5.1.1 Gaußelimination und LR-Zerlegung

Bei der Gaußelimination wird mittels Elimination von Zeilen und Spalten das LGS auf Dreiecksform gebracht:

$$A\vec{x} = \vec{b} \longrightarrow R\vec{x} = \vec{c}$$

x_0	x_1	x_2	x_3	1	
a_{00}	a_{01}	a_{02}	a_{03}	b_0	
a_{10}	a_{11}	a_{12}	a_{13}	b_1	$\cdot \frac{a_{10}}{a_{00}}$
a_{20}	a_{21}	a_{22}	a_{23}	b_2	$\cdot \frac{a_{20}}{a_{00}}$
a_{30}	a_{31}	a_{32}	a_{33}	b_3	$\cdot \frac{a_{30}}{a_{00}}$

x_0	x_1	x_2	x_3	1
a_{00}	a_{01}	a_{02}	a_{03}	b_0
0	$a_{11}^{(1)}$	$a_{12}^{(1)}$	$a_{13}^{(1)}$	$b_1^{(1)}$
0	$a_{21}^{(1)}$	$a_{22}^{(1)}$	$a_{23}^{(1)}$	$b_2^{(1)}$
0	$a_{31}^{(1)}$	$a_{32}^{(1)}$	$a_{32}^{(1)}$	$b_3^{(1)}$

x_0	x_1	x_2	x_3	1
a_{00}	a_{01}	a_{02}	a_{03}	b_0
0	$a_{11}^{(1)}$	$a_{12}^{(1)}$	$a_{13}^{(1)}$	$b_1^{(1)}$
0	0	$a_{22}^{(2)}$	$a_{23}^{(2)}$	$b_2^{(2)}$
0	0	$a_{32}^{(2)}$	$a_{33}^{(2)}$	$b_3^{(2)}$

x_0	x_1	x_2	x_3	1
a_{00}	a_{01}	a_{02}	a_{03}	b_0
0	$a_{11}^{(1)}$	$a_{12}^{(1)}$	$a_{13}^{(1)}$	$b_1^{(1)}$
0	0	$a_{22}^{(2)}$	$a_{23}^{(2)}$	$b_2^{(2)}$
0	0	0	$a_{33}^{(3)}$	$b_3^{(3)}$

Können alle Matrizenmultiplikationen vorgenommen werden? Was passiert, wenn $\det(A) = 0$?
Diese Fragen lassen sich durch Betrachten des Pivotelements $a_{kk}^{(k)}$ beantworten. Der $(k+1)$-te Schritt kann nur durchgeführt werden, wenn $a_{kk}^{(k)} \neq 0$.
Falls $a_{kk}^{(k)} = 0$, so tausche man die Zeile k mit der Zeile $l > k$, für die $a_{lk} \neq 0$ gilt.
Sind alle $a_{lk} = 0$ für $l \geq k$, so ist das LGS singulär.

Pivotisierung

Zur Vermeidung schlechter Konditionierung tauscht man in jedem Schritt die Zeile l nach oben, für die $|a_{lk}^{(k)}| > |a_{kk}^{(k)}|$, $l \neq k$ gilt und benutz sie als Pivotzeile.

Da jede Zeile mit einem Faktor reskaliert werden kann, vergleicht man nicht die Beträge, sondern sucht

$$\ell = \operatorname{ind}\left\{ \max_{i=k,\dots,n-1} \frac{a_{ik}^{(k)}}{\sum_{j=k}^{n-1} |a_{ij}^{(k)}|} \right\} \qquad (*)$$

Genauere Untersuchung von

$$A\vec{x} = \vec{b} \rightarrow R\vec{x} = \vec{b}' = \vec{c}$$

<u>Definitionen</u>

$$r_{ik} = a_{ik}^{(k)} \quad , k = i, i+1, \dots, n-1$$

$$a_{ik}^{(0)} = a_{ik} \quad , i,k = 0, \dots, n-1$$

$$b_i^{0} = b_i \quad , i = 0, \dots, n-1$$

$$c_i = b_i^{(i)}$$

$\Rightarrow$

x_0	x_1	$\cdots$	x_{n-1}	1
r_{00}	r_{01}	$\cdots$	$r_{0,n-1}$	c_0
0	r_{11}	$\cdots$	$r_{1,n-1}$	c_1
0	0	$\cdots$		c_2
$\vdots$	$\vdots$			$\vdots$
0	0	$\cdots$	$r_{n-1,n-1}$	c_{n-1}

Die Matrix A hat n^2 Elemente. Es ist dabei sinnvoll die Elemente

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

in der unteren Dreiecksmatrix zu speichern, da

$$i \geq 1, \quad k \leq 1$$

$$r_{ik} = a_{ik}^{(i)} = a_{ik} - l_{i0}\, a_{0k}^{(0)} - l_{i1}\, a_{1k}^{(1)} - \dots - l_{i,i-1}\, a_{i-1,k}^{(i-1)}$$

$$= a_{ik} - l_{i0}\, r_{0k} - l_{i1}\, r_{1k} - \dots - l_{i,i-1}\, r_{i-1,k}$$

Daraus folgt:

$$a_{ik} = \sum_{j=0}^{i-1} l_{ij}\, r_{jk} \qquad k \geq i \geq 0$$

was nun auch für $i = 0$ gültig ist, da die Summe dann leer ist.

