

# 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  $\mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ , wobei

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

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

$$x_3 = 4/2 = 2$$

$$x_2 = 1 - 3 \cdot 2 = -5$$

$$x_1 = \frac{1}{3}(0 - (-1) \cdot (-5) - 2 \cdot 2) = -3$$

⇒ Rückwärtseinsetzen



# Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen

## Lösbarkeit

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

$$R x = b$$

genau dann stets eindeutig lösbar, wenn alle Diagonaleinträge  $r_{j,j}$ ,  $j = 1, \dots, n$ , 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  $j = n - 1, \dots, 2, 1$ :

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

Also insgesamt:

- ▶  $\sum_{j=1}^{n-1} (n - j) = \frac{n(n-1)}{2}$  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  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ( $\det A \neq 0$ ) und  $b \in \mathbb{R}^n$ , bestimme  $x \in \mathbb{R}^n$ , so dass

$$Ax = b.$$

**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

## Gauß-Elimination: LR-Zerlegung

Die bekannteste Methode, das System

$$Ax = b \quad (\det A \neq 0)$$

auf Dreiecksgestalt zu bringen, ist die Gauß-Elimination.

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

⊗	*	...	...	*
*	*	...	...	*
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
*	*	...	...	*

$$A^{(2)}$$

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

$$A^{(3)}$$

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

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

## Beispiel 3.19.

Löse das Gleichungssystem  $Ax = b$ , wobei

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

mit Hilfe der Gauß-Elimination.

Wir benutzen die folgende Notation

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

## Beispiel 3.19.

Gauß-Elimination:

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

$$j = 1$$

$$\begin{aligned} \ell_{2,1} &= \frac{4}{2} \\ \ell_{3,1} &= \frac{6}{2} \\ \ell_{4,1} &= \frac{-2}{2} \end{aligned} \rightarrow \left( \begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 4 & 8 & -3 & -19 \\ 0 & -6 & 1 & 4 & -11 \end{array} \right)$$

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

$$j = 2$$

$$\begin{aligned} \ell_{3,2} &= \frac{4}{2} \\ \ell_{4,2} &= \frac{-6}{2} \end{aligned} \rightarrow \left( \begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & -3 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 10 & -11 & -41 \end{array} \right)$$

## Beispiel 3.19.

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

$$j = 3$$

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

Wegen  $Ax = b \Leftrightarrow Rx = c$  liefert Rückwärtseinsetzen die Lösung

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

Gauß-Elimination ohne Pivotisierung

- ▶ Bestimme  $(A | b) \rightarrow (R | c)$
- ▶ Löse  $Rx = c$

## Beispiel 3.22.

Für die Matrix

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

gilt

$$A = L R,$$

wobei

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

die bei der Gauß-Elimination berechneten Dreiecksmatrizen sind.

## Zusammenfassung

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

Satz 3.21.

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

$$A = L R,$$

wobei  $R$  eine obere Dreiecksmatrix und  $L$  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

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

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  $A$  existiert eine Permutationsmatrix  $P$ , eine (dazu) eindeutige untere normierte Dreiecksmatrix  $L$ , deren Einträge sämtlich betragsmäßig durch 1 beschränkt sind, und eine eindeutige obere Dreiecksmatrix  $R$ , so dass

$$P A = L R.$$

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

# Durchführung der LR-Zerlegung

## Skalierung und Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung

- ▶ Bestimme die Diagonalmatrix

$$D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n),$$

so dass  $D A$  zeilenweise äquilibriert ist, d.h.

$$d_i = \left( \sum_{k=1}^n |a_{i,k}| \right)^{-1}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- ▶ Wende Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung auf  $D A$  an.

