

Numerisches Rechnen

Lineare Gleichungssysteme

M. Grepl

J. Berger & R. O'Connor

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2015/16

Vorlesungsinhalt

1. Fehleranalyse: Kondition, Rundungsfehler, Stabilität
 - a) $y = f(x)$, Eingabefehler $\Delta x \rightarrow$ Ausgabefehler Δy
 - b) Fehler aufgrund Gleitpunktdarstellung
 - c) Fehler (durch Algorithmus) \approx Fehler (durch Kondition)
2. **Lineare Gleichungssysteme, direkte Lösungsverfahren**
geg.: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$;
ges.: $x \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax = b$
3. **Lineare Ausgleichsrechnung**
geg.: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $m > n$;
ges.: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $x^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 3.6-3.9

- ▶ Cholesky-Zerlegung
- ▶ Stabilität der LR- und Cholesky-Zerlegung
- ▶ QR-Zerlegung

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 3.6-3.9

- ▶ Cholesky-Zerlegung
- ▶ Stabilität der LR- und Cholesky-Zerlegung
- ▶ QR-Zerlegung

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Was ist die Cholesky-Zerlegung und wann wird sie eingesetzt?
- ▶ Sind die LR- und Cholesky-Zerlegung stabil?
- ▶ Was ist die QR-Zerlegung und wie wird sie berechnet?

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

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

$$A x = b.$$

Vorgehensweise: Bestimme eine Faktorisierung (Zerlegung) von A , so dass das Gleichungssystem “leichter” lösbar ist.

Verfahren:

- ▶ **LR-Zerlegung:** $A = L R$, wobei L untere Dreiecksmatrix,
 R obere Dreiecksmatrix
- ▶ **Cholesky-Zerlegung:** $A = L D L^T$, wobei D Diagonalmatrix
- ▶ **QR-Zerlegung:** $A = Q R$, wobei Q orthogonale Matrix

Cholesky-Zerlegung

Definition 3.31.

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

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

und

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

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

Tritt bei vielen (physikalischen) Problemen auf:

- ▶ Netzwerke mit passiven Komponenten
- ▶ Diffusions-/Wärmeleitungsgleichung
- ▶ Normalgleichung (Lineare Ausgleichsrechnung)
- ▶ ...

Beispiel 3.32

1. $A = I$ (Identität) ist s.p.d. Die Symmetrie ist trivial und

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

falls $x \neq 0$.

Beispiel 3.32

1. $A = I$ (Identität) ist s.p.d. Die Symmetrie ist trivial und

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

falls $x \neq 0$.

2. Sei $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, und B habe vollen Rang. Dann ist $A := B^T B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s.p.d., denn:

$$A^T = (B^T B)^T = B^T (B^T)^T = B^T B = A.$$

Beispiel 3.32

1. $A = I$ (Identität) ist s.p.d. Die Symmetrie ist trivial und

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

falls $x \neq 0$.

2. Sei $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, und B habe vollen Rang. Dann ist $A := B^T B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s.p.d., denn:

$$A^T = (B^T B)^T = B^T (B^T)^T = B^T B = A.$$

Sei $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$. Dann gilt

$$x^T A x = x^T B^T B x = (Bx)^T (Bx) = \|Bx\|_2^2 \geq 0.$$

Es gilt $x^T A x = \|Bx\|_2^2 = 0$ nur falls $Bx = 0$ gilt. Da B vollen Rang hat, muß daher $x = 0$ sein.

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
2. A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
2. A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.
3. Jede Hauptuntermatrix von A ist s.p.d.

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
2. A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.
3. Jede Hauptuntermatrix von A ist s.p.d.
4. Die Determinante von A ist positiv (und damit die Determinante aller Hauptuntermatrizen von A)

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
2. A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.
3. Jede Hauptuntermatrix von A ist s.p.d.
4. Die Determinante von A ist positiv (und damit die Determinante aller Hauptuntermatrizen von A)
5. A hat nur strikt positive Diagonaleinträge und der betragsgrößte Eintrag von A liegt auf der Diagonalen.

