Kapitel 2

Direkte Verfahren für lineare Gleichungssysteme

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Inhalt

Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme

- Direkte Verfahren
  liefern in endlich vielen Schritten eine (exakte) Lösung.
- Iterative Verfahren
  erzeugen eine Folge von Vektoren, die gegen die Lösung des linearen Gleichungssystems konvergiert (approximative Lösung).

Diagonalmatrix

Definition 2.1

Eine Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $d_{ij} = 0$ für $i \neq j$ heißt Diagonalmatrix.

Eine Diagonalmatrix hat also die Gestalt

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} * & & & 0 \\ & * & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & * \end{pmatrix}.$$

Für eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen $d_{11}, d_{22}, \ldots, d_{nn}$ schreiben wir auch $\mathrm{diag}(d_{11}, d_{22}, \ldots, d_{nn})$.

Lineares Gleichungssystem mit Diagonalmatrix

Sei $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \ldots, d_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Dann ist das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{Dx} = \mathbf{b}$$

für beliebiges $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{\mathbf{n}}$ genau dann lösbar, wenn $d_i \neq 0$ für alle $i = 1, \ldots, n$ gilt.

Die Lösung lautet dann

$$x_i = \frac{b_i}{d_i}.$$

Algorithmus für Diagonalmatrix

Algorithmus 2.2

Eingabe:

- *Diagonalmatrix* $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *mit* $d_{ii} \neq 0$ *für* $i = 1, \ldots, n$
- *rechte Seite* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$

Ausgabe: *Lösungsvektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

for $i := 1$ **to** n **do**

$\quad x_i := b_i / d_{ii}$

end

return x

Untere Dreiecksmatrix

Definition 2.3

Eine Matrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $l_{ij} = 0$ für $i < j$ heißt untere Dreiecksmatrix.

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} * & & & 0 \\ * & * & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

Gilt zusätzlich $l_{ii} = 1$ für $i = 1, \ldots, n$, dann ist $\mathbf{L}$ eine normierte untere Dreiecksmatrix.

Lineares Gleichungssystem mit unterer Dreiecksmatrix

Das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{Lx} = \mathbf{b}$$

entspricht

$$\begin{array}{ccccccccc}
l_{11}x_1 & & & & & & & = & b_1 \\
l_{21}x_1 & + & l_{22}x_2 & & & & & = & b_2 \\
\vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\
\vdots & & & & & \ddots & & & \vdots \\
l_{n1}x_1 & + & l_{n2}x_2 & + & \cdots & + & l_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}$$

Aus der ersten Zeile erhalten wir x_1, eingesetzt in die zweite Zeile erhalten wir x_2, usw.

Diese Vorgehensweise heißt Vorwärtssubstitution.

Vorwärtssubstitution

Algorithmus 2.4

Eingabe:

- *Untere Dreiecksmatrix* $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *mit* $l_{ii} \neq 0$ *für* $i = 1, \ldots, n$
- *rechte Seite* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$

Ausgabe: *Lösungsvektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

$x_1 := b_1 / l_{11}$
for $i := 2$ **to** n **do**

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j \right) / l_{ii}$$

end
return x

Beispiel zur Vorwärtssubstitution

Beispiel 2.5

Gegeben sei das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ -3 & 2 & 0 \\ 1 & 6 & -7 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 \\ -9 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

Mit der Vorwärtssubstitution ergibt sich:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{25}{5} = 5 \\ x_2 &= \frac{-9-(-3)\cdot 5}{2} = 3 \\ x_3 &= \frac{9 - 1\cdot 5 - 6\cdot 3}{-7} = 2 \end{aligned}$$

Aufwand der Vorwärtssubstitution

- für $i = 1$:
  eine Division
- für $i > 1$:
  - eine Division
  - $i - 1$ Additionen/Subtraktionen
  - $i - 1$ Multiplikationen

  also $2i - 1$ Rechenoperationen

Gesamtaufwand:

$$1 + \sum_{i=2}^{n}(2i-1) = 1 + \sum_{i=1}^{n-1}(2i+1) = n + 2\sum_{i=1}^{n-1} i = n + 2 \cdot \frac{n(n-1)}{2} = n^2$$

Obere Dreiecksmatrix

Definition 2.6

Eine Matrix $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $r_{ij} = 0$ für $i > j$ heißt obere Dreiecksmatrix.

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ & * & \cdots & * \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & * \end{pmatrix}$$

Gilt zusätzlich $r_{ii} = 1$ für $i = 1, \ldots, n$, dann ist $\mathbf{R}$ eine normierte obere Dreiecksmatrix.

