Methodische und Praktische Grundlagen der Informatik 4

Übungsblatt 3

mpgi4@cg.tu-berlin.de

WiSe 2014/2015

Aufgabe 1: Lineare Gleichungssysteme

Wir wollen den Schnittpunkt einer Ebene und einer Gerade im Raum bestimmen. Dazu wollen wir annehmen, dass die Ebene E und die Gerade G in Parameterform gegeben sind:

$$E : x = \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } \alpha, \beta \in \mathbb{R} \tag{1}$$

$$G : x = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } \mu \in \mathbb{R} \tag{2}$$

Ein Schnittpunkt von Gerade und Ebene ist ein Punkt, welcher sowohl die Ebenengleichung als auch die Geradengleichung erfüllt. Durch Gleichsetzen der beiden Gleichungen erhalten wir ein Gleichungssystem in den Unbekannten α, β und μ. Dieses ist linear, da die Unbekannten nur als gewichtete Summanden auftreten:

$$-3 + \alpha = 2 + \mu \tag{3a}$$

$$1 - \alpha - \beta = -3 - 2\mu \tag{3b}$$

$$1 - \alpha + 2\beta = 2 + 3\mu \tag{3c}$$

Durch das Addieren von Vielfachen dieser Gleichungen bzw. das Austauschen von Gleichungen ändert sich die Lösungsmenge des Gleichungssystems nicht. Eine Lösungsstrategie besteht nun darin, durch diese Operation drei neue Gleichungen zu erhalten, die eine Dreiecks-Struktur haben: Die dritte Gleichung hängt nur von einer Variable (z.B. μ) ab, die zweite Gleichung von zwei Variable (z.B. μ und α) usw. Die Formalisierung dieses Verfahrens heißt *Gaußsches Eliminationsverfahren*.

Warum können Zeilen addiert werden, ohne dass die Lösung verändert wird?

Betrachten wir ein 2×2 Gleichungssystem in Matrix-Vektor Form:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Wir können die Matrix-Vektor Gleichung als zwei Skalarprodukte betrachten:

$$e = \left\langle \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right\rangle \tag{5a}$$

$$f = \left\langle \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right\rangle \tag{5b}$$

Für die Summe der beiden reellen Zahlen e und f erhalten wird damit:

$$e + f = \left\langle \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right\rangle + \left\langle \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right\rangle \tag{6a}$$

und mit der Distributivität des Skalarprodukts erhält man

$$e + f = \left\langle \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right\rangle. \tag{6b}$$

Aber die letzte Zeile ist nichts anderes, als die Addition von zwei Gleichungen (mit der Linearität bezüglich der skalare Multiplikation hält das Ergebnis auch für das Vielfache der Gleichungen). Da bei der Gauß-Elimination immer die erste Gleichung erhalten wird, haben wir also e und $e + f$. Aber davon kann natürlich f weiterhin eindeutig identifiziert werden, so dass die zwei neuen Gleichungen in der Tat äquivalent sind zu den beiden ursprünglichen, dass heißt, dass sie tatsächlich den gleichen Lösungsraum besitzen.

Die Darstellung von Gleichungssystemen in Matrixform ermöglicht eine übersichtliche Durchführung der Gauß-Elimination. Addieren von Gleichungen entspricht dann dem Addieren von Zeilen der Matrix und von Elementen des Vektors auf der rechten Seite. Darüber hinaus, und für unsere Zwecke natürlich noch viel wichtiger, ist die Matrixdarstellung die Voraussetzung für eine effiziente Umsetzung des Verfahrens auf dem Computer. Das folgende Matrixgleichung ist zum Beispiel äquivalent zum Gleichungssystem in Gleichung 3:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