## Aufwand

- ▶ Zeilensummenberechnung:  $n(n-1)$  Additionen;
- ▶ Berechnung der Skalierung:  $n$  Divisionen;
- ▶ Für  $j = 1, 2, \dots, n-1$  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

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

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

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

## Beispiel 3.30.

Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung:

1. Schritt:

$$DA \xrightarrow{\text{Vertauschung}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \mathbf{0} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Elimination}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \mathbf{0} & \frac{1}{2} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

2. Schritt:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \mathbf{0} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Vertauschung}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \mathbf{0} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{5}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Elimination}}$$

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

## Beispiel 3.30.

Man rechnet einfach nach, dass

$$LR = PDA$$

gilt, wobei

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

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

**Merke**

- ▶ Skalierung/Äquilibrierung:  $A \rightsquigarrow DA$  mit einer kleineren Konditionszahl.
- ▶ Pivottisierung verbessert die Stabilität der Gauß-Elimination/LR-Zerlegung.

# Anwendungen der LR-Zerlegung

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

## 1. Lösen eines Gleichungssystems

Die Lösung von

$$Ax = b$$

ergibt sich über die Lösung zweier Dreieckssysteme

$$Ax = b \iff PAx = Pb \iff L \underbrace{Rx}_{=y} = Pb$$

- ▶ Bestimme  $y$  durch Vorwärtseinsetzen aus  $Ly = Pb$ .
- ▶ Berechne  $x$  aus  $Rx = y$  durch Rückwärtseinsetzen.

# Anwendungen der LR-Zerlegung

## 2. Mehrere rechte Seiten

Gesucht seien die Lösungen  $x^k$  des linearen Gleichungssystems

$$A x^k = b^k, \quad k = 1, \dots, K,$$

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

### Vorgehen

- ▶ Bestimme (einmalig) LR-Zerlegung von  $A$ , d.h.

$$P A = L R$$

- ▶ Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen für jede rechte Seite

$$L y^k = P b^k$$

$$R x^k = y^k$$

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

$$A^{-1} = (x^1 \ x^2 \ \dots \ x^n).$$

Aus  $A A^{-1} = I$  folgt

$$A x^i = e^i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Zur Berechnung der Inversen bietet sich folgende Strategie an:

- ▶ Bestimme die LR-Zerlegung  $PA = LR$  über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung,
- ▶ Löse die Gleichungssysteme

$$LRx^i = Pe^i, \quad i = 1, \dots, n.$$

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

# Anwendungen der LR-Zerlegung

## 4. Berechnung von Determinanten

Aus  $PA = LR$  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.

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

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

und

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

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

Tritt bei vielen (physikalischen) Problemen auf:

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

## Beispiel 3.32.

1.  $A = I$  (Identität) ist symmetrisch positiv definit.

Die Symmetrie ist trivial und

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

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

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

Dann ist

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

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

$$x^T A x = \|B x\|_2^2 = 0$$

nur falls  $B x = 0$  gilt.

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

## Satz 3.33.

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

- ▶  $A$  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.

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

$$Ax = b.$$

**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

## 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

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

# Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

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

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

# Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

$$\begin{aligned} \dots &= \begin{pmatrix} d_{1,1} & \dots & \dots \\ \ell_{2,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}^2d_{1,1} + d_{2,2} & \dots \\ \ell_{3,1}d_{1,1} & \ell_{2,1}\ell_{3,1}d_{1,1} + \ell_{3,2}d_{2,2} & \ell_{3,1}^2d_{1,1} + \ell_{3,2}^2d_{2,2} + d_{3,3} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{1,1} & \dots & \dots \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} = A \end{aligned}$$

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

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

# Beispiel 3.35.

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

## 1. Spalte:

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

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

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

## 2. Spalte:

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

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

## Beispiel 3.35.

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

**3. Spalte:**

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

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

Damit ergibt sich schließlich

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

# 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

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

- ▶ 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.

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

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

**w** Es existieren stets eine Permutationsmatrix  $P$ , eine normierte untere Dreiecksmatrix  $L$  und eine obere Dreiecksmatrix  $R$ , so dass  $PA = LR$  gilt.

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

# Verständnisfragen

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

**W** Ohne Pivotisierung ist die Gauß-Elimination nicht für jedes  $A$  durchführbar.

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