Numerische Mathematik für Maschinenbauer

Lineare Gleichungssysteme II

A. Reusken

K.-H. Brakhage, Amira El Amouri, Thomas Jankuhn

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2019

Heute in der Vorlesung

Themen: Dahmen & Reusken Kap 3.4-3.6

- Dreiecksmatrizen
- Gauß-Elimination und LR-Zerlegung
- Cholesky-Zerlegung

Was Sie mitnehmen sollten:

- Wie rechnet man mit Dreiecksmatrizen?
- Wie funktioniert die LR-Zerlegung?
- Warum benötigt man Pivotisierung?
- Was ist die Cholesky-Zerlegung?

Beispiel 3.16.

Löse das Gleichungssystem $\boldsymbol{R\,x = b}$, wobei

$$\boldsymbol{R = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}}, \quad \text{und} \quad \boldsymbol{b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}}.$$

Die spezielle Struktur von $\boldsymbol{R}$ erlaubt eine einfache Lösung:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x_3} &= \boldsymbol{4/2 = 2} \\ \boldsymbol{x_2} &= \boldsymbol{1 - 3 \cdot 2 = -5} \\ \boldsymbol{x_1} &= \boldsymbol{\tfrac{1}{3}\big(0 - (-1)\cdot(-5) - 2 \cdot 2\big) = -3} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Rückwärtseinsetzen

Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

Definition

Eine Matrix $\boldsymbol{R} = (r_{i,j})_{i,j=1}^{n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt obere Dreiecksmatrix, falls

$$r_{i,j} = 0 \quad \text{für } i > j$$

gilt.

Allgemeiner Fall:

$$\begin{array}{ccccccccc}
r_{1,1}\,x_1 & + & r_{1,2}\,x_2 & + & \cdots & + & r_{1,n}\,x_n & = & b_1 \\
 & & r_{2,2}\,x_2 & + & \cdots & + & r_{2,n}\,x_n & = & b_2 \\
 & & & \ddots & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & r_{n-1,n-1}\,x_{n-1} & + & r_{n-1,n}\,x_n & = & b_{n-1} \\
 & & & & & & r_{n,n}\,x_n & = & b_n
\end{array}$$

Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

Lösbarkeit

Da $\det R = r_{1,1} r_{2,2} \cdots r_{n,n}$ gilt, ist

$$Rx = b$$

genau dann stets eindeutig lösbar, wenn alle Diagonaleinträge $r_{j,j}$, $j = 1, \ldots, n$, von Null verschieden sind.

Vorgehen:

- Beginnend bei der letzten Gleichung

$$x_n = b_n / r_{n,n}.$$

- Einsetzen von x_n in die zweitletzte Gleichung

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - r_{n-1,n} x_n) / r_{n-1,n-1}.$$

- ...

Rechenaufwand

Für jedes $j = n-1, \ldots, 2, 1$:

1. $n - j$ Multiplikationen | Additionen,
2. eine Division,
3. und für $j = n$ eine Division.

Also insgesamt:

- $\displaystyle\sum_{j=1}^{n-1}(n-j) = \frac{n\,(n-1)}{2}$ Additionen | Multiplikationen,
- n Divisionen.

Rechenaufwand für Rückwärtseinsetzen

$$\text{ca. } \frac{1}{2}\,n^2 \text{ Operationen}$$

Operation = Multiplikation oder Division.

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

Gauß-Elimination: LR-Zerlegung

Die bekannteste Methode, das System

$$A\,x = b \qquad (\det A \neq 0)$$

auf Dreiecksgestalt zu bringen, ist die Gauß-Elimination.

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

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

- Einträge der Matrix $A^{(k)}$ werden mit $a_{i,j}^{(k)}$ notiert.
- Der Eintrag $a_{j,j}^{(j)}$ ($\circledast$ oben) heißt Pivotelement.
- In entsprechender Weise ist auch die rechte Seite b umzuformen.

Beispiel 3.19.