Noch kompakter lässt sich dies wie folgt darstellen

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 5 \\ -1 & -1 & 2 & -4 \\ -1 & 2 & -3 & 1 \end{array}\right) \tag{8}$$

wobei die rechte Seite des Gleichungssystem (und nicht etwa die gesuchten Variablen) nach dem senkrechten Strich geschrieben wird. Wie wir im Folgenden sehen werden, lässt sich ein Gleichungssystem sehr leicht lösen, wenn es in Dreiecksform ist, dass heißt, wenn alle Elemente unterhalb der Diagonalen Null sind. Um unser Beispile in Dreiecksform zu überführen, müssen wir alle Elemente in der erste Spalte, bis auf das erste, eliminieren. Wenn wir also die erste mit der zweiten Zeile addieren und die erste mit der dritten, so erhalten wir für das Gleichungssystem:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 5 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -4 & 6 \end{array}\right) \tag{9}$$

wobei wir auch die rechte Seite transformiert haben. Das Ziel der Dreiecksform ist schon fast erreicht. Das Element A_{32} der Matrix kann Null gesetzt werden, in dem wir das doppelte der zweiten Zeile mit der dritten addieren. Dann erhalten wir:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 5 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 8 \end{array}\right) \tag{10}$$

Das umgeformte System lässt sich jetzt einfach durch sogenanntes *Rückwärtseinsetzen* lösen, dass heisst die Variablen werden von unten nach oben gelöst, was durch einfaches einsetzen möglich ist. Aus der letzten Zeile entnehmen wir Für unser Beispiel entnehmen wir aus der letzten Zeile das $-2\mu = 8$ und damit $\mu = -4$. Einsetzen dieses Wertes in der zweiten Zeile liefert $-\beta - 4 = 1$, so dass $\beta = -5$. Analog kann für α oder größere Gleichungssysteme gelöst werden.

Aufgabe 1.1: Übungsaufgabe

Es kann passieren, dass am Ende des Verfahrens ein System der Form

$$\left(\begin{array}{ccc|c} x_{00} & x_{01} & x_{02} & a \\ 0 & x_{11} & x_{12} & b \\ 0 & 0 & 0 & c \end{array}\right) \quad , \quad c \neq 0 \tag{11a}$$

oder der Form

$$\left(\begin{array}{ccc|c} x_{00} & x_{01} & x_{02} & a \\ 0 & x_{11} & x_{12} & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \tag{11b}$$

entsteht. Erkläre jeweils, was diese Situationen geometrisch für unser Problem und im Allgemeinen für die Lösung von Gleichungssystemen bedeuten.

Geometrisch gibt es zwei degenerierte Lösungen: die Gerade ist parallel zur Ebene in einer Distanz ungleich Null, so dass es keinen Schnittpunkt gibt, oder in einer Distanz Null, so dass jeder Punkt auf der Gerade eine Lösung ist. Gleichung 11a entspricht dem ersten Fall, dass heißt es gibt keine Lösung. Dies folgt algebraisch, da die Gleichung einen Widerspruch enthält, was auch für allgemeine Gleichungssysteme anzeigt, dass es keine Lösung gibt. Gleichung 11b entspricht unendlich vielen Lösungen. Dies ist durch den immer wahren Ausdruck in der letzten Zeile der Gleichung erkennbar.

Aufgabe 2: Gaußsche Eliminationsmethode mit Pivoting

Im Folgenden wollen wir uns verdeutlichen, dass eine ungünstiger Auswahl des Pivotelementes zu numerischen Problemen führen kann. Wir nehmen dabei an, dass die Berechnungen in einer Gleitkomma-Darstellung mit drei Digits in der Mantisse erfolgen,

$$\pm 0\,.\,f_1\,f_2\,f_3\;\times\;10^k \tag{12}$$

wobei f_1, f_2, f_3 für die drei Digits stehen; zum Beispiel

$$x = 3.12\;\rightarrow\;\hat{x} = +0.312 \times 10^1 \tag{13}$$

und eine Konvertierung von reellen Zahlen in die Gleitkomma-Darstellung erfolgt entsprechend den normalen Rundungsregeln.

