

3

Lineare Gleichungssysteme

Wir wissen bereits, dass ein lineares Gleichungssystem genau dann eindeutig lösbar ist, wenn die zugehörige Matrix regulär ist. In diesem Kapitel lernen wir unterschiedliche Verfahren zur Lösung von linearen Gleichungssystemen mit quadratischen Matrizen kennen. In Abschn. 3.1 untersuchen wir den Spezialfall von Dreiecksmatrizen, welche effizient durch Vorwärts- bzw. Rückwärtselimination gelöst werden können. Ein Verfahren für allgemeine Matrizen ist das Gauß-Verfahren, welches in Abschn. 3.2 diskutiert wird. In Abschn. 3.3 bis Abschn. 3.5 analysieren wir Matrixfaktorisierungen, welche ebenfalls zur Lösung von Gleichungssystemen verwendet werden können. Es folgt in Abschn. 3.6 ein weiterer Spezialfall, nämlich das Lösen von Gleichungssystemen mit Tridiagonalmatrizen. Wir werden sehen, dass derartige Systeme besonders effizient gelöst werden können. Da in vielen Anwendungsfällen häufig sehr große Gleichungssysteme gelöst werden müssen, können diese aufgrund des hohen Rechenaufwands ggf. nicht mehr exakt gelöst werden. In Abschn. 3.7 und Abschn. 3.8 präsentieren wir daher iterative Lösungsverfahren, welche die exakte Lösung unter Umständen nur approximieren, dafür allerdings deutlich effizienter sind als beispielsweise die Faktorisierungsverfahren zuvor. Schließlich fassen wir in Abschn. 3.9 nochmals zusammen, unter welchen Umständen welches Verfahren zur Lösung eines linearen Gleichungssystems verwendet werden sollte.

3.1 Dreiecksmatrizen

Wir untersuchen zunächst die Lösbarkeit von linearen Gleichungssystemen

$$A \cdot x = b$$

mit Dreiecksmatrizen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, welche wir zunächst definieren:

=

Definition 3.1 Eine quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt **untere Dreiecksmatrix**, falls $a_{i,j} = 0$ für alle $j > i$. A heißt **obere Dreiecksmatrix**, falls $a_{i,j} = 0$ für alle $j < i$.

Eine Dreiecksmatrix heißt **normiert**, falls $a_{k,k} = 1$ für $k = 1, \dots, n$.

Als Folgerung ergibt sich direkt, dass eine $(n \times n)$ -Dreiecksmatrix genau dann regulär ist, falls $a_{k,k} \neq 0$ für alle $k = 1, \dots, n$ gilt, da die Spalten bzw. Zeilen in diesem Falle linear unabhängig sind.

?

Aufgabe 3.1 Zeige, dass die Multiplikation von unteren Dreiecksmatrizen wieder eine untere Dreiecksmatrix ergibt. Ist die Multiplikation von zwei normierten unteren Dreiecksmatrizen auch eine normierte Dreiecksmatrix? Gelten die Ergebnisse auch für obere Dreiecksmatrizen?

Lineare Gleichungssysteme mit Dreiecksmatrizen lassen sich sehr einfach lösen, wie die folgenden beiden Ergebnisse zeigen:

!

Satz 3.1 (Vorwärtselimination) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine untere Dreiecksmatrix mit $a_{k,k} \neq 0$ für $k = 1, \dots, n$ und sei $b \in \mathbb{R}^n$. Dann lässt sich die Lösung des linearen Gleichungssystems $A \cdot x = b$ durch

$$x_k = \frac{1}{a_{k,k}} \cdot \left(b_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_{k,i} \cdot x_i \right) \quad \text{für } k = 1, \dots, n \quad (3.1)$$

bestimmen.

Eine ähnliche Aussage gilt auch für obere Dreiecksmatrizen:

!

Satz 3.2 (Rückwärtselimination) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix mit $a_{k,k} \neq 0$ für $k = 1, \dots, n$ und sei $b \in \mathbb{R}^n$. Dann lässt sich die Lösung des linearen Gleichungssystems $A \cdot x = b$ (rückwärts) durch

$$x_k = \frac{1}{a_{k,k}} \cdot \left(b_k - \sum_{i=k+1}^n a_{k,i} \cdot x_i \right) \quad \text{für } k = n, \dots, 1 \quad (3.2)$$

bestimmen.

Die Komplexität der Vorwärts- bzw. Rückwärtselimination zur Lösung eines linea-

ren Gleichungssystems $A \cdot x = b$ lässt sich nun in Abhängigkeit der Größe n des Gleichungssystems angeben. Da jeweils n Werte bestimmt werden müssen und zu jedem Wert eine Summe mit bis zu n Additionen berechnet werden muss, erhalten wir insgesamt eine Komplexität von

$$\mathcal{O}(n^2).$$

Wenn wir also n verdoppeln, dann vervierfacht sich die Laufzeit zur Lösung des Gleichungssystems.

3.2 Gauß-Verfahren

Gegeben sei eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie ein Vektor $b \in \mathbb{R}^n$. Wir wollen nun zeigen, wie die Lösung $x \in \mathbb{R}^n$ des linearen Gleichungssystems

$$A \cdot x = b$$

im Allgemeinen berechnet werden kann. Dazu wiederholen wir, dass das lineare Gleichungssystem ausgeschrieben aus den folgenden n Gleichungen mit jeweils n Unbekannten besteht:

$$\begin{aligned} a_{1,1} \cdot x_1 + a_{1,2} \cdot x_2 + \dots + a_{1,n} \cdot x_n &= b_1 \\ a_{2,1} \cdot x_1 + a_{2,2} \cdot x_2 + \dots + a_{2,n} \cdot x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n,1} \cdot x_1 + a_{n,2} \cdot x_2 + \dots + a_{n,n} \cdot x_n &= b_n. \end{aligned}$$

Das Verfahren, welches wir im Folgenden vorstellen, wird als **Gauß-Verfahren** bezeichnet. Als Grundlage dienen folgende Beobachtungen (wobei wir zunächst annehmen, dass das Gleichungssystem eine eindeutige Lösung x besitzt):

- (1) Durch das Multiplizieren einer Gleichung bzw. Zeile mit einer reellen Zahl $c \neq 0$ bleibt die Lösung x des Gleichungssystems unverändert.
- (2) Durch das Addieren einer Gleichung bzw. Zeile zu einer anderen Gleichung bzw. Zeile bleibt die Lösung x des Gleichungssystems unverändert.
- (3) Durch das Tauschen zweier Gleichungen bzw. Zeilen bleibt die Lösung x des Gleichungssystems unverändert.