Löse das Gleichungssystem $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, wobei

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 4 & 0 & -3 & 1 \\ 6 & 1 & -1 & 6 \\ -2 & -5 & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ -8 \\ -16 \\ -12 \end{pmatrix}$$

mit Hilfe der Gauß-Elimination.

Wir benutzen die folgende Notation

$$\rightarrow \; (\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) = \left(\begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 4 & 0 & -3 & 1 & -8 \\ 6 & 1 & -1 & 6 & -16 \\ -2 & -5 & 4 & 1 & -12 \end{array}\right)$$

Beispiel 3.19.

Gauß-Elimination:

- 1. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,1} * \text{Zeile } 1)$ von Zeile i

$$j = 1 \qquad \begin{array}{rcl} & & \rightarrow \\ \ell_{2,1} & = & \frac{4}{2} \\ \ell_{3,1} & = & \frac{6}{2} \\ \ell_{4,1} & = & \frac{-2}{2} \end{array} \quad \left(\begin{array}{rrrr|r} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 4 & 8 & -3 & -19 \\ 0 & -6 & 1 & 4 & -11 \end{array}\right)$$

- 2. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,2} * \text{Zeile } 2)$ von Zeile i

$$j = 2 \qquad \begin{array}{rcl} & & \\ & & \rightarrow \\ \ell_{3,2} & = & \frac{4}{2} \\ \ell_{4,2} & = & \frac{-6}{2} \end{array} \quad \left(\begin{array}{rrrr|r} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 10 & -11 & -41 \end{array}\right)$$

Beispiel 3.19.

- 3. Schritt: subtrahiere $(\ell_{i,3} * \text{Zeile } 3)$ von Zeile i

$$j = 3 \qquad \ell_{4,3} = \frac{10}{2} \quad \rightarrow \quad \left(\begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -46 & -46 \end{array}\right) = (R \,|\, c)$$

Wegen $A\,x = b \Leftrightarrow R\,x = c$ liefert Rückwärtseinsetzen die Lösung

$$x = \left(-\frac{9}{2}, \quad 2, -3, \quad 1\right)^T.$$

Gauß-Elimination ohne Pivotisierung

- Bestimme $(A \,|\, b) \rightarrow (R \,|\, c)$
- Löse $R\,x = c$

Beispiel 3.22.

Für die Matrix

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 4 & 0 & -3 & 1 \\ 6 & 1 & -1 & 6 \\ -2 & -5 & 4 & 1 \end{pmatrix}$$

gilt

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R},$$

wobei

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 5 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -3 & 3 \\ 0 & 2 & 3 & -5 \\ 0 & 0 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & -46 \end{pmatrix}$$

die bei der Gauß-Elimination berechneten Dreiecksmatrizen sind.

Zusammenfassung

Ein bemerkenswertes “Nebenprodukt” der Gauß-Elimination ist also eine Faktorisierung von $\boldsymbol{A}$ in ein Produkt einer normierten unteren Dreiecksmatrix $\boldsymbol{L}$ mit einer oberen Dreiecksmatrix $\boldsymbol{R}$.

Satz 3.21.

Sind im Gauß-Algorithmus stets alle Pivotelemente ungleich null, dann erhält man

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R},$$

wobei $\boldsymbol{R}$ eine obere Dreiecksmatrix und $\boldsymbol{L}$ eine normierte untere Dreiecksmatrix ist.

Frage:

- Was passiert, wenn das Pivotelement identisch null ist?
- Was passiert, wenn das Pivotelement “sehr klein” ist?

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

- Ein verschwindendes Pivotelement bedeutet **nicht**, dass das lineare Gleichungssystem keine Lösung besitzt.
- Bei verschwindendem Pivotelement ist das Vertauschen von Zeilen notwendig.
- Selbst wenn das Pivotelement ungleich null, ist eine Vertauschung von Zeilen angebracht, um die Stabilität der Gauß-Elimination (bzw. LR-Zerlegung) zu verbessern.
- Als Pivotelement wählt man das betragsgrößte Element der jeweiligen Spalte.
- Da man das j-te Pivotelement in der j-ten Spalte sucht, nennt man diesen Vertauschungsvorgang Spaltenpivotisierung. Die Matrix sollte zuvor äquilibriert werden.