Betrachten werden soll das folgende Gleichungssystem,

$$\begin{array}{rcrcl} 0.0001\,x & + & 1.00\,y & = & 1.00 \\ 1.00\,x & + & 1.00\,y & = & 2.00 \end{array} \tag{14}$$

welches als exakte Lösung

$$x = \frac{10000}{9999} \approx 1.0001, \quad y = \frac{9998}{9999} \approx 0.9999 \tag{15}$$

besitzt. In der gewählten Gleitkomma-Darstellung erhalten wir also durch die notwendige Rundung für das Ergebnis:

$$x = 1.0001 = 0.10001 \times 10^1 \;\rightarrow\; \hat{x} = 0.1 \times 10^k \tag{16}$$

$$y = 0.9999 = 0.99999 \times 10^0 \;\rightarrow\; \hat{y} = 0.1 \times 10^k, \tag{17}$$

dass heißt $\hat{x} = \hat{y} = 1.0$.

In Matrixform sieht das Gleichungssystem wie folgt aus:

$$Ax = \begin{pmatrix} 0.0001 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.00 \\ 2.00 \end{pmatrix} = b \tag{18}$$

und da alle Werte exakt in unserer Gleitkomma-Darstellung abgebildet werden können haben wir $A = \hat{A}$. Führen wir nun die Gauß-Elimination durch, so können wir das Matrixelement A_{21} Null setzen, wenn die erste und zweite Zeile, geeignet skaliert, addieren. Der Skalierungsfaktor ergibt sich aus dem Pivotelement A_{11}:

$$l_{21} = \frac{A_{21}}{A_{11}} = \frac{1.0}{0.0001} = 10000.00 \;\rightarrow\; \hat{l}_{21} = 0.1 \times 10^5 \tag{19}$$

wobei $\hat{A}_{ij}$ die Elemente von $\hat{A}$ sind. Die Elemente, welche durch die Addition modifiziert werden müssen, sind (hier mit einen Strich angegeben):

$$A'_{22} = \hat{A}_{22} - \hat{l}_{21} \cdot \hat{A}_{12} \tag{20a}$$

$$= 1.00 - 10000.00 \cdot 1.00 \tag{20b}$$

$$= -0.9999 \times 10^4 \tag{20c}$$

und die Repräsentation in der Gleitkomma-Darstellung ist demzufolge

$$\rightarrow \hat{A}'_{22} = -0.1 \times 10^5. \tag{20d}$$

Analog erhalten wir für die rechte Seite des Gleichungssystems

$$
\begin{aligned}
b_2' &= \hat{b}_2 - \hat{l}_{21} \cdot \hat{b}_1 && (20e)\\
&= 2.00 - 10000.00 \cdot 1.00 && (20f)\\
&= -0.9998 \times 10^4 && (20g)\\
\rightarrow \hat{b}_2' &= -0.1 \times 10^5 && (20h)
\end{aligned}
$$

Das Gleichungssystem ist in oberer Dreiecksform also durch

$$\hat{A}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^{-5} & 0.1 \times 10^1 \\ 0.0 \times 10^0 & -0.1 \times 10^5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^1 \\ -0.1 \times 10^5 \end{pmatrix} \tag{21}$$

in unserer Gleitkomma-Darstellung gegeben. Rückwärtseinsetzen ergibt:

$$\hat{y} = 0.1 \times 10^1 = 1.00, \tag{22}$$

$$\hat{x} = 0.0 \times 10^0 = 0. \tag{23}$$

Wir sehen also, dass $\hat{x}$ einen sehr großen relativen Fehler besitzt und in Bezug auf seine korrekte Größe ganz erheblich abweicht.

Wir wollen nun betrachten was passiert, wenn wir vor der Durchführung der Gauß-Elimination die Zeilen vertauschen. Das heißt, wir betrachten das System:

$$\begin{pmatrix} 1.00 & 1.00 \\ 0.0001 & 1.00 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.00 \\ 1.00 \end{pmatrix} \tag{24}$$

was natürlich weiterhin die gleiche Lösung wie Gleichung 14. Gauß-Elimination ergibt dann:

$$
\begin{aligned}
l_{21} &= \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{0.1 \times 10^{-3}}{1.00} \;\rightarrow\; \hat{l}_{21} = 0.1 \times 10^{-3} && (25a)\\
A_{22}' &= A_{22} - l_{21} \cdot A_{12} && (25b)\\
&= 1.00 - 0.0001 \cdot 1.00 && (25c)\\
&= 0.9999 && (25d)\\
\rightarrow \hat{A}_{22}' &= 0.1 \times 10^1 && (25e)\\
b_2' &= b_2 - l_{21} \cdot b_1 && (25f)\\
&= 1.00 - 0.0001 \cdot 2.00 && (25g)\\
&= 0.9998 && (25h)\\
\rightarrow \hat{b}_2' &= 0.1 \times 10^1 && (25i)
\end{aligned}
$$