Satz 3.33

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

1. A ist invertierbar, und A^{-1} ist s.p.d.
2. A hat nur strikt positive (insbesondere reelle) Eigenwerte.
3. Jede Hauptuntermatrix von A ist s.p.d.
4. Die Determinante von A ist positiv (und damit die Determinante aller Hauptuntermatrizen von A)
5. A hat nur strikt positive Diagonaleinträge und der betragsgrößte Eintrag von A liegt auf der Diagonalen.
6. Bei Gauß-Elimination ohne Pivotisierung sind alle Pivotelemente strikt positiv.

Cholesky-Zerlegung

Satz 3.34

Jede s.p.d. Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ besitzt eine eindeutige Zerlegung

$$A = LDL^T,$$

wobei L eine normierte untere Dreiecksmatrix und D eine Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen

$$d_{i,i} > 0, i = 1, \dots, n,$$

ist. Umgekehrt ist jede Matrix der Form LDL^T , wobei D eine Diagonalmatrix ist, die $d_{i,i} > 0$ erfüllt, und L eine normierte untere Dreiecksmatrix ist, symmetrisch positiv definit.

Cholesky-Zerlegung

Satz 3.34

Jede s.p.d. Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ besitzt eine eindeutige Zerlegung

$$A = LDL^T,$$

wobei L eine normierte untere Dreiecksmatrix und D eine Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen

$$d_{i,i} > 0, i = 1, \dots, n,$$

ist. Umgekehrt ist jede Matrix der Form LDL^T , wobei D eine Diagonalmatrix ist, die $d_{i,i} > 0$ erfüllt, und L eine normierte untere Dreiecksmatrix ist, symmetrisch positiv definit.

Beachte: Aufgrund von Satz 3.33 (5) ist bei s.p.d. Matrizen Gauß-Elimination *ohne Pivotisierung* durchführbar.

\Rightarrow "Symmetrische" LR-Zerlegung **N3.9**

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

Beispiel: Für $n = 3$ ergibt sich

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix}.$$

und damit

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

Beispiel: Für $n = 3$ ergibt sich

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix}.$$

und damit

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

Beispiel: Für $n = 3$ ergibt sich

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \ell_{2,1} & 1 & 0 \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & d_{3,3} \end{pmatrix}.$$

und damit

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

$$=$$

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

$$d_{1,1} = a_{1,1}$$

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

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

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

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

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

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

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

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

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

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

2. Spalte:

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

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

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

2. Spalte:

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

1. Spalte:

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

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

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

2. Spalte:

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

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

3. Spalte:

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

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

Beispiel 3.35

Bestimme die Cholesky-Zerlegung von

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

3. Spalte:

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

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

Damit ergibt sich schließlich

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

Programmmentwurf Cholesky-Verfahren

Für $k = 1, 2, \dots, n$:

$$\text{diag} \leftarrow a_{k,k} - \sum_{j < k} a_{k,j}^2 a_{j,j};$$

falls $\text{diag} < 10^{-5} a_{k,k}$ Abbruch

$$a_{k,k} \leftarrow \text{diag},$$

für $i = k + 1, \dots, n$

$$a_{i,k} \leftarrow (a_{i,k} - \sum_{j < k} a_{i,j} a_{j,j} a_{k,j}) / a_{k,k};$$

Rechenaufwand 3.36.

Man kann das Cholesky-Verfahren mit ca. $\frac{1}{6}n^3$ Multiplikationen und etwa ebenso vielen Additionen realisieren. Der Rechenaufwand beträgt also etwa die Hälfte des Aufwands der LR-Zerlegung.

Bemerkung 3.37

- ▶ LDL^T entspricht der LR-Zerlegung für $R = DL^T$. Bei s.p.d. Matrizen ist Pivotisierung weder nötig noch sinnvoll. Beachte, dass Pivotisierung die Symmetrie der Matrix zerstören würde.