Beispiel 3.23.

Löse das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 0.00031 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -7 \end{pmatrix}.$$

Mit $l_{2,1} = 1/0.00031$ ergibt die Gauß-Elimination

$$(R\,|c) = \left(\begin{array}{cc|c} 0.00031 & 1 & -3 \\ 0 & 1 - \frac{1}{0.00031} & -7 - \frac{-3}{0.00031} \end{array}\right),$$

und bei 4-stelliger Rechnung schließlich

$$(R\,|c) = \left(\begin{array}{cc|c} 0.00031 & 1 & -3 \\ 0 & -3225 & 9670 \end{array}\right).$$

Rückwärtseinsetzen liefert dann ...

Beispiel 3.23.

$$\tilde{x}_1 \approx -6.452, \quad \tilde{x}_2 \approx -2.998.$$

Exakte Rechnung ergibt sich allerdings

$$x_1 = -4.00124\ldots, \quad x_2 = -2.998759\ldots,$$

d.h., $\tilde{x}_1$ ist auf keiner Stelle korrekt.

Dieses Ergebnis ist *unakzeptabel*, weil die Kondition des Problems sehr gut ist: $\kappa_\infty(A) = 4.00$.

Nach Spaltenpivotisierung mit 4-stelliger Rechnung erhält man

$$(R\,|c) = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & -7 \\ 0 & 0.9997 & -2.998 \end{array}\right)$$

und damit

$$\tilde{x}_1 \approx -4.001, \quad \tilde{x}_2 \approx -2.999,$$

also völlig akzeptable Werte.

Permutationsmatrix

Sei $P_{i,j}$ die elementare Permutationsmatrix, die durch Vertauschen der i-ten und j-ten Zeile der Einheitsmatrix I entsteht.

Beispiel

Für $n = 4$, $i = 2$, $j = 4$ erhält man

$$P_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es gelten die folgenden Resultate

$$\det P_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j, \\ -1 & \text{für } i \neq j, \end{cases}$$

und

$$P_{i,j}^{-1} = P_{i,j}.$$

Permutationsmatrix: Beispiel

Berechne die folgenden Matrix-Produkte für

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$P_{2,3}\,A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 \\ a & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der 2. und 3. Zeile}$$

$$A\,P_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 \\ b & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der 2. und 3. Spalte}$$

$$P_{2,3}\,A\,P_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b & 1 & 0 \\ a & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Vertauschen der Einträge } a \text{ und } b$$

LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung ist für jede nicht-singuläre Matrix durchführbar und es gilt folgende Verallgemeinerung von Satz 3.21..

Satz 3.25.

Zu jeder nichtsingulären Matrix $\boldsymbol{A}$ existiert eine Permutationsmatrix $\boldsymbol{P}$, eine (dazu) eindeutige untere normierte Dreiecksmatrix $\boldsymbol{L}$, deren Einträge sämtlich betragsmäßig durch $\mathbf{1}$ beschränkt sind, und eine eindeutige obere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{R}$, so dass

$$\boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}.$$

Die Matrizen $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{R}$ ergeben sich aus der Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung.

Durchführung der LR-Zerlegung

Skalierung und Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

- Bestimme die Diagonalmatrix

$$\boldsymbol{D} = \mathbf{diag}(\boldsymbol{d}_1, \ldots, \boldsymbol{d}_n),$$

so dass $\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{A}$ zeilenweise äquilibriert ist, d.h.

$$\boldsymbol{d}_i = \left(\sum_{k=1}^{n} |\boldsymbol{a}_{i,k}|\right)^{-1}, \quad \boldsymbol{i} = 1, \ldots, \boldsymbol{n}.$$

- Wende Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung auf $\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{A}$ an.

Aufwand

- Zeilensummenberechnung: $n\,(n-1)$ Additionen;
- Berechnung der Skalierung: n Divisionen;
- Für $j = 1, 2, \ldots, n-1$ Berechnung der neuen Einträge
  - in L: $(n-j)$ Divisionen
  - in R: $(n-j)^2$ Multiplikationen | Additionen

Dominierender Aufwand: $\sum_{j=1}^{n-1}(n-j)^2 = \sum_{j=1}^{n-1} j^2 \sim n^3/3.$

Rechenaufwand 3.29.