Als System in oberer Dreiecksform erhalten wir also

$$\hat{A}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.00 & 1.00 \\ 0 & 1.00 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.00 \\ 1.00 \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Durch Rückwärtseinsetzen erhalten wir also $\hat{x} = 1.0$ und $\hat{y} = 1.00$ und das Ergebnis entspricht der Darstellung des exakten Ergebnisses in unserer Gleitkomma-Darstellung.

Warum hat die einfache Vertauschung der Zeilen so fundamentale Folgen? Wenn wir $A_{11} = 0.0001$ als Pivot verwenden, dann erhalten wir für die Zwischenergebnisse in Gleichung 20 sehr "große" Zahlen, und groß insbesondere im Vergleich zu den Ergebniswerten. Die Zwischenergebnisse in Gleichung 20 müssen gerundet werden, um sie in der verwendeten Gleitkomma-Darstellung abbilden zu können. Der relative Fehler bei dieser Rundung ist klein, $|10000.0 - 9999.0/9999.0| \approx 0.0001$ aber der absolute Fehler, $10000.0 - 9999.0 = 1.0$, ist, in Relation zum Endergebnis groß. Dieser kleine relative Fehler bei der Rundung der "großen" Zwischenergebnisse führt später zu dem katastrophalen Fehler beim "kleinen" Endergebnis. Dieser Effekt ist ähnlich zur Auslöschung, wo auch der Unterschied in der Größenordnung von Zwischenergebnissen und Endergebnis zu katastrophalen Folgen geführt hat. Wenn wir $A_{11} = 1.0$ als Pivot verwenden, dann erhalten wir Zwischenergebnisse in Gleichung 25 welche die gleiche Größenordnung haben wie das Endergebnis. Damit findet keine Verstärkung von Rundungsfehlern statt und das Ergebnis ist genau in der verwendeten Gleitkomma-Darstellung. Im Allgemeinen gilt, dass das Pivot immer so groß wie möglich gewählt werden sollte, um numerische Probleme und insbesondere die Verstärkung von Rundungsfehlern von Zwischenergebnissen zu vermeiden. Die Suche nach einer geeigneten Gleichung, welche zur Elimination einer Variable in alle darunterliegenden Gleichungen verwendet wird heißt *Pivotsuche*. In Pseudo-Code kann die Gauss-Elimination mit Pivoting wie folgt beschrieben werden:

a) Wähle im Eliminationsschritt $A^{(k)} \to A^{(k+1)}$ ein $p \in \{k, \ldots, n\}$, so dass

$$\left|a_{pk}^{(k)}\right| \geq \left|a_{jk}^{(k)}\right| \text{ für alle } j \in \{k, \ldots, n\}$$

b) Vertausche die Zeilen k und p und führe den Eliminationsschritt aus.

Neben dem hier beschriebenen Zeilen-Pivoting existiert auch Spalten und totales Pivoting. Wir werden diese nicht näher betrachten.

Aufgabe 3: LR Zerlegung[1].