Die Idee ist es, diese sogenannten **elementaren Zeilenoperationen** derart anzuwenden, dass sich ein lineares Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix ergibt. Da durch die beschriebenen Operationen die Lösung x des Gleichungssystems aber unverändert bleibt, hat auch das neue Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix die exakt gleiche Lösung wie das ursprünglich gegebene System. Der Vorteil

besteht nun darin, dass ein Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix wie in Abschn. 3.1 beschrieben einfach und effizient gelöst werden kann.

Um diese Ziele zu erreichen, gehen wir folgendermaßen vor:

- (1) Tausche die erste Zeile mit der Zeile, die den betragsmäßig größten Eintrag in der ersten Spalte hat. (Falls es mehrere Zeilen mit betragsmäßig größtem Eintrag in der ersten Spalte gibt, wähle eine beliebige dieser Zeilen.)
- (2) Für $k = 2, \dots, n$ führe nacheinander folgende Operationen durch: Falls der Eintrag in der ersten Spalte von Zeile k ungleich 0 ist, dann multipliziere Zeile k mit einer reellen Zahl $c_k \neq 0$, sodass der Eintrag in der ersten Spalte von Zeile k gerade das Negative des Eintrags in der oberen linken Ecke der Matrix ist.
- (3) Für $k = 2, \dots, n$ führe nacheinander folgende Operationen durch: Falls der Eintrag in der ersten Spalte von Zeile k ungleich 0 ist, dann addiere die erste Zeile zu Zeile k hinzu.

Nachdem diese Schritte alle durchgeführt wurden, erhalten wir eine Matrix, welche bis auf die linke obere Ecke nur 0 als Einträge in der ersten Spalte hat. Anschließend führen wir die gleichen Schritte auf der um die erste Zeile und erste Spalte reduzierte Matrix aus. Das Vorgehen wird wiederholt, bis wir eine obere Dreiecksmatrix erhalten. Weiterhin darf dabei nicht vergessen werden, dass alle elementaren Zeilenoperationen auch auf dem Vektor b durchgeführt werden müssen.



Es bleibt aber noch zu klären, welche reellen Zahlen c_k in Schritt (2) verwendet werden müssen, um die Anforderungen zu erfüllen. Hierzu sei $D = (d_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Matrix nach Schritt (1), d.h. die ursprüngliche Matrix A mit ggf. vertauschten Zeilen. Dann wählen wir

$$c_k = -\frac{d_{1,1}}{d_{k,1}}$$

für alle Zeilen $k = 2, \dots, n$ mit $d_{k,1} \neq 0$ und multiplizieren Zeile k mit c_k . Durch diese Wahl ist genau die Anforderung erfüllt, dass der Eintrag in der ersten Spalte gerade das Negative des Eintrags $d_{1,1}$ in der oberen linken Ecke der Matrix D ist.

Mit Worten beschrieben lassen sich die einzelnen Schritte allerdings nur schwer verstehen. Wir erklären das Gauß-Verfahren daher nochmals am folgenden Beispiel:



Beispiel 3.1 Gegeben sei das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} 6x_1 - 4x_2 + 4x_3 &= 4 \\ -3x_1 - x_2 &= -7 \\ 9x_1 - 6x_3 &= 24. \end{aligned}$$

Wir nutzen eine kompakte Schreibweise, in der wir die zugehörige Matrix A mit dem Vektor b in ein gemeinsames System $(A|b)$ übertragen:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 6 & -4 & 4 & 4 \\ -3 & -1 & 0 & -7 \\ 9 & 0 & -6 & 24 \end{array} \right).$$

Nun wenden wir das beschriebene Verfahren an. Dazu tauschen wir Zeile 1 und Zeile 3, damit der betragsmäßig größte Eintrag der ersten Spalte anschließend in der ersten Zeile steht:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ -3 & -1 & 0 & -7 \\ 6 & -4 & 4 & 4 \end{array} \right).$$

Im nächsten Schritt multiplizieren wir die zweite Zeile mit c_2 und die dritte Zeile mit c_3 , wobei

$$c_2 = -\frac{9}{-3} = 3 \quad \text{und} \quad c_3 = -\frac{9}{6} = -\frac{3}{2}$$

gilt:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ -9 & -3 & 0 & -21 \\ -9 & 6 & -6 & -6 \end{array} \right).$$

Nun addieren wir die erste Zeile zur zweiten Zeile sowie die erste Zeile zur dritten Zeile:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ 0 & -3 & -6 & 3 \\ 0 & 6 & -12 & 18 \end{array} \right).$$

Anschließend beginnen wir das Verfahren wieder von vorn, wobei wir gedanklich so tun, als wären die erste Zeile und die erste Spalte gar nicht vorhanden.