Lineares Gleichungssystem mit oberer Dreiecksmatrix

Das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{b}$$

entspricht

$$\begin{array}{ccccccccc}
r_{11}x_1 & + & r_{12}x_2 & + & \cdots & + & r_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & & r_{22}x_2 & + & \cdots & + & r_{2n}x_n & = & b_2 \\
 & & & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & & & r_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}$$

Aus der letzten Zeile erhalten wir x_n, eingesetzt in die vorletzte Zeile erhalten wir x_{n-1}, usw.

Diese Vorgehensweise heißt Rückwärtssubstitution.

Rückwärtssubstitution

Algorithmus 2.7

Eingabe:

- *Obere Dreiecksmatrix* $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *mit* $r_{ii} \neq 0$ *für* $i = 1, \ldots, n$
- *rechte Seite* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$

Ausgabe: *Lösungsvektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

$x_n := b_n / r_{nn}$

for $i := n - 1$ **downto** 1 **do**

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij} x_j \right) / r_{ii}$$

end

return x

Permutationsmatrix

Definition 2.8

Eine Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt Permutationsmatrix, wenn sich die Zeilen von $\mathbf{P}$ durch eine Permutation aus den Zeilen der Einheitsmatrix $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ergeben.

Beispiel 2.9

Die Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ist eine Permutationsmatrix.

Für eine Permutation $\pi \in S_n$ bezeichne $\mathbf{P}(\pi)$ die Permutationsmatrix

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_{\pi(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{\pi(n)} \end{pmatrix}.$$

Beispiel 2.10

Die Permutationsmatrix aus Beispiel 2.9 ist $\mathbf{P}(\pi)$ mit

$$\pi = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Eigenschaften einer Permutationsmatrix

- Eine Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist genau dann eine Permutationsmatrix, wenn in jeder Zeile und in jeder Spalte genau eine Eins steht (und sonst nur Nullen).
- Dies ist auch äquivalent zu einer Vertauschung der Spalten einer Einheitsmatrix.
- Definition erfolgte über Zeilenvertauschung, da wir später in erster Linie Zeilenvertauschungen vornehmen.

Lemma 2.11

Es sei $\mathbf{P}$ *eine Permutationsmatrix. Dann gilt:*

$$\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T.$$

Lösung eines LGS mit Permutationsmatrix

Algorithmus 2.12

Lösung von $\mathbf{Px} = \mathbf{b}$ *für eine Permutationsmatrix* $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\pi)$.

for $i := 1$ **to** n **do**

$\quad x_{\pi(i)} := b_i$

end

return x

Algorithmus 2.13

Lösung von $\mathbf{P}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *für eine Permutationsmatrix* $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\pi)$.

for $i := 1$ **to** n **do**

$\quad x_i := b_{\pi(i)}$

end

return x

LR-Zerlegung

- bekannt: Eliminationsverfahren von Gauß
- Verfahren führt zu einer Zerlegung der Koeffizientenmatrix: $\mathbf{A} = \mathbf{LR}$

Definition 2.14

Unter einer LR-Zerlegung einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ verstehen wir eine Zerlegung von $\mathbf{A}$ in der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{LR}$$

mit einer normierten unteren Dreiecksmatrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie einer oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Beispiel einer LR-Zerlegung

Beispiel 2.15

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 7 \\ 8 & 8 & 33 \\ -4 & 10 & 4 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 7 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}}$$

Lösung eines LGS mittels LR-Zerlegung

Algorithmus 2.16

Eingabe:

- *reguläre Matrix* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, *für die eine LR-Zerlegung existiert*
- *rechte Seite* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$

Ausgabe: *Lösungsvektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

1. *Bestimme eine LR-Zerlegung von* $\mathbf{A}$.
2. *Löse* $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ *durch Vorwärtssubstitution.*
3. *Löse* $\mathbf{Rx} = \mathbf{y}$ *durch Rückwärtssubstitution.*

Bemerkung: Nicht für jede reguläre Matrix $\mathbf{A}$ existiert eine LR-Zerlegung.

Beispiel 2.17

Wir betrachten das LGS:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 7 \\ 8 & 8 & 33 \\ -4 & 10 & 4 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 15 \\ 73 \\ 12 \end{pmatrix}$$

1. Die LR-Zerlegung von **A** kennen wir aus Beispiel 2.15.
2. Vorwärtssubstitution zur Lösung von

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 15 \\ 73 \\ 12 \end{pmatrix}$$

liefert: $y_1 = 15, y_2 = 73 - 4 \cdot 15 = 13, y_3 = 12 - 3 \cdot 13 + 2 \cdot 15 = 3.$

Fortsetzung Beispiel.