Bemerkung 3.37

- ▶ LDL^T entspricht der LR-Zerlegung für $R = DL^T$. Bei s.p.d. Matrizen ist Pivotisierung weder nötig noch sinnvoll. Beachte, dass Pivotisierung die Symmetrie der Matrix zerstören würde.
- ▶ Die Lösung des Problems $Ax = b$ reduziert sich auf
$$L \underbrace{DL^T x}_{=y} = b, \text{ d.h. } Ly = b \text{ und } L^T x = D^{-1}y.$$

Bemerkung 3.37

- ▶ LDL^T entspricht der LR-Zerlegung für $R = DL^T$. Bei s.p.d. Matrizen ist Pivotisierung weder nötig noch sinnvoll. Beachte, dass Pivotisierung die Symmetrie der Matrix zerstören würde.
- ▶ Die Lösung des Problems $Ax = b$ reduziert sich auf
$$\underbrace{L DL^T x}_{=y} = b, \text{ d.h. } Ly = b \text{ und } L^T x = D^{-1}y.$$
- ▶ In obiger Version enthält das Verfahren die Abfrage

$$\text{diag} < 10^{-5} a_{k,k}$$

Falls dies gilt, kann nicht mehr gewährleistet werden, dass das entsprechende Pivotelement strikt positiv ist. In diesem Sinne *testet* das Verfahren Positiv-Definitheit.

LR-Zerlegung ohne Pivotisierung

Satz

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Es wird eine LR-Zerlegung ohne Pivotisierung auf einem Rechner mit Maschinengenauigkeit eps berechnet. Wenn die LR-Zerlegung

$$A = L R$$

existiert, dann erfüllen die berechneten Matrizen \tilde{L}, \tilde{R}

$$\tilde{L} \tilde{R} = A + \Delta A, \quad \frac{\|\Delta A\|}{\|L\| \|R\|} = \mathcal{O}(\text{eps})$$

für ein $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- ▶ LR-Zerlegung ist stabil, wenn $\|L\| \|R\| = \mathcal{O}(\|A\|)$
- ▶ LR-Zerlegung kann instabil sein, wenn $\|L\| \|R\| \neq \mathcal{O}(\|A\|)$

N3.10

LR-Zerlegung mit Pivotisierung

Satz

Sei $P A = L R$ die LR-Zerlegung mit Pivotisierung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dann erfüllen die berechneten Matrizen \tilde{L}, \tilde{R}

$$\tilde{L} \tilde{R} = P A + \Delta A, \quad \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} = \mathcal{O}(\rho \text{eps})$$

für ein $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und

$$\rho = \frac{\max_{i,j} |r_{i,j}|}{\max_{i,j} |a_{i,j}|} \quad (\text{Wachstumsfaktor}).$$

Annahme: P eindeutig, sonst $P \neq \tilde{P}$.

- ▶ LR-Zerlegung mit Pivotisierung ist stabil, wenn $\rho \approx 1$
- ▶ Stabilität “in der Praxis” vs. theoretische Instabilität

N3.10

N3.11

Cholesky-Zerlegung

Satz

Sei $A = L D L^T$ die Cholesky-Zerlegung einer s.p.d. $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, die auf einem Rechner mit Maschinengenauigkeit eps berechnet wird. Dann erfüllen die berechneten Matrizen \tilde{L}, \tilde{D}

$$\tilde{L} \tilde{D} \tilde{L}^T = A + \Delta A, \quad \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} = \mathcal{O}(c_n \text{eps})$$

für eine “kleine” Zahl c_n , die nur von der Dimension von A abhängt.

- ▶ “Worst-case Instabilität” kann bei Cholesky-Zerlegung nicht auftreten
- ▶ Die Lösung eines s.p.d. Systems über das Cholesky-Verfahren ist stabil.

Beispiel 3.40.

Wir betrachten die Lösung von $Ax = b$, wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine sogenannte *Hilbertmatrix* ist

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix},$$

Sei $b = (\frac{1}{n}, \frac{1}{n+1}, \dots, \frac{1}{2n-1})^T$, d.h. $x = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$.

Beispiel 3.40.

Wir betrachten die Lösung von $Ax = b$, wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine sogenannte *Hilbertmatrix* ist

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix},$$

Sei $b = (\frac{1}{n}, \frac{1}{n+1}, \dots, \frac{1}{2n-1})^T$, d.h. $x = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$.