Für l_{ik} gilt mit $k \geq 1$ und $i > k$ im k-ten Schritt

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}} \left[a_{ik} - l_{i0}\, a_{0k}^{0} - \dots - l_{i,k-1}\, a_{k-1,k}^{(k-1)} \right]$$

$$= \frac{1}{a_{kk}^{(k)}} \left[a_{ik} - l_{i0}\, r_{0k} - \dots - l_{i,k-1}\, r_{k-1,k} \right]$$

was nach a_{ik} aufgelößt werden kann:

$$a_{ik} = \sum_{j=0}^{k} l_{ij}\, r_{jk} \qquad i > k \geq 0$$

Dies erinnert an eine Matrixmultiplikation. Definiere:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ l_{10} & 1 & & & \\ l_{20} & l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n-1,0} & \cdots & & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

dann ist offensichtlich $A = L \cdot R$. Damit ist die Gauß-Elimination äquivalent zu einer LR-Zerlegung der Matrix A.

Es bleibt die Werte c_i zu diskutieren. Für $i \geq 1$ gilt:

$$c_i = b_i^{(i)} = b_i - l_{i0} b_0 - l_{i1} b_1^{(1)} - \ldots - l_{i,i-1} b_{i-1}^{(i-1)}$$

$$= b_i - l_{i0} c_0 - l_{i1} c_1 - \ldots - l_{i,i-1} c_{i-1}$$

also $b_i = \sum_{j=0}^{i-1} l_{ij} + c_i \qquad i = 0, \ldots, n-1$, also $L\vec{c} = \vec{b}$

Die Gaußelimination kann also in die folgenden Schritte zerlegt werden:

i) $A = L \cdot R$ (LR-Zerlegung)

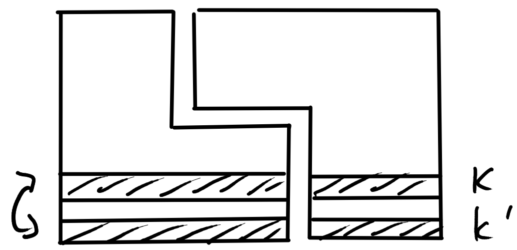
ii) $L\vec{c} = \vec{b}$ (Lösen der Vorwärtssubstitution)

iii) $R\vec{x} = \vec{c}$ (Lösen der Rückwärtssubstitution)

Bemerkung

- Die beiden Matrizen L und R können im ursprünglichen Speicher für A abgelegt werden. Schritt für Schritt werden die Elemente von A überschrieben.

- Die Pivotisierung geschieht im k-ten Schritt durch Auswahl der k'-ten Zeile nach Gleichung (*)



Die Vertauschung geschieht natürlich nicht explizit, sondern es wird ein Permutationsoperator P erzeugt, bzw. eine Indexliste $\sigma(k)$, die am Anfang $\sigma(k) = k \quad , k = 0, \dots, n-1$ liefert. Pro Vertauschung wird in dieser Liste vertauscht.

Algorithmus: LR-Zerlegung

Input A

for $i = 0, \dots, n-1$

- berechne l nach (*)
- speichere $l \leftrightarrow i$ in σ
- for $j = 1, \dots, n-1$
  - for $k = 0, \dots, i-1$
    - $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} \cdot a_{kj}$
- for $j = i+1, \dots, n-1$
  - for $k = 0, \dots, i-1$
    - $a_{ji} = a_{ji} - a_{jk} a_{ki}$
  - $a_{ji} = a_{ji} / a_{ii}$

output $(A =)\ LR$, σ

5.12 Cholesky-Zerlegung

Jede symmetrische, positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ kann eindeutig in die Form $A = LL^T$ gebracht werden. Durch Vorwärts- und Rückwärtssubstitution kann so das LGS, $A\vec{x} = \vec{b}$, effizient gelöst werden. Wird $A = LL^T$ in Komponenten geschrieben

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} l_{jk} \qquad i \geq j$$

folgt sofort:

$$l_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } j > i \\ \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2} & \text{für } j = i \\ \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) & \text{für } j < i \end{cases}$$

<u>Algorithmus</u> Cholesky-Zerlegung

```
for i = 0, ..., n-1
|    for j = 0, ..., n-1
|    |    s = a_ij
|    |    for k = 0, ..., j-2
|    |    |    s = s - a_ik a_jk
|    |    if i > j
|    |    |    a_ii = s/a_jj
|    |    else if s > 0
|    |    |    a_ii = √s
|    |    else
|    |    |    stop!
output A = L
```

<u>Bemerkungen</u>

- Die Choleskyzerlegung ist eine relativ einfache Methode um zu prüfen, ob die Matrix A positiv definit ist.
- Die Determinante von A kann nach der Zerlegung leicht berechnet werden:

$$\det(A) = \prod_{i=0}^{n-1} l_{ii}^2$$

- Die Choleskyzerlegung ist nur etwa halb so teuer wie die LR-Zerlegung nach Gauß wegen der Symmetrie von A.