LR-Zerlegung über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung kostet

$$\approx \frac{1}{3}n^3 \text{ Operationen.}$$

Die Skalierung (falls nötig) kostet nur $\mathcal{O}(n^2)$ Operationen.

Beispiel 3.30.

Zeilenäquilibrierung

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 5 & 0 \\ 2 & 2 & 2 \\ -2 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad D=\begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow DA=\begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Beispiel 3.30.

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung:

1. Schritt:

$$DA \xrightarrow{\text{Vertauschung}} \begin{array}{|ccc|}\hline -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & 0 \\ \hline\end{array} \xrightarrow{\text{Elimination}} \begin{array}{|c|cc|}\hline -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \hline -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ \hline\end{array}$$

2. Schritt:

$$\xrightarrow{\text{Vertauschung}} \begin{array}{|c|cc|}\hline -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \hline -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \hline\end{array} \xrightarrow{\text{Elimination}} \begin{array}{|c|c|c|}\hline -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \hline -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ \cline{2-3} -\frac{2}{3} & \frac{2}{5} & \frac{3}{5} \\ \hline\end{array}$$

Ergebnis: $\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{5} & 1 \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$.

Beispiel 3.30.

Man rechnet einfach nach, dass

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R} = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{A}$$

gilt, wobei

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix $\boldsymbol{P}$ ist das Produkt von $\boldsymbol{P}_{2,3}$ und $\boldsymbol{P}_{1,3}$.

Merke

- Skalierung/Äquilibrierung: $\boldsymbol{A} \rightsquigarrow \boldsymbol{D}\boldsymbol{A}$ mit einer kleineren Konditionszahl.
- Pivotisierung verbessert die Stabilität der Gauß-Elimination/ LR-Zerlegung.

Anwendungen der LR-Zerlegung

Sei $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Matrix, die schon zeilenweise äquilibriert ist.
Sei für diese Matrix die LR-Zerlegung $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}$ bekannt.

1. Lösen eines Gleichungssystems

Die Lösung von

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

ergibt sich über die Lösung zweier Dreieckssysteme

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \iff \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{b} \iff \boldsymbol{L}\,\underbrace{\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x}}_{=\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{b}$$

- Bestimme $\boldsymbol{y}$ durch Vorwärtseinsetzen aus $\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{b}$.
- Berechne $\boldsymbol{x}$ aus $\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ durch Rückwärtseinsetzen.

Anwendungen der LR-Zerlegung

2. Mehrere rechte Seiten

Gesucht seien die Lösungen $\boldsymbol{x}^k$ des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{b}^k, \quad k = 1, \ldots, K,$$

wobei $\boldsymbol{A}$ eine konstante Matrix ist und $\boldsymbol{b}^k,\ k = 1, \ldots, K$, verschiedene rechte Seiten sind (Beispiel Zeitdiskretisierung).

Vorgehen

- Bestimme (einmalig) LR-Zerlegung von $\boldsymbol{A}$, d.h.

$$\boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}$$

- Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen für jede rechte Seite

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{y}^k &= \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{b}^k \\ \boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x}^k &= \boldsymbol{y}^k \end{aligned}$$

Aufwand: $\frac{1}{3}\,n^3 + K\,n^2$ (vs. $\frac{1}{3}\,n^3\,K$ ohne LR-Zerlegung)

Anwendungen der LR-Zerlegung

3. Berechnung der Inversen

Sei $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{i}} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$ die $\boldsymbol{i}$-te Spalte der Inversen von $\boldsymbol{A}$:

$$\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{x}^1 \; \boldsymbol{x}^2 \; \cdots \; \boldsymbol{x}^n).$$

Aus $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I}$ folgt

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^i = \boldsymbol{e}^i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Zur Berechnung der Inversen bietet sich folgende Strategie an:

- Bestimme die LR-Zerlegung $\boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}$ über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung,
- Löse die Gleichungssysteme

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{x}^i = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{e}^i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Gesamtaufwand: etwa $\frac{4}{3}\,n^3$ Operationen.