Für $n = 12$ erhält man mit dem Cholesky-Verfahren auf einer Maschine mit $\text{eps} \approx 10^{-16}$ einen Fehler im berechneten Resultat von

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \approx 1.6 \times 10^{-2}.$$

Erklärung: Konditionszahl $\kappa_{\infty}(A) = \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty} \approx 10^{16}$.

Matrix-Zerlegung

Aufgabe

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

$$A x = b.$$

Vorgehensweise: Bestimme eine Faktorisierung (Zerlegung) von A , so dass das Gleichungssystem “leichter” lösbar ist.

Verfahren:

- ▶ **LR-Zerlegung:** $A = L R$, wobei L untere Dreiecksmatrix,
 R obere Dreiecksmatrix
- ▶ **Cholesky-Zerlegung:** $A = L D L^T$, wobei D Diagonalmatrix
- ▶ **QR-Zerlegung:** $A = Q R$, wobei Q orthogonale Matrix

Warum QR?

Orthogonale Matrizen

Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ heißt orthogonal, falls

$$Q^T Q = I.$$

Das bedeutet,

- ▶ die Spalten von Q bilden eine Orthonormalbasis des \mathbb{R}^m ;
- ▶ die Inverse von Q ist einfach zu bestimmen

$$Q^{-1} = Q^T.$$

Warum QR?

QR-Zerlegung

Gegeben sei eine rechteckige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, bestimme eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, so dass

$$A = Q R.$$

- Lösung eines linear Gleichungssystems ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär)

$$A x = b$$

Warum QR?

QR-Zerlegung

Gegeben sei eine rechteckige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, bestimme eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, so dass

$$A = Q R.$$

- Lösung eines linear Gleichungssystems ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär)

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

Warum QR?

QR-Zerlegung

Gegeben sei eine rechteckige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, bestimme eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, so dass

$$A = Q R.$$

- Lösung eines linear Gleichungssystems ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär)

$$A x = b \Leftrightarrow Q R x = b \Leftrightarrow R x = \underbrace{Q^T b}_{\text{Matrix-Vektor-Produkt}}$$

Rückwärtseinsetzen

Warum QR?

QR-Zerlegung

Gegeben sei eine rechteckige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, bestimme eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$, so dass

$$A = Q R.$$

- Lösung eines linear Gleichungssystems ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär)

$$A x = b \Leftrightarrow Q R x = b \Leftrightarrow R x = \underbrace{Q^T b}_{\text{Matrix-Vektor-Produkt}}$$

Rückwärtseinsetzen

- QR-Zerl. auch für rechteckige Matrizen durchführbar

N3.12

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.
- (iii) $\kappa_2(Q) = 1$.

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.
- (iii) $\kappa_2(Q) = 1$.
- (iv) Für beliebiges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ bzw. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \in \mathbb{N}$ beliebig, gilt $\|A\|_2 = \|QA\|_2 = \|AQ\|_2$.

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.
- (iii) $\kappa_2(Q) = 1$.
- (iv) Für beliebiges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ bzw. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \in \mathbb{N}$ beliebig, gilt $\|A\|_2 = \|QA\|_2 = \|AQ\|_2$.
- (v) Es gilt (für A wie vorhin) $\kappa_2(A) = \kappa_2(QA) = \kappa_2(AQ)$.

Satz 3.41

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann gilt:

- (i) Q^T ist orthogonal.
- (ii) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.
- (iii) $\kappa_2(Q) = 1$.
- (iv) Für beliebiges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ bzw. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \in \mathbb{N}$ beliebig, gilt $\|A\|_2 = \|QA\|_2 = \|AQ\|_2$.
- (v) Es gilt (für A wie vorhin) $\kappa_2(A) = \kappa_2(QA) = \kappa_2(AQ)$.
- (vi) Sei $\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal, dann ist $Q\tilde{Q}$ orthogonal.

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

mit

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$$

einer unteren Dreiecksmatrix.

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

mit

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$$

einer unteren Dreiecksmatrix.

QR-Zerlegung

Wir haben

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

mit

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$$

einer unteren Dreiecksmatrix.

QR-Zerlegung

Wir haben

$$Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R$$

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

mit

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$$

einer unteren Dreiecksmatrix.