Zunächst haben wir wieder Zeile 2 und Zeile 3 zu tauschen:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ 0 & 6 & -12 & 18 \\ 0 & -3 & -6 & 3 \end{array} \right).$$

Als Nächstes haben wir Zeile 3 mit 2 zu multiplizieren:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ 0 & 6 & -12 & 18 \\ 0 & -6 & -12 & 6 \end{array} \right).$$

Es bleibt noch Zeile 3 mit Zeile 2 zu addieren:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 9 & 0 & -6 & 24 \\ 0 & 6 & -12 & 18 \\ 0 & 0 & -24 & 24 \end{array} \right).$$

Damit haben wir ein Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix erhalten, welches die exakt identische Lösung zum ursprünglich gegebenen Gleichungssystem besitzt. Die Lösung kann daher nun durch Rückwärtselemination berechnet werden. Wir erhalten

$$x = (x_1, x_2, x_3) = (2, 1, -1)$$

als eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems.

Wir wissen bereits, dass jedes lineare Gleichungssystem mit einer regulären Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eindeutig lösbar ist. Der folgende Satz klärt schließlich die Frage nach der Anwendbarkeit des Gauß-Verfahrens. Eine genaue Herleitung sowie weitere Hintergrundinformationen können Hanke-Bourgeois (2009) entnommen werden.



Satz 3.3 (Durchführbarkeit des Gauß-Verfahrens) Gegeben seien eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie ein Vektor $b \in \mathbb{R}^n$. Dann ist das Gauß-Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A \cdot x = b$$

genau dann anwendbar, wenn die Matrix A regulär ist.

Im Allgemeinen ist aber nicht bekannt, ob eine Matrix regulär ist oder nicht. Was passiert also, wenn das Gauß-Verfahren auf ein Gleichungssystem mit singulärer Matrix angewandt wird? Dann ergibt sich zwangsläufig ein Schritt, in welchem wir keinen von null verschiedenen Diagonaleintrag finden können. Auch hierzu können Details in Hanke-Bourgeois (2009) nachgelesen werden.



Beispiel 3.2 Als Beispiel mit singulärer Matrix untersuchen wir das Gleichungssystem

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 3 & 4 \\ -1 & 2 & -2 & 2 \\ -1 & 2 & -4 & 1 \end{array} \right).$$

Nach Durchführung der ersten Operationen erhalten wir das System

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & -1 & 5 \end{array} \right).$$

An dieser Stelle können wir das Verfahren beenden, da wir zwangsläufig 0 als zweiten Diagonaleintrag erhalten. Tatsächlich hat das Gleichungssystem keine Lösung.

Das Gauß-Verfahren liefert uns damit ein allgemeines Verfahren, welches auf jedes lineare Gleichungssystem mit quadratischer Matrix angewandt werden kann.

Ist die Matrix regulär, so liefert das Verfahren die eindeutige Lösung. Im Falle einer singulären Matrix hat das Gleichungssystem keine Lösung, und das Verfahren bricht vorzeitig ab. Es sei abschließend jedoch bemerkt, dass das Gauß-Verfahren eine Komplexität von

$$\mathcal{O}(n^3)$$

besitzt. Somit benötigt das Verfahren beispielsweise ungefähr 1000-mal so viel Laufzeit, falls sich die Anzahl n der Gleichungen und Unbekannten verzehnfacht.

3.3 LU-Zerlegung

Neben dem allgemeinen Gauß-Verfahren können lineare Gleichungssysteme auch dann gelöst werden, wenn eine Matrixfaktorisierung der Matrix A vorliegt. In diesem Abschnitt stellen wir daher die LU-Zerlegung einer Matrix A vor:

Definition 3.2 Eine Faktorisierung einer quadratischen Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ der Form

$$A = L \cdot U$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix L und einer oberen Dreiecksmatrix U heißt **LU-Zerlegung** von A .

Angenommen, wir wollen ein lineares Gleichungssystem

$$A \cdot x = b$$

lösen und eine LU-Zerlegung von A ist bekannt, d.h. $A = L \cdot U$ mit entsprechenden Dreiecksmatrizen L und U . Dann lösen wir zunächst das Gleichungssystem

$$L \cdot z = b$$

durch Vorwärtselimination und anschließend

$$U \cdot x = z$$

durch Rückwärtselimination. Die Lösung x erfüllt dann

$$A \cdot x = L \cdot U \cdot x = L \cdot z = b$$

und ist somit eine Lösung von

$$A \cdot x = b.$$

Bevor wir ein Verfahren zur Berechnung einer LU-Zerlegung vorstellen, beantworten wir zunächst die Fragen zur Existenz und Eindeutigkeit. Dazu erinnern wir

uns, dass das Gauß-Verfahren für jede reguläre Matrix A durchführbar ist. Diese Aussage ist äquivalent dazu, dass für jede quadratische Matrix A mit $\det(A) \neq 0$ das Gauß-Verfahren die eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A \cdot x = b$$

liefert. Die Berechnung der LU-Zerlegung benötigt allerdings strengere Voraussetzungen:



Satz 3.4 (Existenz einer LU-Zerlegung) Sei $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix und für $k = 1, \dots, n$ seien

$$A^{[k]} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k,1} & \dots & a_{k,k} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k}$$

die oberen linken $(k \times k)$ -Teilmatrizen von A . Falls

$$\det(A^{[k]}) \neq 0 \quad \text{für } k = 1, \dots, n$$

gilt, dann existiert eine LU-Zerlegung von A , und diese kann mit dem Verfahren aus Zusammenfassung 3.1 berechnet werden.

Die Antwort zur Eindeutigkeit einer LU-Zerlegung liefert schließlich die folgende Aussage:



Satz 3.5 (Eindeutigkeit einer LU-Zerlegung) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix. Falls A eine LU-Zerlegung besitzt, dann kann L derart gewählt werden, dass L eine normierte untere Dreiecksmatrix ist (d.h., alle Diagonaleinträge von L sind 1). Eine LU-Zerlegung mit normierter unterer Dreiecksmatrix L ist eindeutig.

