsmatrix auf die Matrix A des Gleichungssystems ergeben sich die folgenden Rechenoperationen:

- Skalierung aller Elemente der Matrix A: n^2 Multiplikationen

Aufwandsabschätzung

Bei der Zeilenskalierung ergibt sich ein Gesamtaufwand in Höhe von $n^2 + \mathcal{O}(n)$ Multiplikationen/Divisionen.

Einige Folgerungen:

Gesamtaufwand für die LR-Zerlegung und Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen:

$$\begin{aligned}
\text{LR-Zerlegung:} &\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n \approx \frac{1}{3}n^3 \\
\text{Vorwärtseinsetzen:} &\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n \approx \frac{1}{2}n^2 \\
\text{Rückwärtseinsetzen:} &\frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n \approx \frac{1}{2}n^2
\end{aligned}$$

$$Summe: \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n \approx \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}\left(n^2\right)$$

Bei einer neuen rechten Seite ergibt sich ein zusätzlicher Aufwand in Höhe von n^2 Operationen für das Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen.

Zum Vergleich: Klassiche Gauß-Elimination inkl. der rechten Seite:

- Aufwand Gauß-Elimination: $\sum_{j=1}^{n-1}\left[(n-j)(n+1-j)+(n-j)\right] = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$
- Aufwand Rückwärtseinsetzen: $\frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n$

Mit insgesamt: $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$ Operationen ist der Aufwand für die klassische Gauß-Elimination bei einer (und ggfs. weiteren im Voraus bekannten) rechten Seite(n) identisch mit dem Aufwand der LR-Zerlegung. In der Praxis (z.B. vereinfachtes Newton-Verfahren) tritt jedoch häufig der Fall auf, dass sich die rechte Seite b des Gleichungssystems $Ax = b$ ändert, während die Matrix A unverändert beibehalten wird. In diesem Fall ist die LR-Zerlegung deutlich effizienter, da die Dreiecksmatrizen L und R auch bei veränderter rechter Seite beibehalten werden können.

Aufwand für die Berechnung der Inversen A^{-1}

Die Inverse A^{-1} des Gleichungssystems $Ax = b$ wird bestimmt, indem die LR-Zerlegung der Matrix A berechnet wird und anschließend die Spaltenvektoren der Einheitsmatrix als rechte Seite b eingesetzt werden. Die sich ergebenden Lösungsvektoren x bilden die Inverse A^{-1}.

Als Aufwand ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\text{LR-Zerlegung} \quad & \frac{1}{3}n^3 \\
\text{Vorwärtseinsetzen} \quad & n \cdot \frac{1}{2}n^2 \\
\text{Rückwärtseinsetzen} \quad & n \cdot \frac{1}{2}n^2 \\
Summe: \quad & \frac{4}{3}n^3
\end{aligned}$$

Aufwand für eine Matrix-Vektor-Multiplikation

Die Matrix-Vektor-Multiplikation wird z.B. bei der Berechnung $x = A^{-1}b$ benötigt. Es ergibt sich ein Aufwand von

$$n^2$$

Rechenoperationen (genauer: Multiplikationen).

$\Rightarrow$ Die Vektor-Matrix-Multiplikation bei der Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$ durch die Inverse A^{-1} ist genauso aufwändig wie die Lösung des Gleichungssystems durch Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen. Die Berechnung von $x = A^{-1}b$ ist jedoch deutlich aufwändiger als die Durchführung der entsprechenden LR-Zerlegung (s.o.). Daher wird in der Praxis die Bestimmung der Inversen vermieden.

Cholesky-Zerlegung

Die Cholesky-Zerlegung ist in den Folien 3.57 und 3.58 beschrieben. Es ergeben sich die folgenden Rechenoperationen:

Die Elemente $d_{jj}l_{kj}$ aus DL^T werden gesondert betrachtet, da deren Wert im Algorithmus wiederholt benötigt wird. Aufgrund des sich ergebenden geringeren Aufwands, ist eine Speicherung dieser Werte sinnvoll.

Für jede Zeile $k = 1, ..., n$ von L^T:

- $(n-k)$ Multiplikationen

Für die Diagonalelemente d_{kk} der Matrix D:
Für jedes $k = 1, ..., n$:

- $(k-1)$ Multiplikationen, falls $l_{kj}d_{jj}$ bekannt ist
- $1 + (k-2)$ Additionen

Für die Elemente l_{ik} *mit* $i \neq k$ der Matrix L (und L^T). Die Diagonalelemente mit $i = k$ müssen nicht berechnet werden, da es sich bei L um eine normierte untere Dreieicksmatrix handelt:
Für jede Spalte $k = 1, ..., n$ mit je $(n-k)$ Einträgen:

- $(n-k)\,(k-1)$ Multiplikationen
- $(n-k)$ Divisionen
- $(n-k)\,[1 + (k-2)]$ Additionen

Aufwandsabschätzung:

Bei alleiniger Betrachtung der Multiplikationen und Divisionen ergibt sich ein Aufwand von:

$$\sum_{k=1}^{n} \left[(n-k) + (k-1) + (n-k)\,(k-1) + (n-k)\right] = n^2 - n\frac{n\,(n+1)}{2} - \frac{n\,(n+1)\,(2n+1)}{6} - n = \frac{1}{6}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$$

Lineare Gleichungssysteme

Beispiele Bild und Kern von $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$
\begin{aligned}
Bild(A) &:= \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax,\ x \in \mathbb{R}^n\} \subseteq \mathbb{R}^m \\
Kern(A) &:= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\} \subseteq \mathbb{R}^n
\end{aligned}
$$