QR-Zerlegung

Wir haben

$$Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R$$

und damit

$$A = Q R$$

Vergleich LR- und QR-Zerlegung

LR-Zerlegung

Wir haben

$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = R$$

und damit

$$A = L R$$

mit

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$$

einer unteren Dreiecksmatrix.

QR-Zerlegung

Wir haben

$$Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R$$

und damit

$$A = Q R$$

mit

$$\begin{aligned} Q &= Q_1^{-1} Q_2^{-1} \dots Q_{n-1}^{-1} \\ &= Q_1^T Q_2^T \dots Q_{n-1}^T \end{aligned}$$

einer orthogonalen Matrix.

... im Detail N3.13

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

N3.14

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

N3.14

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

- ▶ **Givens-Rotation**

N3.15

Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von A

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

N3.14

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

- ▶ **Givens-Rotation**

N3.15

Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von A

- ▶ **Householder-Transformation**

N3.15

Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von A

Givens-Rotationen

N3.16

Givens-Rotationen

N3.16

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

Givens-Rotationen

N3.16

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

- Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$r = \pm \sqrt{a^2 + b^2}, \quad c := \frac{a}{r}, \quad s := \frac{b}{r}$$

Givens-Rotationen

N3.16

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

- Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$r = \pm \sqrt{a^2 + b^2}, \quad c := \frac{a}{r}, \quad s := \frac{b}{r}$$

- Beachte:** Drehung verändert nicht die Euklidische Länge eines Vektors, d.h.

$$\|(r, 0)^T\|_2 = |r| = \sqrt{a^2 + b^2} = \|(a, b)^T\|_2.$$

Givens-Rotationen

N3.16

Grundaufgabe

Gegeben sei $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. Finde $c, s \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

- ▶ Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$r = \pm \sqrt{a^2 + b^2}, \quad c := \frac{a}{r}, \quad s := \frac{b}{r}$$

- ▶ **Beachte:** Drehung verändert nicht die Euklidische Länge eines Vektors, d.h.

$$\|(r, 0)^T\|_2 = |r| = \sqrt{a^2 + b^2} = \|(a, b)^T\|_2.$$

- ▶ Die obige (Rotations-)Matrix ist orthogonal.

Givens-Rotations-Matrix

N3.17

Givens-Rotations-Matrix

N3.17

Die orthogonale Matrix $G_{i,k} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ist gegeben durch

$$G_{i,k} = \begin{matrix} & & i \downarrow & & & & k \downarrow & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ i \rightarrow & \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & 0 & \cdots & 0 & s \\ & & & 0 & 1 & & & 0 \\ & & & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & & & 1 & 0 \\ k \rightarrow & & & -s & 0 & \cdots & 0 & c \\ & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Givens-Rotations-Matrix

... und damit ergibt sich

$$\begin{pmatrix}
 1 & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & \\
 & & & \begin{matrix} \textcolor{red}{c} & 0 & \dots & 0 & \textcolor{red}{s} \\ 0 & 1 & & & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & 1 & 0 \\ \textcolor{red}{-s} & 0 & \dots & 0 & \textcolor{red}{c} \end{matrix} & & & \\
 & & & & 1 & & & \\
 & & & & & \ddots & & \\
 & & & & & & 1 &
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 x_1 \\
 \vdots \\
 x_{i-1} \\
 \textcolor{blue}{x}_i \\
 x_{i+1} \\
 \vdots \\
 x_{k-1} \\
 \textcolor{blue}{x}_k \\
 x_{k+1} \\
 \vdots \\
 x_m
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 x_1 \\
 \vdots \\
 x_{i-1} \\
 \textcolor{red}{r} \\
 x_{i+1} \\
 \vdots \\
 x_{k-1} \\
 0 \\
 x_{k+1} \\
 \vdots \\
 x_m
 \end{pmatrix}$$

$$\text{für } \textcolor{red}{r} = \pm \sqrt{\textcolor{blue}{x}_i^2 + \textcolor{blue}{x}_k^2}, \quad \textcolor{red}{c} = \frac{\textcolor{blue}{x}_i}{\textcolor{red}{r}}, \quad \textcolor{red}{s} = \frac{\textcolor{blue}{x}_k}{\textcolor{red}{r}}.$$