Im Folgenden wollen wir nun untersuchen, wie eine LU-Zerlegung einer quadratischen Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ berechnet werden kann. Die grundlegende Idee dabei ist wieder die Anwendung elementarer Zeilenoperationen ähnlich dem Gauß-Verfahren. Allerdings formulieren wir das Vorgehen nun mathematisch durch Multiplikationen mit Gauß-Matrizen:



Definition 3.3 Sei $k \in \{1, \dots, n-1\}$, sei $e_k \in \mathbb{R}^n$ der k -te Einheitsvektor und sei $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Einheitsmatrix. Weiter seien reelle Zahlen t_{k+1} bis t_n

gegeben. Dann definieren wir mit dem Vektor

$$c_k = (0, \dots, 0, t_{k+1}, \dots, t_n) \in \mathbb{R}^n$$

die **Gauß-Matrix** M_k durch

$$M_k = I_n - c_k \cdot e_k^\top = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -t_{k+1} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -t_n & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Eine Gauß-Matrix M_k ist somit die Einheitsmatrix mit (möglicherweise) von null verschiedenen Einträgen nur unterhalb der Diagonalen in Spalte k .

Gauß-Matrizen besitzen folgende Eigenschaften:

- (1) Jede Gauß-Matrix ist eine normierte untere Dreiecksmatrix.
- (2) Die Multiplikation von (beliebig vielen) Gauß-Matrizen liefert wieder eine normierte untere Dreiecksmatrix.
- (3) Die Determinante jeder Gauß-Matrix ist gleich 1.
- (4) Jede Gauß-Matrix $M_k = I_n - c_k \cdot e_k^\top$ ist invertierbar, und es gilt

$$M_k^{-1} = I_n + c_k \cdot e_k^\top.$$

Diese Eigenschaften helfen uns nun bei der Herleitung eines Verfahrens zur Berechnung der LU-Zerlegung.

Aufgabe 3.2 Sei $M_k = I_n - c_k \cdot e_k^\top$ eine Gauß-Matrix. Zeige, dass dann

$$M_k^{-1} = I_n + c_k \cdot e_k^\top$$

gilt.



Herleitung Die Multiplikation einer Matrix A mit einer Gauß-Matrix M_k lässt die ersten k Zeilen unverändert, auf alle anderen Zeilen werden elementare Zeilenoperationen angewandt. Genauer wird jeweils ein Vielfaches von Zeile k zu den



unteren $n - k$ Zeilen addiert. Durch eine geschickte Wahl des Vektors c_k kann dadurch erreicht werden, dass wir nach der Multiplikation von A mit M_k in Spalte k nur Nulleinträge unterhalb der Diagonalen erhalten.

Ein wiederholtes Anwenden mit $k = 1, \dots, n-1$ führt dann dazu, dass wir eine obere Dreiecksmatrix erhalten, d.h., wir wählen Gauß-Matrizen M_1 bis M_{n-1} , sodass

$$U = M_{n-1} \cdot \dots \cdot M_2 \cdot M_1 \cdot A$$

eine obere Dreiecksmatrix ist. Damit haben wir aber auch eine LU-Zerlegung berechnet, denn es gilt

$$A = (M_{n-1} \cdot \dots \cdot M_2 \cdot M_1)^{-1} \cdot U = (M_1^{-1} \cdot M_2^{-1} \cdot \dots \cdot M_{n-1}^{-1}) \cdot U,$$

und

$$L = M_1^{-1} \cdot M_2^{-1} \cdot \dots \cdot M_{n-1}^{-1}$$

ist somit eine normierte untere Dreiecksmatrix. Weiterhin sei bemerkt, dass die Matrix L nicht kompliziert durch das Invertieren und Multiplizieren der Gauß-Matrizen berechnet werden muss. Mit den oben genannten Eigenschaften ergibt sich direkt

$$L = I_n + \sum_{k=1}^{n-1} c_k \cdot e_k^\top,$$

sodass die Matrix L aus den Vektoren c_k direkt aufgestellt werden kann.

?

Aufgabe 3.3 Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zwei beliebige Matrizen. Zeige, dass dann

$$(A \cdot B)^\top = B^\top \cdot A^\top$$

gilt. Zeige weiter, dass außerdem

$$(A \cdot B)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1}$$

gilt, falls A und B regulär sind.

Der einzige Punkt, der bei der Herleitung zur LU-Zerlegung noch nicht geklärt wurde, ist die Wahl der Vektoren c_k . Dies holen wir nun nach:

!

Lemma 3.6 Sei $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix und sei

$$a = (a_{1,k}, \dots, a_{n,k})$$

die k -te Spalte von A für ein $k \in \{1, \dots, n\}$. Weiter definieren wir

$$c_k = \left(0, \dots, 0, \frac{a_{k+1,k}}{a_{k,k}}, \dots, \frac{a_{n,k}}{a_{k,k}} \right) \in \mathbb{R}^n,$$

und

$$M_k = I_n - c_k \cdot e_k^\top$$

sei die Gauß-Matrix zum Vektor c_k . Dann besitzt die Matrix

$$B = M_k \cdot A$$

unterhalb der Diagonalen in Spalte k nur Nulleinträge.

Die Herleitung der Aussage beruht auf einer geschickten Anwendung von elementaren Zeilenoperationen. Die folgende Zusammenfassung gibt schließlich eine Übersicht zur Berechnung der LU-Zerlegung (s. auch Abb. 3.1):

Zusammenfassung 3.1 (LU-Zerlegung) Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zur Berechnung einer LU-Zerlegung, und wir definieren $B_1 = A$ mit den Matrixeinträgen $b_{i,j}^1$ für $i, j = 1, \dots, n$.