In der Praxis will man häufig ein Gleichungssystem $Ax = b$ für verschiedene Vektoren b lösen. Das Gauß-Verfahren, wie wir es bis jetzt betrachtet haben, erfordert jedoch für jeden Vektor b eine vollständig neue Lösung des Gleichungssystems. Die LR Zerlegung bietet hierfür eine Lösung und ermöglicht es, ein Gleichungssystem effizient für verschiedene "Eingabedaten" b zu lösen. Einen Teil der LR Zerlegung haben wir bereits kennengelernt: R steht für die obere Dreiecksmatrix, welche das Ergebnis der Gauß-Elimination ist. Was für eine bereits berechnete Matrix R fehlt, um diese für eine beliebige rechte Seite b verwenden zu können, sind die Transformationen, Zeilenaddition und Zeilentausch, welche von der Eingabematrix A zu R geführt haben. Der zweite Teil der LR Zerlegung, die untere Dreiecksmatrix L, enthält diese Informationen. Damit haben wir $A = L\,R$ und L und R repräsentieren zusammen wieder das ursprüngliche lineare Gleichungssystem. Da L und R beide Dreiecksmatrizen sind, ist eine sehr effiziente Lösung des Gleichungssystems mit Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen möglich. Betrachten wir nun näher, wie L konstruiert werden kann und wie damit eine effiziente Lösung eines Gleichungssystems möglich ist.

Betrachten wir ein 2×2 Gleichungssystem, welche in Matrixform als

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -a & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} \tag{27}$$

gegeben ist. Für die Gauß-Elimination müssen wir $-a$ in der zweiten Zeile durch die Addition der beiden Zeile eliminieren. Wenn wir das Produkt von A mit einer speziellen Matrix

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{Id} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{28}$$

betrachten, so haben wir

$$L_1\, A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ -a & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ a - a & b + c \end{pmatrix} \tag{29}$$

Wir sehen also, dass $L_1\, A$ genau die gewünschten Operationen implementiert: die erste Zeile des Produkts ist wieder die erste Zeile von A und die zweite Zeile ist die Summe der Zeilen in A.

Wenn wir mehrere Zeilen-Transformationen haben, dann kann können diese als Produkt von mehreren L_a Matrizen ausgedrückt werden. Zum Beispiel, für ein 3×3 Gleichungssystem drücken

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

[1] LR steht für „links-rechts“. Im englischen spricht man von der *LU-Decomposition* für „lower-upper“

die Addition der ersten mit der zweiten und der ersten mit der dritten Zeile aus. Das Produkt der Matrizen

$$L_2\,L_1 = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{31}$$

entspricht, entsprechend der Definition der Matrixmultiplikation, der aufeinanderfolgenden Umsetzung der beiden Transformationen. An den vorhergehenden Beispielen sehen wir auch, dass L_a die Summe aus der Einheitsmatrix und einer Matrix $\overline{L_a}$ ist, deren (i,j)-te Element 1 ist, wenn wir die j-te Zeile der Matrix zur i-ten addieren. Im Allgemeinen, wenn wir Vielfache von Zeilen addieren, gilt für das (i,j)-te Element der Matrix $\bar{L}_a$ das

$$\overline{L}^a_{ij} = \begin{cases} c & \text{wenn } c \text{ multipliziert mit } j\text{-ten Zeile zur } i\text{-ten addiert wird} \\ 0 & \text{ansonsten} \end{cases} \tag{32}$$

und $L_a = \mathrm{Id} + \overline{L}_a$.

Betrachten wir nun, wie wir mit Hilfe der Matrizen L_a die LR Zerlegung von A erhalten können. Wenn wir Gauß-Elimination (zunächst ohne Pivoting) durch die Matrizen L_a ausdrücken, dann haben wir

$$L_k \cdots L_1 A = R. \tag{33a}$$

wobei R die obere Dreiecksmatrix ist, mit welcher das Gleichungssystem effizient mit Rückwertseinsetzen gelöst werden kann. Bezeichnen wir nun die akkumulierten Transformationen mit $L^{-1} = L_k \cdots L_1$ (die Bezeichnung L^{-1} ist unintuitiv aber Konvention), dann können wir die Matrix A, welche das ursprüngliche Gleichungssystem repräsentiert, als

$$L^{-1}A = R \quad \Longrightarrow \quad A = L\,R \tag{33b}$$

schreiben. Damit haben wir die LR Zerlegung von A erhalten. Um die Matrix L zu bestimmen, muss L^{-1} invertiert werden. Durch die spezielle Struktur von $L^{-1} = L_k \cdots L_1$ ist die Invertierung sehr einfach möglich. Betrachten wir dafür zunächst eine einzelne Matrix L_1, z.B.