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -\mathbf{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

mit

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -\mathbf{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad G_{1,2} \rightsquigarrow$$

mit

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -\mathbf{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,2}}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -\mathbf{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,2}} \quad \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -\mathbf{3} \\ 1 \end{pmatrix} \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,2}} \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ \mathbf{1} \end{pmatrix} \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,3}}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ und}$$

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,2}} \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,3}}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ und } G_{1,3} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{26}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{5}{\sqrt{26}} \end{pmatrix}.$$

N3.18

Beispiel 3.43

$$\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} \sqrt{26} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit

$$G_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} & 0 \\ \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ und } G_{1,3} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{26}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{26}} & 0 & \frac{5}{\sqrt{26}} \end{pmatrix}.$$

N3.18

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \underset{\rightsquigarrow}{G_{1,2}}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\underbrace{G_{1,2}}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim G_{1,2}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim G_{1,3}}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,2}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,3}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $\widetilde{G}_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,2}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,3}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \circledast & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{2,3}}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $\widetilde{G}_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $\widetilde{G}_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\widetilde{G}_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\widetilde{G}_{1,4}}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $\widetilde{G}_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \end{pmatrix}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & * \\ \mathbf{0} & (*) & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & \circledast & \circledast \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & \circledast \end{pmatrix}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & (*) & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{3,4}}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & \circledast \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} \circledast & \circledast & \circledast \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & \circledast & \circledast \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & \circledast & \circledast \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & \circledast \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{3,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & \circledast \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.

Beispiel 3.45

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,2}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,3}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,3}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & (*) \\ * & * & * \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} (*) & (*) & (*) \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & (*) & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & (*) & (*) \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & (*) \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{3,4}} \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & (*) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ Mit \circledast werden die Einträge angedeutet, die bei der Anwendung von $G_{i,k}$ neu berechnet werden müssen.
- ▶ Die Reihenfolge $G_{1,2}, G_{1,3}, G_{1,4}, G_{2,3}, G_{2,4}, G_{3,4}$ wäre auch möglich.

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

wobei

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim} G_{1,4}$$

wobei

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim} G_{1,4}$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix},$$

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim} G_{1,4} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix},$$

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim} G_{1,4} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\sim} G_{2,4}$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ und}$$

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}}$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ und } G_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}.$$

Beispiel 3.46.

$$\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{1,4}} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{G_{2,4}} \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei

$$G_{1,4} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ und } G_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}.$$

QR-Zerlegung über Givens-Rotation

Die obige Konstruktion mit Givens-Rotationen zeigt, dass für *jede* Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine QR-Zerlegung *existiert*.

Satz 3.47.

Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$A = Q R,$$

wobei R im Sinne von [N3.12](#) zu verstehen ist.

Merke: Bei der Implementierung der QR-Zerlegung über Givens-Rotation werden die Matrizen $G_{i,k}$ *nie explizit berechnet*.

Givens-Rotation: Zusammenfassung

QR-Zerlegung über Givens-Rotationen:

- ▶ Das Verfahren ist *sehr stabil*. Pivotisierung ist *nicht* erforderlich.
- ▶ Durch Berücksichtigung von schon vorhandenen 0-Einträgen bei dünnbesetzten Matrizen läßt sich das Verfahren flexibel an die Struktur einer Matrix anpassen.
- ▶ Der Aufwand für die QR-Zerlegung einer vollbesetzten $m \times n$ -Matrix über Givens-Rotationen beträgt etwa $\frac{4}{3}n^3$ Operationen, falls $m \approx n$, und etwa $2mn^2$ Operationen, falls $m \gg n$. Zu beachten ist aber, dass für dünnbesetzte Matrizen der Aufwand wesentlich niedriger ist.
- ▶ Bei der sogenannten *schnellen* Givens-Rotationen wird der Aufwand etwa halbiert ($\sim \frac{2}{3}n^3$, falls $n \approx m$; $\sim mn^2$, falls $m \gg n$).