Anwendungen der LR-Zerlegung

4. Berechnung von Determinanten

Aus $P\,A = L\,R$ folgt

$$\det P\,\det A = \det L\,\det R = \det R.$$

Wegen

$$\begin{aligned}\det P &= \det P_{n,r_n}\cdots\det P_{n-1,r_{n-1}} \\ &= (-1)^{\#\text{Zeilenvertauschungen}},\end{aligned}$$

folgt

$$\det A = (-1)^{\#\text{Zeilenvertauschungen}} \prod_{j=1}^{n} r_{j,j}.$$

Symmetrisch positiv definite Matrix

Definition 3.31.

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

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

und

$$\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}} \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x} > \boldsymbol{0} \qquad \text{(positiv definit)}$$

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

Tritt bei vielen (physikalischen) Problemen auf:

- Diffusions-/Wärmeleitungsgleichung
- Normalgleichungen (Lineare Ausgleichsrechnung)
- ...

Beispiel 3.32.

1. $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$ (Identität) ist symmetrisch positiv definit.

   Die Symmetrie ist trivial und

   $$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{I}\, \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2^2 > \mathbf{0},$$

   falls $\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$.

2. Sei $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{m} \geq \boldsymbol{n}$, und $\boldsymbol{B}$ habe vollen Rang.

   Dann ist

   $$\boldsymbol{A} := \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}}$$

   symmetrisch positiv definit (s.p.d.), denn:

Beispiel 3.32.

2. Zunächst gilt:

$$A^T = (B^T B)^T = B^T (B^T)^T = B^T B = A.$$

Sei $x \in \mathbb{R}^n, \ x \neq 0$.

Dann gilt

$$x^T A\, x = x^T B^T B\, x = (B\, x)^T (B\, x) = \|B\, x\|_2^2 \geq 0.$$

Es gilt

$$x^T Ax = \|Bx\|_2^2 = 0$$

nur falls $B\, x = 0$ gilt.

Da B vollen Rang hat, muss daher $x = 0$ sein.

Satz 3.33.

$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}}$ sei s.p.d. Dann gelten folgende Aussagen:

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

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.

Beachte:

Aufgrund von Satz 3.33. ist bei s.p.d. Matrizen Gauß-Elimination ohne Pivotisierung durchführbar. $\Rightarrow$ “Symmetrische” LR-Zerlegung

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

Beispiel: Für $n = 3$ ergibt sich

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix}.$$

und damit

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

$$\ldots = \begin{pmatrix} d_{1,1} & \ldots & \ldots \\ \ell_{2,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}^2 d_{1,1} + d_{2,2} & \ldots \\ \ell_{3,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1} + \ell_{3,2}d_{2,2} & \ell_{3,1}^2 d_{1,1} + \ell_{3,2}^2 d_{2,2} + d_{3,3} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{1,1} & \ldots & \ldots \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \ldots \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} = A$$

Die elementweise Auswertung der Gleichung $LDL^T = A$, die man aufgrund der Symmetrie auf den unteren Dreiecksteil beschränken kann, ergibt dann zum Beispiel

$$\begin{aligned} d_{1,1} &= a_{1,1} \\ \ell_{2,1} &= a_{2,1}/d_{1,1} \\ \ell_{3,1} &= a_{3,1}/d_{1,1} \\ d_{2,2} &= \ldots \end{aligned}$$

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

$$\ldots = \begin{pmatrix} d_{1,1} & \ldots & \ldots \\ \ell_{2,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}^2 d_{1,1} + d_{2,2} & \ldots \\ \ell_{3,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1} + \ell_{3,2}d_{2,2} & \ell_{3,1}^2 d_{1,1} + \ell_{3,2}^2 d_{2,2} + d_{3,3} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{1,1} & \ldots & \ldots \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \ldots \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} = A$$

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

$$\begin{aligned} d_{k,k} &= a_{k,k} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{k,j}^2 d_{j,j}, \\ \ell_{i,k} &= \left(a_{i,k} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{i,j} d_{j,j} \ell_{k,j} \right) \Big/ d_{k,k}. \end{aligned}$$

Beispiel 3.35.