$$L_1 = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{34}$$

welche, wie bereits besprochen, die Addition der ersten und zweiten Zeile der Matrix A darstellt. Die umgekehrte Operation ist die Subtraktion der ersten Zeile von der zweiten. Die entsprechende Matrix ist

$$L_1' = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{35}$$

Für die Anwendung von L_1 gefolgt von L_1' haben wir also

$$L_1'\,L_1\,A = A \tag{36}$$

da L_1 und L_1' inverse Operationen darstellen. Aber dies bedeutet auch, dass

$$L_1'\,L_1 = \mathrm{Id} \quad \rightarrow \quad L_1' = L_1^{-1}, \tag{37}$$

d.h. die Matrix L_1' ist die Inverse von L_1. Man kann natürlich auch per Hand leicht nachrechnen, dass $L_1'L_1 = I$ gilt. Mit anderen Worten: es gilt

$$L_a^{-1} = \mathrm{Id} - \overline{L_a}. \tag{38}$$

Mit den Inversen der L_a Matrizen können wir die gesuchte Matrix L bestimmen:

$$L = \left(L^{-1}\right)^{-1} = (L_k \cdots L_1)^{-1} \tag{39a}$$

und mit $(A\,B)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ erhalten wir

$$L = L_1^{-1} \cdots L_k^{-1}. \tag{39b}$$

Es muss beachtet werden, dass die Matrizen L_a^{-1} in der umgekehrten Reihenfolge multipliziert werden, wie die L_a Matrizen, d.h.

$$L_k \cdots L_1\,A = R \quad \Longrightarrow \quad A = L_1^{-1} \cdots L_k^{-1}\,R. \tag{40}$$

In der Praxis wird für eine Computerimplementierung folgende Formel zur Bestimmung von L verwendet:

$$L = \mathrm{Id} - \sum_{a=1}^{k} \overline{L_a}. \tag{41}$$

Diese zeigt auch explizit, dass sowohl das Produkt als auch die Inverse von unteren Dreiecksmatrizen wieder eine untere Dreiecksmatrize ist.

Beispiel Schauen wir uns noch einmal das einführende Beispiel von Aufgabe 1 an. Um die Matrix umzuformen, haben wir zunächst die erste Zeile auf die zweite und dritte addiert, und dann das doppelte der zweiten Zeile zur dritten addiert. Wir erhalten damit in Matrixform

$$L_3\,L_2\,L_1\,A = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\1&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\1&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}A. \tag{42a}$$

Als nächstes müssen die Matrizen auf die rechte Seite gebracht werden. Damit erhalten wir

$$A = \begin{pmatrix}1&0&0\\1&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\1&0&1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&2&1\end{pmatrix}^{-1} R. \tag{42b}$$

Wie im Vorausgehenden beschrieben sind die Matrizen L_a einfach zu invertieren, in dem wir das Vorzeichen des nicht-trivialen Matrixelementes umdrehen, was dem Wechsel zwischen Addition und Subtraktion einer Zeile entspricht. Damit erhalten wir

$$A = \begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\-1&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-2&1\end{pmatrix}R. \tag{42c}$$

Durch formelles Multiplizieren der L_a Matrizen, welches wie in Eq. 41 durch Addieren der nicht-diagonalen Einträge möglich ist, erhält man

$$A = \begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-1&-2&1\end{pmatrix}R \tag{42d}$$

welches die gesuchte Faktorisierung $A = LR$ ist. Explizit haben wir also für die Zerlegung von A:

$$\begin{pmatrix}1&0&-1\\-1&-1&2\\-1&2&-3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-1&-2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&-1&1\\0&0&-2\end{pmatrix} \tag{43}$$

wobei die Matrix R in der Praxis durch das Ausführen von Gauss-Elimination bestimmt wird und L durch das Akkumlieren der Transformationen.