Für $k = 1, \dots, n - 1$ führe jeweils nacheinander folgende Schritte aus:

(1) Setze

$$c_k = \left(0, \dots, 0, \frac{b_{k+1,k}^k}{b_{k,k}^k}, \dots, \frac{b_{n,k}^k}{b_{k,k}^k} \right).$$

(2) Berechne die Gauß-Matrix $M_k = I_n - c_k \cdot e_k^\top$.

(3) Berechne $B_{k+1} = M_k \cdot B_k$ mit den Matrixeinträgen $b_{i,j}^{k+1}$.

Die LU-Zerlegung von A wird gegeben durch

$$L = I_n + \sum_{k=1}^{n-1} c_k \cdot e_k^\top$$

und $U = B_n$.

Falls im Laufe des Verfahrens $b_{k,k}^k = 0$ gilt, dann ist der Vektor c_k nicht definiert, und A besitzt in diesem Falle keine LU-Zerlegung. Das folgende Beispiel veranschaulicht das Verfahren zur Berechnung einer LU-Zerlegung:

Beispiel 3.3 Wir wollen die LU-Zerlegung der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ -2 & 0 & -2 \\ 4 & 4 & 10 \end{pmatrix}$$

#



★

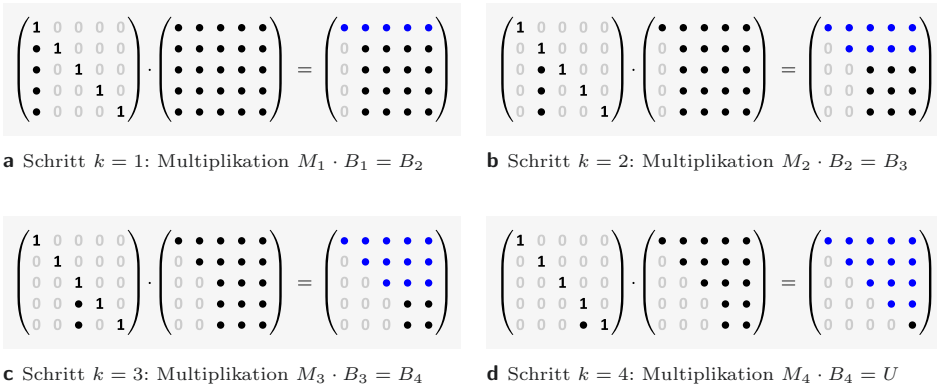


Abb. 3.1 Schematische Darstellung der notwendigen Matrix-Matrix-Multiplikationen zur Berechnung der LU-Zerlegung einer (5×5) -Matrix. Die blau eingefärbten Matrixeinträge bleiben bei der jeweiligen Multiplikation unverändert

berechnen. Dazu multiplizieren wir die Matrix $B_1 = A$ mit einer Gauß-Matrix M_1 , sodass wir im Produkt in der ersten Spalte die -2 und 4 eliminieren. Dies geschieht unter Verwendung von M_1 mit dem Vektor $c_1 = (0, -1, 2)$:

$$M_1 \cdot B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ -2 & 0 & -2 \\ 4 & 4 & 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} = B_2.$$

Nun multiplizieren wir B_2 analog mit M_2 unter Verwendung von $c_2 = (0, 0, 2)$, um eine obere Dreiecksmatrix zu erhalten:

$$M_2 \cdot B_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = B_3.$$

Damit folgt direkt

$$U = B_3 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

und auch die normierte untere Dreiecksmatrix L können wir dank der Vektoren c_1 und c_2 direkt aufstellen:

$$L = M_2^{-1} \cdot M_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ist eine LU-Zerlegung von A bekannt, dann kann das Gleichungssystem $A \cdot x = b$

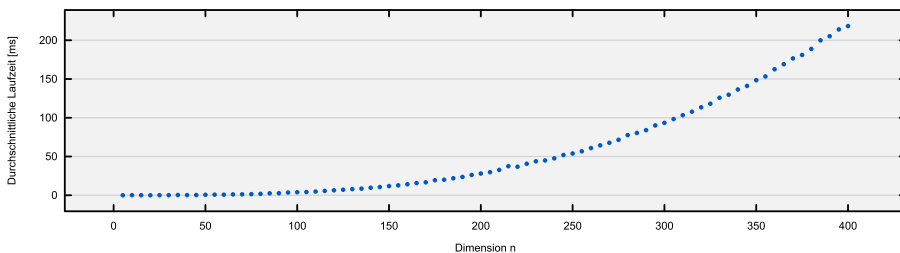


Abb. 3.2 Darstellung der durchschnittlichen Laufzeit zur Berechnung einer LU-Zerlegung in Abhängigkeit der Dimension n der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Alle benötigten Matrizen wurden zufällig generiert, wobei jeweils sichergestellt wurde, dass eine LU-Zerlegung existiert

mit einer Komplexität von $\mathcal{O}(n^2)$ gelöst werden, da wie oben beschrieben nur eine Vorwärts- und eine Rückwärtselemination durchgeführt werden müssen. Allerdings hat die Berechnung der LU-Zerlegung selbst bei effizienter Programmierung der Multiplikationen mit Gauß-Matrizen im Allgemeinen eine Komplexität von

$$\mathcal{O}(n^3)$$

(Abb. 3.2). Insgesamt können wir daher bei der Verwendung einer LU-Zerlegung zur Lösung eines linearen Gleichungssystems keine signifikante Laufzeitverbesserung im Vergleich zum Gauß-Algorithmus erwarten.



Aufgabe 3.4 Erläutere exemplarisch anhand von Abb. 3.2, dass die Berechnung der LU-Zerlegung im Allgemeinen eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^3)$ hat. Vergleiche hierzu beispielsweise die durchschnittlichen Laufzeiten zur Dimension $n = 200$ und $n = 400$.



