Numerische Mathematik für Maschinenbauer

Lineare Gleichungssysteme

A. Reusken

K.-H. Brakhage, Saskia Dietze, Thomas Jankuhn

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2018

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

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}.$$

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

Verfahren:

- LR-Zerlegung: $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}$, wobei $\boldsymbol{L}$ untere Dreiecksmatrix, $\boldsymbol{R}$ obere Dreiecksmatrix
- Cholesky-Zerlegung: $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^{T}$, wobei $\boldsymbol{D}$ Diagonalmatrix
- QR-Zerlegung: $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{R}$, wobei $\boldsymbol{Q}$ orthogonale Matrix

Satz 3.34.

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

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T,$$

wobei $\boldsymbol{L}$ eine normierte untere Dreiecksmatrix und $\boldsymbol{D}$ eine Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen

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

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

Beachte:

Aufgrund von Satz 3.33 ist bei s.p.d. Matrizen Gauß-Elimination ohne Pivotisierung durchführbar. $\Rightarrow$ "Symmetrische" LR-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)-Element: $d_{1,1} = a_{1,1} = 2 \quad \Rightarrow \boxed{d_{1,1} = 2}$

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

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

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

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

$\Rightarrow \ell_{3.2} = -(-1) \cdot 2 \cdot 3/3 \quad \Rightarrow \boxed{\ell_{3,2} = 2}$

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

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

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

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

$$\Rightarrow d_{2,2} = a_{2,2} - \ell_{2,1}^2 d_{1,1} \Rightarrow \boxed{d_{2,2} = 3}$$

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

$$\Rightarrow \ell_{3.2} = -a_{3,2} - \ell_{2,1}\ell_{3,1} d_{1,1}/d_{2,2} \Rightarrow \boxed{\ell_{3,2} = 2}$$

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

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

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

Cholesky-Verfahren

Ergebnis für die Einträge von L und D

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

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

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

Programmentwurf Cholesky-Verfahren

Für $k = 1, 2, \ldots, n$:

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

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

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

für $i = k+1, \ldots, n$

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

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

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

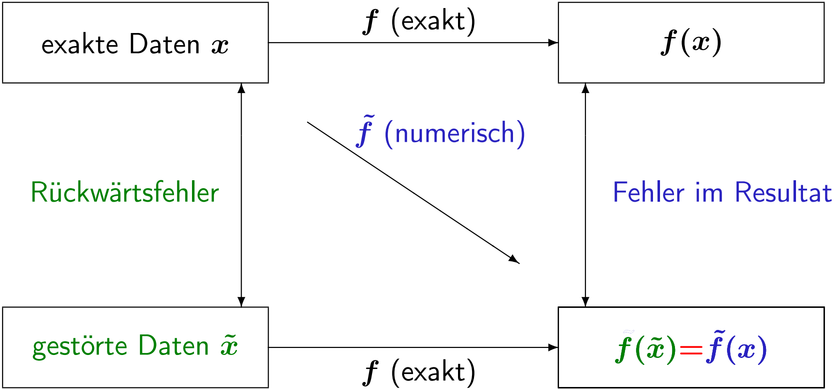
- In obiger Version enthält das Verfahren die Abfrage

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

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 $\boldsymbol{A} + \boldsymbol{\Delta A}$ interpretiert.
Sei

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

mit $\boldsymbol{A}$ symmetrisch positiv definit.
Das Cholesky-Verfahren wird eingesetzt.
Man kann zeigen, dass die berechnete Lösung $\tilde{\boldsymbol{x}}$ die exakte Lösung eines Systems

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

ist, mit

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

Hierbei ist $\boldsymbol{c_n}$ eine “kleine” Zahl und eps die Maschinengenauigkeit.

Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

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

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

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

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

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

Stabilitätsanalyse Cholesky-Verfahren und Gauß-Elimination

Falls $\boldsymbol{A}$ nicht symmetrisch positiv definit ist, kann man zur Lösung des Problems $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ auf eine $\boldsymbol{LR}$-Zerlegung der Matrix $\boldsymbol{A}$ 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.

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

Hilbert-Matrix

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

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

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

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

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

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

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}.$$

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

Verfahren:

- LR-Zerlegung: $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}$, wobei $\boldsymbol{L}$ untere Dreiecksmatrix,
  $\boldsymbol{R}$ obere Dreiecksmatrix
- Cholesky-Zerlegung: $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^{T}$, wobei $\boldsymbol{D}$ Diagonalmatrix
- QR-Zerlegung: $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{R}$, wobei $\boldsymbol{Q}$ orthogonale Matrix

Warum QR?

Orthogonale Matrizen

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

$$\boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}.$$

Das bedeutet,

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

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

Warum QR?