Berechnung der QR-Zerlegung

Wir haben mehrere Möglichkeiten:

- ▶ **Gram-Schmidt Orthogonalisierung**

Idee: Schrittweise Orthogonalisierung der Spalten von A

- ▶ **Givens-Rotation**

Idee: Schrittweise ebene Drehungen der Spalten von A

- ▶ **Householder-Transformation**

Idee: Schrittweise Spiegelungen der Spalten von A

Householder-Transformationen

N3.19

Householder-Transformationen

N3.19

Definition

Für $v = (v_1, \dots, v_n)^T \in \mathbb{R}^n$, $v \neq 0$ ist die Householder-Transformation definiert als

$$Q_v = I - 2 \frac{v v^T}{v^T v},$$

wobei die Dyade, $v v^T$, gegeben ist durch

$$v v^T = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} (v_1, \dots, v_n) = \begin{pmatrix} v_1 v_1 & \dots & v_1 v_n \\ \vdots & & \vdots \\ v_n v_1 & \dots & v_n v_n \end{pmatrix}.$$

- ▶ Die Householder Transformation Q_v ist orthogonal, d.h.

$$Q_v^{-1} = Q_v^T$$

- ▶ Geometrische Interpretation: Spiegelung

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

► $Q_v = Q_v^T$

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- ▶ $Q_v = Q_v^T$
- ▶ Q_v^2

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- ▶ $Q_v = Q_v^T$

- ▶ $Q_v^2 = I$

Zweimalige Spiegelung ergibt den ursprünglichen Punkt.

- ▶ $Q_{\alpha v} = \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- ▶ $Q_v = Q_v^T$

- ▶ $Q_v^2 = I$

Zweimalige Spiegelung ergibt den ursprünglichen Punkt.

- ▶ $Q_{\alpha v} = Q_v, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$

Skalierung des Normalenvektors ändert nicht die Spiegelebene.

- ▶ $Q_v y = y \iff$

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

- ▶ $Q_v = Q_v^T$

- ▶ $Q_v^2 = I$

Zweimalige Spiegelung ergibt den ursprünglichen Punkt.

- ▶ $Q_{\alpha v} = Q_v, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$

Skalierung des Normalenvektors ändert nicht die Spiegelebene.

- ▶ $Q_v y = y \iff y^T v = 0$

Ursprünglicher und gespiegelter Punkt sind nur identisch, wenn der Punkt in der Spiegelebene liegt.

- ▶ $Q_v v$

Householder-Transformationen

Eigenschaften 3.50.

▶ $Q_v = Q_v^T$

▶ $Q_v^2 = I$

Zweimalige Spiegelung ergibt den ursprünglichen Punkt.

▶ $Q_{\alpha v} = Q_v, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$

Skalierung des Normalenvektors ändert nicht die Spiegelebene.

▶ $Q_v y = y \iff y^T v = 0$

Ursprünglicher und gespiegelter Punkt sind nur identisch, wenn der Punkt in der Spiegelebene liegt.

▶ $Q_v v = -v.$

Spiegelung des Normalenvektors vertauscht das Vorzeichen.

Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Zu $y \in \mathbb{R}^n$, $y \notin \text{span}(e^1)$, finde $v \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$$

gilt.

N3.20

D:SC

Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Zu $y \in \mathbb{R}^n$, $y \notin \text{span}(e^1)$, finde $v \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$$

gilt.

N3.20

D:SC

- Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$v = y \pm \|y\|_2 e^1$$

Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Zu $y \in \mathbb{R}^n$, $y \notin \text{span}(e^1)$, finde $v \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$$

gilt.

N3.20

D:SC

- ▶ Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$v = y \pm \|y\|_2 e^1$$

- ▶ Um Auslöschung zu vermeiden, wählt man

$$v = y + \text{sign}(y_1) \|y\|_2 e^1, \text{ mit } \text{sign}(0) := 1.$$

Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Zu $y \in \mathbb{R}^n$, $y \notin \text{span}(e^1)$, finde $v \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$$

gilt.