Ausblick Würde das Verfahren genau so wie in Zusammenfassung 3.1 angegeben implementiert werden, müssten sogar $n - 1$ Matrix-Matrix-Multiplikationen jeweils mit einer Komplexität von $\mathcal{O}(n^3)$ durchgeführt werden, was insgesamt eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^4)$ bedeuten würde. Allerdings können die Matrix-Matrix-Multiplikationen aufgrund der speziellen Struktur der Gauß-Matrizen mit einer Komplexität von $\mathcal{O}(n^2)$ durchgeführt werden, was die Komplexität des LU-Verfahrens von $\mathcal{O}(n^3)$ begründet. Auf weitere Details wollen wir an dieser Stelle aber nicht eingehen.



3.4 QR-Zerlegung

Mit der LU-Zerlegung haben wir eine erste Matrixfaktorisierung kennengelernt, welche zum Lösen eines linearen Gleichungssystems verwendet werden kann. In

diesem Abschnitt untersuchen wir die QR-Zerlegung, welche (neben anderen Anwendungen) auch zum Lösen von Gleichungssystemen herangezogen werden kann. Bevor wir die QR-Zerlegung definieren, wiederholen wir, dass eine quadratische Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ genau dann **orthogonal** heißt, falls

$$Q^{-1} = Q^{\top}$$

gilt. Die inverse Matrix einer orthogonalen Matrix ist also gleich der transponierten Matrix.

=

Definition 3.4 Eine Faktorisierung einer quadratischen Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ der Form

$$A = Q \cdot R$$

mit einer orthogonalen Matrix Q und einer oberen Dreiecksmatrix R heißt **QR-Zerlegung** von A .

Angenommen, wir wollen ein lineares Gleichungssystem

$$A \cdot x = b$$

lösen und eine QR-Zerlegung von A ist bekannt, d.h. $A = Q \cdot R$ mit $Q^{-1} = Q^{\top}$ und einer oberen Dreiecksmatrix R . Dann ist das Gleichungssystem

$$A \cdot x = Q \cdot R \cdot x = b$$

äquivalent zu

$$R \cdot x = Q^{\top} \cdot b.$$

Die gesuchte Lösung x des linearen Gleichungssystems kann also durch eine Matrix-Vektor-Multiplikation und eine Rückwärtselimination gelöst werden.

Vor der Herleitung eines Verfahrens zur Berechnung der QR-Zerlegung beginnen wir wieder mit Aussagen zur Existenz und Eindeutigkeit:

!

Satz 3.7 (Existenz einer QR-Zerlegung) Jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ besitzt eine QR-Zerlegung, und diese kann mit dem Verfahren aus Zusammenfassung 3.2 berechnet werden.

Da jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine QR-Zerlegung besitzt und da orthogonale Matrizen stets regulär sind, können wir folgern: Sei $A = Q \cdot R$ eine QR-Zerlegung von A . Dann ist A genau dann regulär, falls alle Diagonaleinträge von R ungleich null sind.

Satz 3.8 (Eindeutigkeit einer QR-Zerlegung) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine beliebige Matrix und sei

$$A = Q \cdot R$$

eine QR-Zerlegung von A . Falls die Vorzeichen der Diagonaleinträge von R vorgegeben werden, dann ist die QR-Zerlegung eindeutig.

Die QR-Zerlegung ist also beispielsweise genau dann eindeutig, falls nichtnegative Diagonaleinträge für R gefordert werden. Ist dies nicht der Fall, so kann eine derartige Form leicht berechnet werden: Falls der k -te Diagonaleintrag von R negativ ist, so muss die k -te Zeile von R und die k -te Spalte von Q mit -1 multipliziert werden. Durch dieses Vorgehen kann stets eine QR-Zerlegung mit nichtnegativen Diagonaleinträge der Matrix R berechnet werden.

Die nun folgende Idee zur Berechnung einer QR-Zerlegung ist ähnlich zur LU-Zerlegung: Wir multiplizieren A mit speziellen Matrizen, um A in eine obere Dreiecksmatrix zu überführen. Bei der LU-Zerlegung haben wir Gauß-Matrizen genutzt, bei der QR-Zerlegung benötigen wir Householder-Matrizen:

Definition 3.5 Sei $v \in \mathbb{R}^n$ mit $v \neq 0$ und sei $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Einheitsmatrix. Dann bezeichnen wir

$$H = I_n - \frac{2}{v^\top \cdot v} \cdot v \cdot v^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

als **Householder-Matrix** zum Vektor v .

Householder-Matrizen besitzen folgende Eigenschaften:

- (1) Jede Householder-Matrix H ist orthogonal.
- (2) Für jede Householder-Matrix H gilt $H = H^\top$.
- (3) Die Multiplikation von (beliebig vielen) Householder-Matrizen liefert wieder eine orthogonale Matrix.

Mit diesen Eigenschaften können wir direkt folgern, dass für jede Householder-Matrix H insbesondere auch

$$H^{-1} = H$$

gilt. Das Inverse einer Householder-Matrix ist also die Matrix selbst.



Aufgabe 3.5 Berechne die Householder-Matrix H zum Vektor $v = (2, -1, 3)$ und prüfe die Eigenschaft $H^{-1} = H$.