3. Rückwärtssubstitution zur Lösung von

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 7 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 15 \\ 13 \\ 3 \end{pmatrix}$$

liefert:

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{3}{3} = 1 \\ x_2 &= \frac{13-5}{4} = 2 \\ x_1 &= \frac{15-2-7}{2} = 3 \end{aligned}$$

Fragen zur LR-Zerlegung

Schritt 1 aus Algorithmus 2.16 wirft folgende Fragen auf:

1. Wie bestimmt man eine LR-Zerlegung einer Matrix $\mathbf{A}$?
2. Wann existiert solch eine LR-Zerlegung?
3. Ist solch eine LR-Zerlegung eindeutig bestimmt?

Beispiel zur Konstruktion einer LR-Zerlegung

Beispiel 2.18

Wir betrachten das lineare Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix} =: \mathbf{A}^{(1)}$$

und beliebiger rechter Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^4$.

Wir subtrahieren:

- von der zweiten Zeile das zweifache der ersten Zeile,
- von der dritten Zeile das vierfache der ersten Zeile,
- von der vierten Zeile das dreifache der ersten Zeile.

Fortsetzung Beispiel.

In Matrixschreibweise:

$$\mathbf{L}_1 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ -4 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dann gilt:

$$\mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{pmatrix} =: \mathbf{A}^{(2)}$$

Fortsetzung Beispiel.

Sei

$$\mathbf{L}_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dann gilt:

$$\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} =: \mathbf{A}^{(3)}$$

Fortsetzung Beispiel.

Sei

$$\mathbf{L}_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Dann gilt:

$$\mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} =: \mathbf{A}^{(4)} =: \mathbf{R}$$

Damit haben wir die gewünschte obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R}$.

Fortsetzung Beispiel.

Fazit:

- Eventuelle Zerlegung mittels $\mathbf{L} := \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1}$.
- Damit gilt dann $\mathbf{A} = \mathbf{LR}$.

Entscheidende Fragen:

- Wie sehen die $\mathbf{L}_j^{-1}$ aus?
- Ist $\mathbf{L}$ eine normierte untere Dreiecksmatrix?

Frobenius-Matrix

Definition 2.19

Eine Matrix $\mathbf{L}_j \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit der Gestalt

$$\mathbf{L}_j = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{j+1,j} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & -l_{n,j} & & & 1 \end{pmatrix}$$

heißt Frobenius-Matrix.

Diskussion zur Frobenius-Matrix

- Einheitsmatrix mit Ausnahme der j-ten Spalte
- in Spalte j unterhalb der Diagonalen die Einträge $-l_{j+1,j}, \ldots, -l_{n,j}$
- Wirkung von $\mathbf{L}_j\mathbf{A}$: Das $l_{i,j}$-fache der j-ten Zeile von $\mathbf{A}$ wird von Zeile i in $\mathbf{A}$ abgezogen.

Inverse einer Frobenius-Matrix

Lemma 2.20

Es sei $\mathbf{L}_j \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Frobenius-Matrix mit der Darstellung wie in Definition 2.19.

Dann gilt:

$$\mathbf{L}_j^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & +l_{j+1,j} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & +l_{n,j} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

- Das Inverse einer Frobenius-Matrix ist wieder eine Frobenius-Matrix.
- Zur Bestimmung der inversen Matrix müssen wir nur die Vorzeichen in Spalte j unterhalb der Diagonalen herumdrehen.

Lemma 2.21

Es seien $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \ldots, \mathbf{L}_{n-1}$ Frobenius-Matrizen mit der Darstellung wie in Definition 2.19, also für $\mathbf{L}_j$ mit Einträgen in Spalte j.

Dann gilt:

$$\mathbf{L} := \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\cdots\mathbf{L}_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{2,1} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n,1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

- Damit ist $\mathbf{L}$ tatsächlich eine normierte untere Dreiecksmatrix.
- Wenn die Matrizen $\mathbf{L}_1, \ldots, \mathbf{L}_{n-1}$ vorliegen, können wir $\mathbf{L}$ direkt (also ohne weitere Rechnung) angeben.

Beispiel 2.22

Mit Lemma 2.21 folgt als LR-Zerlegung für Beispiel 2.18:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Grundversion einer LR-Zerlegung

Algorithmus 2.23

$\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$

for $j := 1$ **to** $n-1$ **do**

  for $i := j+1$ **to** n **do**

    $l_{i,j} := a_{i,j}^{(j)} / a_{j,j}^{(j)}$

  end

  Definiere $\mathbf{L}_j$ *gemäß 2.19*

  $\mathbf{A}^{(j+1)} := \mathbf{L}_j \mathbf{A}^{(j)}$

end

$\mathbf{R} := \mathbf{A}^{(n)}$

Hauptabschnittsmatrix

Definition 2.24

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Dann heißt

$$\mathbf{A}[k] := \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k,1} & \cdots & a_{k,k} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k\times k} \quad \text{für } k = 1,\ldots,n$$

die führende $k \times k$-Hauptabschnittsmatrix von $\mathbf{A}$ und $\det(\mathbf{A}[k])$ die führende k-te Hauptabschnittsdeterminante.