QR-Zerlegung

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

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{R}.$$

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

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \;\Leftrightarrow\; \underbrace{\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x} = \underbrace{\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}}_{\text{Matrix-Vektor-Produkt}}}_{\text{Rückwärtseinsetzen}}$$

- 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 $\boldsymbol{A}$
- **Givens-Rotation**
  Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von $\boldsymbol{A}$
- **Householder-Transformation**
  Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von $\boldsymbol{A}$

Givens-Rotationen

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s \in \mathbb{R}$ 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: $r = \pm\sqrt{a^2 + b^2}, \quad c := \frac{a}{r}, \quad s := \frac{b}{r}$

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

$$
G_{i,k} = \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccccccccccc} & & & i\downarrow & & & & k\downarrow & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ i\rightarrow \\ \\ \\ \\ k\rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & c & 0 & \cdots & 0 & s & & & \\
 & & & 0 & 1 & & & 0 & & & \\
 & & & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & & 0 & & & 1 & 0 & & & \\
 & & & -s & 0 & \cdots & 0 & c & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

Givens-Rotations-Matrix

…und damit ergibt sich

$$\begin{pmatrix} 1 &&&&&&&&&&& \\ & \ddots &&&&&&&&&& \\ && 1 &&&&&&&&& \\ &&& c & 0 & \cdots & 0 & s &&&& \\ &&& 0 & 1 && & 0 &&&& \\ &&& \vdots && \ddots && \vdots &&&& \\ &&& 0 &&& 1 & 0 &&&& \\ &&& -s & 0 & \cdots & 0 & c &&&& \\ &&&&&&&& 1 &&& \\ &&&&&&&&& \ddots && \\ &&&&&&&&&& 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ x_i \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ r \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ 0 \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}$$

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

Beispiel 3.43.

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

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.

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \overset{G_{1,2}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \overset{G_{1,3}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix} \overset{G_{2,3}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\overset{G_{1,4}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & \circledast & \circledast \end{pmatrix} \overset{G_{2,4}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & \circledast \end{pmatrix} \overset{G_{3,4}}{\rightsquigarrow} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & \circledast \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Mit $\circledast$ 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.

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

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 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine QR-Zerlegung existiert.

Satz 3.47.

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

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{R}.$$

Merke:

Bei der Implementierung der QR-Zerlegung über Givens-Rotation werden die Matrizen $\boldsymbol{G}_{i,k}$ nie explizit berechnet.

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
  $\left(\sim \frac{2}{3}n^3, \text{ falls } n \approx m; \quad \sim mn^2, \text{ falls } m \gg n \right)$.

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

  Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von $\boldsymbol{A}$

- **Givens-Rotation**

  Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von $\boldsymbol{A}$

- **Householder-Transformation**

  Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von $\boldsymbol{A}$

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, $v\,v^T$, gegeben ist durch

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

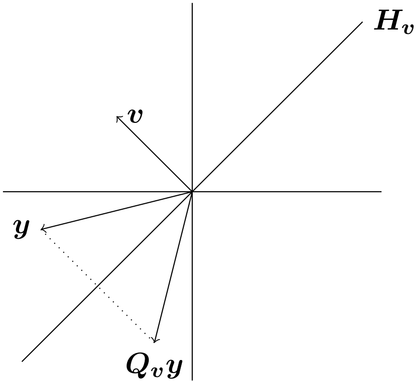
- Die Householder Transformation Q_v ist orthogonal, d.h.

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

Householder-Transformationen

Geometrische Interpretation: Spiegelung

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



Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- $Q_v = Q_v^T$
- $Q_v^2 = I$

  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.
- $Q_v y = y \iff y^T v = 0$

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

$$\boldsymbol{Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1}$$

- Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$\boldsymbol{v = y \pm \|y\|_2 e^1}$$

- Um Auslöschung zu vermeiden, wählt man

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

Zusammenfassend

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

Beispiel 3.51.

Aufgabe

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

$$\boldsymbol{Q_v y} = \pm\|\boldsymbol{y}\|_{\mathbf{2}}\boldsymbol{e}^{\mathbf{1}} = \pm\mathbf{3}\begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

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

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

Beispiel 3.51.

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

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

nicht benötigt.

Beachte

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

Reduktion auf obere Dreiecksform

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

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

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

$$A = A^{(1)} \qquad Q_1 A = A^{(2)} \qquad Q_2 Q_1 A = A^{(3)}$$

$$\left[\begin{array}{ccccc} * & * & \cdots & \cdots & * \\ * & * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ * & * & \cdots & \cdots & * \end{array}\right] \qquad \left[\begin{array}{c|cccc} * & * & \cdots & \cdots & * \\ \hline 0 & * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \tilde{A}^{(2)} & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \end{array}\right] \qquad \left[\begin{array}{cc|ccc} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \tilde{A}^{(3)} & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{array}\right]$$

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

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

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

$$\boldsymbol{v}^1 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{2} \\ \mathbf{2} \end{pmatrix} + \mathbf{3}\boldsymbol{e}^1 = \begin{pmatrix} \mathbf{4} \\ \mathbf{2} \\ \mathbf{2} \end{pmatrix} \rightarrow \boldsymbol{Q}_1 = \boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{v}^1}.$$

2. Für die zwei Spalten der Matrix $\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{A}$ ergibt sich

$$\boldsymbol{Q}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{2} \\ \mathbf{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{-3} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \qquad \text{(siehe Beispiel 3.51.)}$$

Beispiel 3.52.

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

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.

5. Damit ergibt sich

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

6. Insgesamt erhält man

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

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 $A \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ existiert 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