Wie bereits erwähnt, wollen wir eine gegebene Matrix A mit Householder-Matrizen multiplizieren, um A in eine obere Dreiecksmatrix zu überführen. Hierzu ist die Wahl des Vektors v der Householder-Matrix von besonderer Bedeutung. Das folgende Ergebnis liefert damit die Grundlage des QR-Verfahrens:



Lemma 3.9 Sei $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix, sei k ein Index aus $\{1, \dots, n\}$, sei $e_k \in \mathbb{R}^n$ der k -te Einheitsvektor und sei $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Einheitsmatrix. Weiter sei

$$a_k = (0, \dots, 0, a_{k,k}, a_{k+1,k}, \dots, a_{n,k}) \in \mathbb{R}^n$$

der k -te Spaltenvektor von A , wobei die Elemente oberhalb der Diagonalen durch Nulleinträge ersetzt wurden. Schließlich definieren wir

$$v_k = a_k + \|a_k\|_2 \cdot e_k = \left(0, \dots, 0, a_{k,k} + \sqrt{\sum_{s=k}^n (a_{s,k})^2}, a_{k+1,k}, \dots, a_{n,k} \right)$$

mit $v_k \in \mathbb{R}^n$, und

$$H_k = I_n - \frac{2}{v_k^\top \cdot v_k} \cdot v_k \cdot v_k^\top$$

sei die Householder-Matrix zum Vektor v_k . Dann besitzt die Matrix

$$B = H_k \cdot A$$

unterhalb der Diagonalen in Spalte k nur Nulleinträge.

Obwohl der Beweis der Aussage vergleichsweise einfach ist und mit elementaren Mitteln geführt werden kann, wollen wir an dieser Stelle darauf verzichten.



Herleitung Mit den Aussagen zuvor ist die Herleitung zur Berechnung einer QR-Zerlegung im Grunde schon erledigt: Wie bei der LU-Zerlegung multiplizieren wir die Matrix A mit Householder-Matrizen H_k , sodass wir jeweils in Spalte k unterhalb der Diagonalen Nulleinträge erhalten.

Ein wiederholtes Anwenden mit $k = 1, \dots, n-1$ führt dazu, dass A in eine obere Dreiecksmatrix überführt wird:

$$R = H_{n-1} \cdot \dots \cdot H_2 \cdot H_1 \cdot A.$$

Unter Verwendung von $H_k^{-1} = H_k$ erhalten wir damit aber auch

$$\begin{aligned} A &= (H_{n-1} \cdot \dots \cdot H_2 \cdot H_1)^{-1} \cdot R \\ &= (H_1^{-1} \cdot H_2^{-1} \cdot \dots \cdot H_{n-1}^{-1}) \cdot R = (H_1 \cdot H_2 \cdot \dots \cdot H_{n-1}) \cdot R, \end{aligned}$$

und die Matrix

$$Q = H_1 \cdot H_2 \cdot \dots \cdot H_{n-1}$$

ist als Produkt von Householder-Matrizen eine orthogonale Matrix.

Wir erhalten schließlich folgende Zusammenfassung (s. auch Abb. 3.3):

Zusammenfassung 3.2 (QR-Zerlegung) Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zur Berechnung einer QR-Zerlegung, und wir definieren $B_1 = A$ mit den Matrixeinträgen $b_{i,j}^1$ für $i, j = 1, \dots, n$.

Für $k = 1, \dots, n-1$ führe jeweils nacheinander folgende Schritte aus:

- (1) Setze $a_k = (0, \dots, 0, b_{k,k}^k, b_{k+1,k}^k, \dots, b_{n,k}^k)$ und damit

$$v_k = a_k + \|a_k\|_2 \cdot e_k.$$

- (2) Berechne die Householder-Matrix

$$H_k = I_n - \frac{2}{v_k^\top \cdot v_k} \cdot v_k \cdot v_k^\top.$$

- (3) Berechne $B_{k+1} = H_k \cdot B_k$ mit den Matrixeinträgen $b_{i,j}^{k+1}$.

Die QR-Zerlegung von A wird gegeben durch

$$Q = H_1 \cdot H_2 \cdot \dots \cdot H_{n-1}$$

und $R = B_n$.

Aufgabe 3.6 Welches Problem bzw. welche Situation liegt vor, falls wir im k -Schritt des Verfahrens aus Zusammenfassung 3.2 den Vektor $a_k = 0 \in \mathbb{R}^n$ erhalten?

Das folgende Beispiel veranschaulicht das Verfahren zur Berechnung einer QR-Zerlegung:



$$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

a Schritt $k = 1$: Multiplikation $H_1 \cdot B_1 = B_2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

b Schritt $k = 2$: Multiplikation $H_2 \cdot B_2 = B_3$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

c Schritt $k = 3$: Multiplikation $H_3 \cdot B_3 = B_4$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

d Schritt $k = 4$: Multiplikation $H_4 \cdot B_4 = R$

Abb. 3.3 Schematische Darstellung der notwendigen Matrix-Matrix-Multiplikationen zur Berechnung der QR-Zerlegung einer (5×5) -Matrix. Die blau eingefärbten Matrixeinträge bleiben bei der jeweiligen Multiplikation unverändert



Beispiel 3.4 Wir wollen die QR-Zerlegung der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -9 \\ -2 & -10 & 3 \\ 1 & -1 & 6 \end{pmatrix}$$

berechnen. Dazu multiplizieren wir die Matrix $B_1 = A$ mit einer Householder-Matrix H_1 , sodass wir im Produkt in der ersten Spalte die -2 und 1 eliminieren. Dies geschieht unter Verwendung von H_1 mit dem Vektor $v_1 = (5, -2, 1)$:

$$H_1 \cdot B_1 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{11}{15} & \frac{2}{15} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{15} & \frac{14}{15} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 4 & -9 \\ -2 & -10 & 3 \\ 1 & -1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & -9 & 6 \\ 0 & -\frac{24}{5} & -3 \\ 0 & -\frac{18}{5} & 9 \end{pmatrix}.$$

Nun multiplizieren wir $B_2 = H_1 \cdot B_1$ unter Verwendung von $v_2 = (0, \frac{6}{5}, -\frac{18}{5})$ mit H_2 , um eine obere Dreiecksmatrix zu erhalten:

$$H_2 \cdot B_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \\ 0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -3 & -9 & 6 \\ 0 & -\frac{24}{5} & -3 \\ 0 & -\frac{18}{5} & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & -9 & 6 \\ 0 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix}.$$