Beispiel 2.25

Für die 3×3-Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

sind die drei führenden Hauptabschnittsmatrizen

$$\mathbf{A}[1] = (1), \quad \mathbf{A}[2] = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}[3] = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}.$$

Existenz einer LR-Zerlegung

Satz 2.26

Es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *eine reguläre Matrix.*

Dann besitzt $\mathbf{A}$ *genau dann eine LR-Zerlegung, wenn* $\det(\mathbf{A}[k]) \neq 0$ *für alle* $k = 1, \ldots, n$ *gilt.*

Beispiel 2.27

- Die Matrix $\mathbf{A}$ aus Beispiel 2.25 besitzt eine LR-Zerlegung.
- Für die reguläre Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 7 \end{pmatrix}$$

  existiert keine LR-Zerlegung.

Eigenschaften von Dreiecksmatrizen

Lemma 2.28

(i) *Sind* $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *und* $\mathbf{L}' \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *untere (normierte) Dreiecksmatrizen, so ist auch* $\mathbf{L}\mathbf{L}'$ *eine untere (normierte) Dreiecksmatrix.*

(ii) *Ist* $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *eine reguläre untere (normierte) Dreiecksmatrix, so ist auch* $\mathbf{L}^{-1}$ *eine untere (normierte) Dreiecksmatrix.*

(iii) *Die Aussagen (i) und (ii) gelten analog für obere (normierte) Dreiecksmatrizen.*

Eindeutigkeit der LR-Zerlegung

Satz 2.29

Es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *eine reguläre Matrix mit* $\det(\mathbf{A})[k] \neq 0$ *für* $k = 1, \ldots, n$.

Dann ist die existierende LR-Zerlegung von $\mathbf{A}$ *eindeutig bestimmt.*

Beweis.

- Es seien $\mathbf{L}_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{A} = \mathbf{L}_2\mathbf{R}_2$ zwei LR-Zerlegungen für $\mathbf{A}$.
- Daraus folgt $\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2$.
- Nach Lemma 2.28 ist $\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1}$ eine obere Dreiecksmatrix und $\mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2$ eine untere normierte Dreiecksmatrix.
- Aus der Gleichheit und den speziellen Eigenschaften folgt $\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1} = \mathbf{E} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2$.
- Damit folgt $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2$ und $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2$.

Aufwand der LR-Zerlegung

Algorithmus 2.30

Konkreter Kern der LR-Zerlegung:

for $j := 1$ **to** $n-1$ **do**
    for $i := j+1$ **to** n **do**
        $l_{i,j} := a_{i,j}/a_{j,j}$
        for $k := j+1$ **to** n **do**
            $a_{i,k} := a_{i,k} - l_{i,j} * a_{j,k}$
        end
    end
end

Hauptaufwand: innerste Schleife, dort zwei Operationen

Wenn wir über alle Schleifendurchläufe der innersten Schleife summieren, erhalten wir:

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=j+1}^{n} \sum_{k=j+1}^{n} 2 &= 2 \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=j+1}^{n} (n-j) \\
&= 2 \sum_{j=1}^{n-1} (n-j)^2 \\
&= 2 \sum_{j=1}^{n-1} j^2 \\
&= 2 \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} \approx \frac{2}{3} n^3
\end{aligned}
$$

Fazit: Der Zeitaufwand der LR-Zerlegung beträgt $O(n^3)$.

LR-Zerlegung mit Pivotisierung

- Die Matrix
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
hat keine LR-Zerlegung.
- Die Matrix $\mathbf{A}$ ist aber regulär und somit wäre $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ stets eindeutig lösbar.
- Wie können wir dieses Problem lösen? Zeilenvertauschung!
- Mit geeigneten Zeilenvertauschungen existiert stets eine LR-Zerlegung.
- Formal repräsentieren wir Zeilenvertauschungen durch eine Permutationsmatrix.