Berechnung der Lösung eines Gleichungssystems mit Hilfe der LR Zerlegung Mithilfe der LR Zerlegung lässt sich ein Gleichungssystem leicht und effizient für beliebige rechte Seiten lösen. Durch Einsetzen der Faktorisierung erhalten wir zunächst:

$$A\,x = (LR)\,x = L\,R\,x = b. \tag{44}$$

Auf der linken Seite des Systems stehen jetzt zwei Matrizen, L und R, so dass keine direkte Lösung möglich ist. Zunächst lösen wir deshalb für einen temporären Vektor

$$y = R\,x \tag{45}$$

mit welchem Eq. 44 ein reguläres Gleichungssystem

$$L\,y = b \tag{46}$$

ist. Darüberhinaus ist L eine untere Dreiecksmatrix, so dass das System effizient durch Vorwärtseinsetzen beginnend von der ersten Zeile gelöst werden kann. Ist y bestimmt so kann das Gleichungssystem in Gleichung 45 gelöst werden, was auch wieder effizient möglich ist, da R eine obere Dreiecksmatrix ist, so dass Rückwärtseinsetzen verwendet werden kann. Die vollständige Lösung des Gleichungssystems erhalten wir als mit einmaligen Vorwärtseinsetzen zur Bestimmung des Zwischenergebnisses y in Gleichung 46 und dann der Lösung nach x in Gleichung 45 mit Rückwärtseinsetzen.

Aufgabe 3.1: Übungsaufgabe

Wie muss das Vorgehen modifiziert werden, damit Pivoting bei der Berechnung der LR-Zerlegung verwendet werden kann.

Bei der Spaltenpivotsuche werden die Zeilen von A neu angeordnet. Diese Vertauschung der Zeilen lässt sich formal durch die Multiplikation von links mit einer Permutationsmatrix beschreiben. Eine solche Matrix hat die Eigenschaft, dass in jeder Zeile und Spalte nur eine 1 auftritt und alle anderen Element in jeder Spalte und Zeile null sind. Zum Beispiel

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{47}$$

ist eine Permuationsmatrix. Wenn wir dies auf eine Matrix A anwenden dann erhalten wir

$$P\,A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{21} & A_{22} \\ A_{11} & A_{12} \end{pmatrix} \tag{48}$$

und wir sehen, dass P die zwei Zeilen von A vertauscht. Formell lässt sich eine Permutationsmatrix als eine Permutation der Einheitsvektoren $e_i = \delta_{ii}$ beschreiben, wenn diese als Spalten in einer Matrix angeordnet werden. Ist $\pi\colon \{1,\ldots,n\} \to \{1,\ldots,n\}$ eine Permutation von n Elementen, so ist die zugehörige Permutationsmatrix gegeben durch:

$$P_\pi = \left(e_{\pi(1)}, \ldots, e_{\pi(n)}\right) \tag{49}$$

Es sein nun P die Permutationsmatrix, welche die Vertauschungen bei der Durchführung des Gaußschen Eliminationsverfahrens beschreibt. Dann gilt: $PA = LR$. Um eine Lösung für $Ax = b$ können wir also $PAx = LRx = Pb$ mittels Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen lösen:

$$Ly = Pb \qquad \text{(Vorwärtseinsetzen)} \tag{50a}$$
$$Rx = y \qquad \text{(Rückwärtseinsetzen)} \tag{50b}$$

Beispiel Gegeben sei die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ -1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \tag{51}$$

Um die LR-Zerlegung mit Pivoting durchzuführen, starten wir mit den drei Matritzen $P = \mathrm{Id}, L = 0$ und $R = A$. Es ist zu beachten, dass die Matrix L beim Pivoting auch permutiert werden muss, da sich die hier gespeicherten Operationen ja auf die unpermutierte Matrix beziehen.

R	L	P	Beschreibung
$\begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Inititalisierung.
$\begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \\ 0 & 4 & -2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0 \\ -0.5 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Erste Spalte eliminieren.
$\begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ 0 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	Pivoting: Zeile 2 und 3 tauschen.
$\begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ 0 & 4 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & -0.5 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	Zweite Spalte eliminieren.

Nachdem wir nun das Gaußsche Eliminationsverfahren mit Pivoting durchgeführt haben, erhalten wir die gewünschte Zerlegung $PA = LR$.