Damit folgt direkt

$$R = B_3 = H_2 \cdot B_2 = \begin{pmatrix} -3 & -9 & 6 \\ 0 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix},$$

und die orthogonale Matrix Q ergibt sich durch Multiplikation von H_1 und H_2 :

$$Q = H_1 \cdot H_2 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{11}{15} & \frac{2}{15} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{15} & \frac{14}{15} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \\ 0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

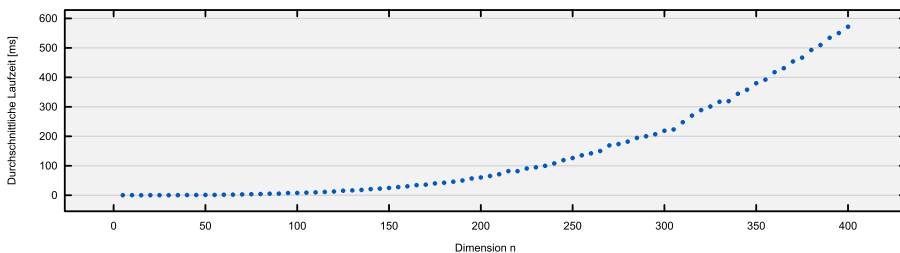


Abb. 3.4 Darstellung der durchschnittlichen Laufzeit zur Berechnung einer QR-Zerlegung in Abhängigkeit der Dimension n der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Alle benötigten Matrizen wurden zufällig generiert

Aufgabe 3.7 Zeige im Detail, wie die Vektoren $v_1 = (5, -2, 1)$ und $v_2 = (0, \frac{6}{5}, -\frac{18}{5})$ im Beispiel zuvor berechnet wurden.



Die Komplexität zur Berechnung einer QR-Zerlegung unter Verwendung des Verfahrens aus Zusammenfassung 3.2 wird im Wesentlichen wieder durch die Matrix-Matrix-Multiplikationen bestimmt. Selbst wenn alle notwendigen Multiplikationen mit Householder-Matrizen aufgrund der speziellen Struktur geeignet implementiert werden, besitzt das QR-Verfahren ähnlich zur LU-Zerlegung eine Komplexität von

$$\mathcal{O}(n^3)$$

(Abb. 3.4). Der Vorteil der QR-Zerlegung im Vergleich zur LU-Zerlegung besteht jedoch darin, dass die QR-Zerlegung für jede beliebige Matrix durchgeführt werden kann. Außerdem ist die Verwendung einer QR-Zerlegung zur Lösung eines linearen Gleichungssystems im Allgemeinen robuster gegen Rundungsfehler.

Ausblick Ähnlich zur LU-Zerlegung kann die Komplexität des QR-Verfahrens von $\mathcal{O}(n^3)$ nur durch eine effiziente Implementierung der Matrix-Matrix-Multiplikationen erreicht werden: Die Multiplikation einer $(n \times n)$ -Matrix A mit einer Householder-Matrix

$$H = I_n - \beta \cdot v \cdot v^\top,$$

wobei $v \in \mathbb{R}^n$ und $\beta \in \mathbb{R}$, kann nämlich mit einer Komplexität von nur $\mathcal{O}(n^2)$ berechnet werden. Denn für jeden Vektor $a \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$H \cdot a = (I_n - \beta \cdot v \cdot v^\top) \cdot a = I_n \cdot a - \beta \cdot v \cdot v^\top \cdot a = a - (\beta \cdot v^\top \cdot a) \cdot v,$$

und dadurch ist auch eine effiziente Implementierung der $H \cdot A$ Matrix-Matrix-Multiplikationen möglich. Auf ähnliche Art und Weise lässt sich auch eine $Q \cdot H$ Matrix-Matrix-Multiplikationen mit einer Komplexität von $\mathcal{O}(n^2)$ darstellen.



?

Aufgabe 3.8 Überlege, wie die Definition der QR-Zerlegung einer (möglicherweise nichtquadratischen) Matrix $\mathbb{R}^{m \times n}$ aussehen könnte. Zeichne ein Matrixschema zur Berechnung der QR-Zerlegung einer (5×3) -Matrix (Abb. 3.3).

3.5 Cholesky-Zerlegung

In diesem Abschnitt untersuchen wir einen Spezialfall der LU-Zerlegung, welcher aufgrund der folgenden Existenzaussage vor allem für symmetrische und positiv definite Matrizen von Interesse ist:

=

Definition 3.6 Eine Faktorisierung einer quadratischen Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ der Form

$$A = L \cdot L^T$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix L heißt **Cholesky-Zerlegung** von A .

Ist eine Cholesky-Zerlegung einer Matrix A bekannt, so kann das Gleichungssystem $A \cdot x = b$ wie bei der LU-Zerlegung beschrieben effizient durch eine Vorwärts- und eine Rückwärtselimination gelöst werden.

Allerdings muss die Matrix A erwartungsgemäß einige Eigenschaften erfüllen, damit überhaupt eine Cholesky-Zerlegung existiert:

!

Satz 3.10 (Existenz einer Cholesky-Zerlegung) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische und positiv definite Matrix. Dann existiert eine Cholesky-Zerlegung von A , und diese kann mit dem Verfahren aus Zusammenfassung 3.3 berechnet werden.

Eine gegebene Matrix A lässt sich vergleichsweise einfach auf Symmetrie prüfen. Im Allgemeinen ist ein Nachweis der positiv Definitheit schwieriger. Im Falle von symmetrischen Matrizen hilft hier jedoch folgende Aussage:

!

Lemma 3.11 Sei $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Weiter seien

$$A^{[k]} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k,1} & \dots & a_{k,k} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k}$$