Existenz einer Zerlegung mit Zeilenvertauschung

Satz 2.31

Jede reguläre Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *besitzt eine Zerlegung der Gestalt*

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LR}$$

mit

- *einer Permutationsmatrix* $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$,
- *einer normierten unteren Dreiecksmatrix* $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *und*
- *einer oberen Dreiecksmatrix* $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Beispiel 2.32

Wir betrachten die reguläre Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 7 \end{pmatrix}$$

aus Beispiel 2.27, für die keine LR-Zerlegung existiert.

Dagegen ist, wenn wir die zweite und dritte Zeile von $\mathbf{A}$ vertauschen, eine LR-Zerlegung möglich:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{P}} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 7 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 7 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}}.$$

Lösung eines LGS mittels LR-Zerlegung und Pivotisierung

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \iff \mathbf{PAx} = \mathbf{Pb} \iff \mathbf{LRx} = \mathbf{Pb}$$

führt zu folgendem Algorithmus:

Algorithmus 2.33

Eingabe:

- *reguläre Matrix* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$
- *rechte Seite* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$

Ausgabe:

1. *Bestimme eine Zerlegung* $\mathbf{PA} = \mathbf{LR}$.
2. *Setze* $\mathbf{c} := \mathbf{Pb}$.
3. *Löse* $\mathbf{Ly} = \mathbf{c}$ *durch Vorwärtssubstitution.*
4. *Löse* $\mathbf{Rx} = \mathbf{y}$ *durch Rückwärtssubstitution.*

Matrix zur Vertauschung zweier Zeilen

Wir bezeichnen mit $\mathbf{P}_{ij} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Permutationsmatrix, welche die i-te und die j-te Zeile untereinander vertauscht.

$\mathbf{P}_{ij}$ entspricht der Einheitsmatrix, wobei i-te und j-te Zeile vertauscht sind.

$$
P_{ij} := \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
& \ddots & & & & & & & & & \\
& & 1 & & & & & & & & \\
& & & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 & & & \\
& & & \vdots & 1 & & & \vdots & & & \\
& & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & & \\
& & & \vdots & & & 1 & \vdots & & & \\
& & & 1 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & & & \\
& & & & & & & & 1 & & \\
& & & & & & & & & \ddots & \\
& & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix}
&
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \\ \\ \leftarrow j \\ \\ \\ \\
\end{array}
\\
\begin{array}{ccccccccccc}
& & & \uparrow & & & & \uparrow & & & \\
& & & i & & & & j & & &
\end{array}
&
\end{array}
$$

Beispiel zu LR-Zerlegung mit Pivotisierung

Beispiel 2.34

Wir betrachten die Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & -1 & -2 \\ 2 & -2 & 4 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Wir vertauschen die beiden ersten Zeilen und erhalten damit

$$\mathbf{P}_{1,2}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Fortsetzung Beispiel.

Mit der Frobenius-Matrix

$$\mathbf{L}_1 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{1,2}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & -2 \\ 0 & 2 & -1 & 1.5 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Fortsetzung Beispiel.

Jetzt ist keine Zeilenvertauschung notwendig, dies machen wir durch

$$\mathbf{P}_{2,2} := \mathbf{E}$$

deutlich. Mit der Frobenius-Matrix

$$\mathbf{L}_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{2,2}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{1,2}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 3.5 \\ 0 & 0 & 1.5 & -1 \end{pmatrix}.$$

Fortsetzung Beispiel.

In der letzten Iteration vertauschen wir mittels $\mathbf{P}_{3,4}$ die dritte und vierte Zeile.

Anschließend ist keine weitere Transformation mehr notwendig, d. h. wir wählen $\mathbf{L}_3 := \mathbf{E}$ und erhalten damit

$$\mathbf{L}_3\mathbf{P}_{3,4}\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{2,2}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{1,2}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1.5 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 3.5 \end{pmatrix} =: \mathbf{R}.$$

Fortsetzung Beispiel.

Wenn wir jetzt durch

$$\mathbf{c} := \mathbf{L}_3 \mathbf{P}_{3,4} \mathbf{L}_2 \mathbf{P}_{2,2} \mathbf{L}_1 \mathbf{P}_{1,2} \mathbf{b}$$

die gleichen Transformationen auch auf die rechte Seite $\mathbf{b}$ anwenden, könnten wir das ursprüngliche LGS $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mittels Rückwärtssubstitution für

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{c}$$

lösen.