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -2 \\ 6 & 21 & 0 \\ -2 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

1. Spalte:

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

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

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

2. Spalte:

(2,2)-Element: $\ell_{2,1}^2 d_{1,1} + d_{2,2} = a_{2,2} = 21 \Rightarrow \boxed{d_{2,2} = 3}$

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

Beispiel 3.35.

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -2 \\ 6 & 21 & 0 \\ -2 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

3. Spalte:

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

$$\Longrightarrow \boxed{d_{3,3} = 2}$$

Damit ergibt sich schließlich

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

Programmentwurf Cholesky-Verfahren

$\texttt{Für } k = 1, 2, \ldots, n :$

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

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

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

$\quad \texttt{für } i = k+1, \ldots, n$

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

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.

- $\boldsymbol{L\,D\,L^T}$ entspricht der LR-Zerlegung für $\boldsymbol{R = D\,L^T}$. Bei s.p.d. Matrizen ist Pivotisierung weder nötig noch sinnvoll. Beachte, dass Pivotisierung die Symmetrie der Matrix zerstören würde.

- Die Lösung des Problems $\boldsymbol{A\,x = b}$ reduziert sich auf

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

- In obiger Version enthält das Verfahren die Abfrage

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

Falls dies gilt, kann nicht mehr gewährleistet werden, dass das entsprechende Pivotelement strikt positiv ist.
In diesem Sinne testet das Verfahren Positiv-Definitheit.

Zusammenfassung

- Dreiecksmatrizen ergeben leicht lösbare Systeme:
  Aufwand ca. $\frac{1}{2}n^2$ Operationen.
- Zeilenskalierung vs. Pivotisierung
  - Skalierung/Äquilibrierung: $A \rightsquigarrow DA$ mit einer *kleineren Konditionszahl* (sogenannte Vorkonditionierung).
  - Pivotisierung verbessert die Stabilität der Gauß-Elimination/ LR-Zerlegung.
- LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung:
  stabile und effiziente Methode, Aufwand $\sim \frac{1}{3}n^3$ Operationen
- A s.p.d. $\Leftrightarrow$ es existiert eine Cholesky-Zerlegung $A = LDL^T$.
  Das Cholesky-Verfahren zur Bestimmung dieser Zerlegung.
  Aufwand: $\sim \frac{1}{6}n^3$ Operationen.

Verständnisfragen

Es seien $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ beliebig aber regulär, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$ und gesucht sei die Lösung $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$ von $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

$\boxed{\text{f}}$ Es sei $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre obere Dreiecksmatrix. Der Rechenaufwand zur Bestimmung der Lösung $\boldsymbol{y}$ von $\boldsymbol{R}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ über Rückwärtseinsetzen beträgt etwa $\boldsymbol{n^3/3}$ Operationen.

$\boxed{\text{w}}$ Es existieren stets eine Permutationsmatrix $\boldsymbol{P}$, eine normierte untere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{L}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{R}$, so dass $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LR}$ gilt.

$\boxed{\text{w}}$ Sei $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LR}$ die über den Gauß-Algorithmus mit Spaltenpivotisierung berechnete Faktorisierung. Dann gilt: $\det \boldsymbol{A} = \det \boldsymbol{R}$ oder $\det \boldsymbol{A} = -\det \boldsymbol{R}$.

Verständnisfragen

Es seien $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ beliebig aber regulär, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$ und gesucht sei die Lösung $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$ von $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

w Ohne Pivotisierung ist die Gauß-Elimination nicht für jedes $\boldsymbol{A}$ durchführbar.

Es seien $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -3 & 4 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{D}$ die zugehörige Diagonalmatrix der Zeilenskalierung. Berechnen Sie $||\boldsymbol{D}||_2$. 0.25