$b \overset{!}{=} Ax : b \in Bild(A) \Rightarrow$ Es existiert mindestens eine Lösung x

$\{0\} \neq Kern(A) \Rightarrow$ Lösung x ist nicht eindeutig, da $b = Ax = Ax + 0 = A(x - x_0)$

$b \notin Bild(A) \Rightarrow$ Es existiert keine Lösung x mit $Ax = b$

Beispiele $m = n$

$$
\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \end{array}\right)
$$

$\Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}$ ist Lösung, da $b \in Bild(A) = \mathbb{R}^2$ und eindeutig, da $Kern(A) = \{0\}$

$$
\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)
$$

$\Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix}$ ist Lösung $\forall \alpha \in \mathbb{R}$, da $b \in Bild(A) = \{y \in \mathbb{R}^2 : y_2 = 0\}$ aber nicht eindeutig da $Kern(A) = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 = 0\} \neq \{0\}$

$$
\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 4 \end{array}\right)
$$

$\Rightarrow$ keine Lösung, da $b \notin Bild(A) = \{y \in \mathbb{R}^2 : y_2 = 0\}$

Beispiele $m > n$:

$$
\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)
$$

$\Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}$ ist Lösung, da $b \in Bild(A) = \{y \in \mathbb{R}^3 : y_3 = 0\}$ und eindeutig, da $Kern(A) = \{0\}$

$$
\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)
$$

$\Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix}$ ist Lösung $\forall \alpha \in \mathbb{R}$, da $b \in Bild(A) = \{y \in \mathbb{R}^3 : y_2 = y_3 = 0\}$ aber nicht eindeutig, da $Kern(A) = \{x \in \mathbb{R}^2\ x_1 = 0\} \neq \{0\}$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

$\Rightarrow$ Keine Lösung, da $b \notin Bild(A) = \{y \in \mathbb{R}^2 : y_3 = 0\}$

Eigenschaften orthogonaler Matrizen:

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n\times n},\ A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

(a)

$$\begin{aligned} Q^TQ = I = QQ^T &\Leftrightarrow Q^{-1} = Q^T \\ &\Leftrightarrow (Q^T)^T = (Q^{-1})^T = (Q^T)^{-1} \end{aligned}$$

$\rightarrow$ d.h. Q^T ist auch orthogonale Matrix

(b)

$$\begin{aligned} 1 &= det(I) = det(Q^TQ) = det(Q^T)det(Q) \\ &= det(Q^{-1})det(Q) = det(Q)^2 \\ &\Rightarrow det(Q) = \begin{cases} +1 & ,\text{'Drehung' (Givens)} \\ -1 & ,\text{'Spiegelung' Househoulder} \end{cases} \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} \|Q\|_2 &= \sqrt{\lambda_{max}(Q^TQ)} = \sqrt{\lambda_{max}(I)} = 1 \\ \|Q^T\|_2 &= \|Q^{-1}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(Q^{-T}Q^{-1})} = \sqrt{\lambda_{max}(I)} = 1 \end{aligned}$$

(d)

$$\begin{aligned} \rightarrow &\|QA\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}A^TQ^TQA} = \sqrt{\lambda_{max}A^TA} = \|A\|_2 \\ &\|AQ\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}Q^TA^TAQ} = \sqrt{\lambda_{max}Q^{-1}A^TAQ} \overset{*}{=} \sqrt{\lambda_{max}A^TA} = \|A\|_2 \\ &*, \text{ da:} Mx = \lambda x \Rightarrow V^{-1}MVV^{-1}x = \lambda V^{-1}x \Leftrightarrow V^{-1}MV = \lambda y \end{aligned}$$

(e)

$$|Qx|_2 = \sqrt{x^TQ^TQx} = \sqrt{x^Tx} = \|x\|_2$$

$d) + c) \Rightarrow \|\cdot\|_2$-Norm invariant bzgl. Multiplikation mit orthogonalen Matrizen (sowohl Vektor- als auch Matrixnorm)

(f)

$$\kappa_2(Q) = \|Q\|_2\|Q^{-1}\|_2 \overset{c)}{=} 1$$

(g)

$$\kappa_2(QA) = \|QA\|_2 \cdot \|A^{-1}Q^{-1}\|_2 \overset{d)}{=} \|A\|_2\|A^{-1}\|_2 = \kappa_2(A)$$

(h)

$$(Q_1Q_2)^T(Q_1Q_2) = Q_2^TQ_1^TQ_1Q_2 = Q_2^TQ_2 = I$$

$\Rightarrow$ Produkte orthogonaler Matrizen wieder orthogoal.

Bemerkung

Wenn A nicht regulär ist, ist sowohl $\kappa_2(A)$ als auch $\kappa_2(QA)$ unendlich.

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2\|A^{-1}\|,$$

A^{-1} existiert nicht für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ bzw. A singulär.

<u>Allgemeine Definition:</u>

$$\kappa_2(A) := \underset{x\neq 0}{max}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \cdot \left(\underset{x\neq 0}{min}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}\right)^{-1} = \frac{\underset{\|x\|_2=1}{max}\|Ax\|_2}{\underset{\|x\|_2=1}{min}\|Ax\|_2}$$

Es gilt formal $\kappa_2(A) = \infty$, wenn der Nenner verschwindet. Dies tritt auf, wenn die Spalten von A lineär abhängig sind. Dies gilt immer für $m < n$, aber auch für $m \geq n$, wenn A keinen vollen Spaltenrang hat. Es gilt $Ax = 0$, für $x \neq 0$, wenn Spalten von A linear abhängig sind .