Grundversion einer LR-Zerlegung mit Pivotisierung

Algorithmus 2.35

$\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$

for $j := 1$ **to** $n-1$ **do**

Wähle aus der j*-ten Spalte von* $\mathbf{A}^{(j)}$ *ein Element* $a_{ij}^{(j)} \neq 0$ *mit* $i \geq j$

$\tilde{\mathbf{A}}^{(j)} := \mathbf{P}_{j,i}\mathbf{A}_{(j)}$

for $i := j+1$ **to** n **do**

$l_{i,j} := \tilde{a}_{i,j}^{(j)} / \tilde{a}_{j,j}^{(j)}$

end

Definiere $\mathbf{L}_j$ *gemäß 2.19*

$\mathbf{A}^{(j+1)} := \mathbf{L}_j\tilde{\mathbf{A}}^{(j)}$

end

$\mathbf{R} := \mathbf{A}^{(n)}$

Bemerkungen zur Pivotisierung

- Im Allgemeinen wählt man das Pivotelement $a_{ij}^{(j)}$ so, dass

$$a_{ij}^{(j)} = \max_{j \leq k \leq n} |a_{kj}^{(j)}|$$

gilt.
- Insbesondere führt man auch dann eine Zeilenvertauschung durch, wenn $a_{jj}^{(j)} \neq 0$ gilt.
- Grund: bessere numerische Stabilität
- Man nennt das hier gezeigte Vorgehen Spaltenpivotisierung.
- Algorithmus 2.35 liefert tatsächlich eine Zerlegung der Form $\mathbf{PA} = \mathbf{LR}$. Auf einen Beweis hierfür verzichten wir.

Bemerkungen zu einer Implementierung

- Die durchgeführten Zeilenvertauschungen merken wir uns einfach in einer Permutation π repräsentiert als Array.
- Initialisierung: $\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$
- Aus π können am Ende $\mathbf{P}$ bestimmen.
- Die $l_{i,j}$ tragen wir in der Matrix $\mathbf{L}$ ein.
- Wenn wir in Iteration j eine Zeilenvertauschung der Zeilen i und j vornehmen, tauschen wir auch in $\mathbf{L}$ die Einträge in diesen Zeilen, aber nur bis zur Spalte $j-1$.

Beispiele zur LR-Zerlegung mit Pivotisierung

Beispiel 2.36

Für Beispiel 2.34 erhalten wir

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Probe und Herleitung, Tafel ✎

Beispiel 2.37

Wir betrachten die Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 6 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

und führen eine LR-Zerlegung mit Pivotisierung durch, wobei wir jeweils durch Zeilenvertauschung das betragsmäßig größte Element auf die Diagonale ziehen.

Als Ergebnis erhalten wir

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{4}{11} & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{11}{2} & \frac{3}{4} \\ 0 & 0 & \frac{27}{22} \end{pmatrix}.$$

Durchführung Tafel ✎.

Fortsetzung Beispiel.

Jetzt betrachten wir noch das LGS

$$\mathbf{Ax} = \begin{pmatrix} 16 \\ 14 \\ 11 \end{pmatrix} =: \mathbf{b}.$$

Wir berechnen $\mathbf{Pb}$:

$$\mathbf{Pb} = \begin{pmatrix} 11 \\ 16 \\ 14 \end{pmatrix} =: \mathbf{c}.$$

Wir lösen $\mathbf{Ly} = \mathbf{c}$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{4}{11} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 16 \\ 14 \end{pmatrix}$$

ergibt $y_1 = 11, y_2 = \frac{53}{4}, y_3 = \frac{81}{22}$.

Fortsetzung Beispiel.

Wir lösen $\mathbf{Rx} = \mathbf{y}$:

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{11}{2} & \frac{3}{4} \\ 0 & 0 & \frac{27}{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ \frac{53}{4} \\ \frac{81}{22} \end{pmatrix}$$

ergibt $x_3 = 3, x_2 = 2, x_1 = 1$.

Tridiagonalmatrix

Definition 2.38

Eine Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $d_{ij} = 0$ für $|i - j| \geq 2$ heißt Tridiagonalmatrix.

Eine Tridiagonalmatrix hat also die Gestalt

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} * & * & & & 0 \\ * & * & * & & \\ & * & * & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix}.$$

Bemerkungen

- Eine Tridiagonalmatrix hat also nur auf der Hauptdiagonalen und den beiden Nebendiagonalen Einträge $\neq 0$.
- Gleichungssysteme mit Tridiagonalmatrix treten z. B. bei einer Interpolation mit kubischen Splines auf.
- Ziel: Definition einer Spezialversion der LR-Zerlegung für Tridiagonalmatrizen
- Motivation: geringerer Berechnungsaufwand als bei der normalen LR-Zerlegung

Lösungsansatz

Wir vermuten, dass bei einer LR-Zerlegung einer Tridiagonalmatrix die Matrizen **L** und **R** Bidiagonalmatrizen sind.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{T} &= \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & 0 \\ \gamma_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_n \\ 0 & & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \\
&= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 & r_2 & & & \\ & d_2 & r_3 & & \\ & & d_3 & \ddots & \\ & & & \ddots & r_n \\ & & & & d_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{R}}
\end{aligned}
$$

Mit diesem Ansatz erhalten wir:

$$\begin{array}{lll}
 & \alpha_1 = d_1 & \beta_2 = r_2 \\
\gamma_2 = l_2 d_1 & \alpha_2 = l_2 r_2 + d_2 & \beta_3 = r_3 \\
\gamma_3 = l_3 d_2 & \alpha_3 = l_3 r_3 + d_3 & \beta_4 = r_4 \\
\vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \beta_n = r_n \\
\gamma_n = l_n d_{n-1} & \alpha_n = l_n r_n + d_n &
\end{array}$$

Wenn wir nach den gesuchten Komponenten d_i, r_i und l_i auflösen, erhalten wir die gesuchten Elemente für die LR-Zerlegung (ohne Pivotisierung).

LR-Zerlegung einer Tridiagonalmatrix

Algorithmus 2.39

$d_1 := \alpha_1$
$r_2 := \beta_2$
for $j := 2$ **to** $n-1$ **do**
  $l_j := \gamma_j / d_{j-1}$
  $d_j := \alpha_j - l_j \cdot d_j$
  $r_{j+1} := \beta_{j+1}$
end
$l_n := \gamma_n / d_{n-1}$
$d_n := \alpha_n - l_n \cdot r_n$

Anpassung von Vorwärts- und Rückwärtssubstitution

Algorithmus 2.40

Vorwärtssubstitution für $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$.

$y_1 := b_1$
for $j := 2$ **to** n **do**
    $y_j := b_j - l_j \cdot y_{j-1}$
end

Algorithmus 2.41

Rückwärtssubstitution für $\mathbf{Rx} = \mathbf{y}$.

$x_n := y_n / d_n$
for $j := n - 1$ **downto** 1 **do**
    $x_j := (y_j - r_{j+1} \cdot x_{j+1}) / d_j$
end

Aufwand und Anwendbarkeit

Zeitaufwand: $O(n)$

Lemma 2.42

Sei $\mathbf{T}$ *eine Tridiagonalmatrix. Wenn die Komponenten der Matrix die Ungleichungen*

$$\begin{array}{rcll} |\alpha_1| & > & |\beta_2| & \\ |\alpha_j| & \geq & |\gamma_j| + |\beta_{j+1}| & \text{für } j = 2, \ldots, n-1 \\ |\alpha_n| & \geq & |\gamma_n| & \\ \gamma_j & \neq & 0 & \text{für } j = 2, \ldots, n \end{array}$$

erfüllen, dann ist der Algorithmus zur LR-Zerlegung einer Tridiagonalmatrix (2.39) wohldefiniert.

Positiv definite Matrix

Definition 2.43

Es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix.

$\mathbf{A}$ heißt positiv definit, wenn für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ gilt:

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0.$$

Beispiel 2.44

Die Einheitsmatrix $\mathbf{E}$ ist positiv definit, denn:

$$\mathbf{x}^T \mathbf{E} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{x}\|_2^2 > 0 \quad \text{für } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}.$$

Bemerkung: $\|\mathbf{x}\|_2$ bezeichnet die euklidische Norm von $\mathbf{x}$.

Definitheit allgemein

Natürlich existieren weitere Definitheitsbegriffe:

- positiv semidefinit: $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$
- negativ definit: $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} < 0$
- negativ semidefinit: $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} \leq 0$
- indefinit: $\exists \mathbf{x} : \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ und $\exists \mathbf{y} : \mathbf{y}^T\mathbf{A}\mathbf{y} < 0$

Wir untersuchen aber nur positiv definite Matrizen.

Anwendungen

- Wir betrachten positiv definite Matrizen im Zusammenhang mit Ausgleichsproblemen im nächsten Kapitel.
- Dort treten positiv definite quadratische Formen auf.
- Eine quadratische Form ist eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ der Art:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i}^{n} \alpha_{ij} x_i x_j$$

- Beispiel:

$$f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 4x_1x_2 + 3x_2^2$$

- In Matrixschreibweise:

$$f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Cholesky-Zerlegung

Satz 2.45

Eine symmetrische Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *ist genau dann positiv definit, wenn eine reguläre untere Dreiecksmatrix* $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *existiert, mit*

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T.$$

- Wir können leicht zeigen, dass aus der Existenz von $\mathbf{L}$ die positive Definitheit folgt:

$$\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{L}\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \left(\mathbf{L}^T\mathbf{x}\right)^T\left(\mathbf{L}^T\mathbf{x}\right) = \|\mathbf{L}^T\mathbf{x}\|_2^2 > 0 \quad \text{für } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}.$$

- Die Umkehrung ergibt sich aus der Konstruktion des folgenden Algorithmus.

- Wenn wir zusätzlich $l_{ii} > 0$ verlangen, ist die Matrix $\mathbf{L}$ sogar eindeutig bestimmt.
- Diese eindeutige Zerlegung nennen wir Cholesky-Zerlegung

Definition 2.46

Es sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine positiv definite Matrix.

Dann heißt eine Zerlegung von $\mathbf{A}$ in der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $l_{ii} > 0$ für $i = 1, \ldots, n$ Cholesky-Zerlegung von $\mathbf{A}$.

Beispiel 2.47

Die Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

hat die Cholesky-Zerlegung

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Lösung eines LGS mittels Cholesky-Zerlegung

Algorithmus 2.48

Lösung eines linearen Gleichungssystems $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ *für eine positiv definite Matrix* $\mathbf{A}$.

1. *Bestimme eine Cholesky-Zerlegung* $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^T$.
2. *Löse* $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ *durch Vorwärtssubstitution.*
3. *Löse* $\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$ *durch Rückwärtssubstitution.*

Herleitung der Cholesky-Zerlegung

Wir vergleichen:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & \cdots & a_{n,1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{n,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} = \underbrace{\begin{pmatrix} l_{1,1} & & & \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & \cdots & l_{n,1} \\ & l_{2,2} & \cdots & l_{n,2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{n,n} \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}^T}$$

Daraus ergibt sich:

$$\begin{array}{lcl} a_{1,1} = l_{1,1}^2 & \Longrightarrow & l_{1,1} = \sqrt{a_{1,1}} \\ \hline a_{2,1} = l_{2,1} l_{1,1} & \Longrightarrow & l_{2,1} = a_{2,1} / l_{1,1} \\ a_{2,2} = l_{2,1}^2 + l_{2,2}^2 & \Longrightarrow & l_{2,2} = \sqrt{a_{2,2} - l_{2,1}^2} \\ \hline \end{array}$$

$$
\begin{array}{lcl}
a_{3,1} = l_{3,1} l_{1,1} & \Longrightarrow & l_{3,1} = a_{3,1} / l_{1,1} \\
a_{3,2} = l_{3,1} l_{2,1} + l_{3,2} l_{2,2} & \Longrightarrow & l_{3,2} = (a_{3,2} - l_{3,1} l_{2,1}) / l_{2,2} \\
a_{3,3} = l_{3,1}^2 + l_{3,2}^2 + l_{3,3}^2 & \Longrightarrow & l_{3,3} = \sqrt{a_{3,3} - l_{3,1}^2 - l_{3,2}^2} \\
\hline
\vdots & \vdots & \vdots \\
\hline
a_{n,1} = l_{n,1} l_{1,1} & \Longrightarrow & l_{n,1} = a_{n,1} / l_{1,1} \\
a_{n,2} = l_{n,1} l_{2,1} + l_{n,2} l_{2,2} & \Longrightarrow & l_{n,2} = (a_{n,2} - l_{n,1} l_{2,1}) / l_{2,2} \\
\vdots & \vdots & \vdots \\
a_{n,n} = l_{n,1}^2 + l_{n,2}^2 + \cdots + l_{n,n}^2 & \Longrightarrow & l_{n,n} = \sqrt{a_{n,n} - l_{n,1}^2 - \cdots - l_{n,n-1}^2}
\end{array}
$$

Beispiel 2.49

Für die Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 6 \\ -2 & 5 & -1 \\ 6 & -1 & 26 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Algorithmus zur Cholesky-Zerlegung

Algorithmus 2.50

Eingabe: *positiv definite Matrix* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$
Ausgabe: Matrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *mit* $l_{i,i} > 0$ *und* $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$

for $i := 1$ *to* n **do**
  for $j := 1$ **to** $i - 1$ **do**
    $l_{i,j} := \left(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{j,k} l_{i,k}\right) / l_{j,j}$
  end
  $l_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k}^2}$
end

Aufwand: $\approx \frac{1}{3} n^3$ Operationen, also die Hälfte der LR-Zerlegung.

Zusammenfassung

Lösungsalgorithmen für Gleichungssysteme:

- Dreiecksmatrizen: Vorwärts- und Rückwärtssubstitution
- regulär: LR-Zerlegung
- Problem bei LR-Zerlegung: existiert evtl. nicht, dann Pivotisierung
- tridiagonal: mit effizientem Spezialalgorithmus in linearer Zeit
- positiv definit: Cholesky-Zerlegung