N3.20

D:SC

- ▶ Die Lösung der Grundaufgabe ist:

$$v = y \pm \|y\|_2 e^1$$

- ▶ Um Auslöschung zu vermeiden, wählt man

$$v = y + \text{sign}(y_1) \|y\|_2 e^1, \text{ mit } \text{sign}(0) := 1.$$

Zusammenfassend

$$\begin{aligned}\alpha &= \text{sign}(y_1) \|y\|_2 \\ v &= y + \alpha e^1 \\ Q_v y &= -\alpha e^1\end{aligned}$$

Beispiel 3.51

Zu $y = (2, 2, 1)^T$ wird $v \in \mathbb{R}^3$ gesucht, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1 = \pm 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

gilt.

Beispiel 3.51

Zu $y = (2, 2, 1)^T$ wird $v \in \mathbb{R}^3$ gesucht, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1 = \pm 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

gilt.

- Wir erhalten $\alpha = 3$, $v = y + \alpha e^1 = (5, 2, 1)^T$, und damit $Q_v y = (-3, 0, 0)^T$.

Beispiel 3.51

Zu $y = (2, 2, 1)^T$ wird $v \in \mathbb{R}^3$ gesucht, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1 = \pm 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

gilt.

- Wir erhalten $\alpha = 3$, $v = y + \alpha e^1 = (5, 2, 1)^T$, und damit $Q_v y = (-3, 0, 0)^T$.
- **Beachte:** explizite Form von Q_v wird zur Berechnung von $Q_v y$ nicht benötigt

$$Q_v = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \frac{\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} (5, 2, 1)}{(5, 2, 1) \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}} = \frac{1}{15} \begin{pmatrix} -10 & -10 & -5 \\ -10 & 11 & -2 \\ -5 & -2 & 14 \end{pmatrix}$$

Reduktion auf obere Dreiecksform

N3.21

- Sei a^1 die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.

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

*	*	*
*	*	*
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
*	*	*

Reduktion auf obere Dreiecksform

N3.21

- ▶ Sei \mathbf{a}^1 die erste Spalte der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- ▶ Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an, d.h., man setzt

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(\mathbf{a}_{1,1}) \|\mathbf{a}^1\|_2 \mathbf{e}^1, \quad \mathbf{Q}_1 := \mathbf{Q}_{\mathbf{v}^1},$$

und berechnet $\mathbf{Q}_1 \mathbf{A}$.

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

*	*	*
*	*	*
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
*	*	*

Reduktion auf obere Dreiecksform

N3.21

- ▶ Sei \mathbf{a}^1 die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- ▶ Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an, d.h., man setzt

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(\mathbf{a}_{1,1}) \|\mathbf{a}^1\|_2 \mathbf{e}^1, \quad Q_1 := Q_{\mathbf{v}^1},$$

und berechnet $Q_1 A$.

$$\begin{array}{c}
 A = A^{(1)} \\
 \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{ccccc} * & * & \dots & \dots & * \\ * & * & \dots & \dots & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ * & * & \dots & \dots & * \end{array} \\ \hline \end{array}
 \end{array}
 \rightarrow
 \begin{array}{c}
 Q_1 A = A^{(2)} \\
 \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{ccccc} * & * & \dots & \dots & * \\ 0 & \begin{array}{|c|} \hline * & \dots & \dots & * \\ \vdots & \tilde{A}^{(2)} & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \dots & \dots & * \end{array} & \end{array} \\ \hline \end{array}
 \end{array}$$

Reduktion auf obere Dreiecksform

N3.21

- ▶ Sei \mathbf{a}^1 die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- ▶ Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an, d.h., man setzt

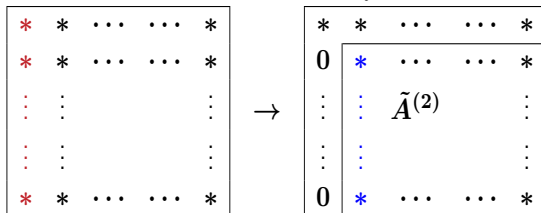
$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(\mathbf{a}_{1,1}) \|\mathbf{a}^1\|_2 \mathbf{e}^1, \quad Q_1 := Q_{\mathbf{v}^1},$$

und berechnet $Q_1 A$.

- ▶ Sei $\tilde{\mathbf{a}}^{(2),1}$ die erste Spalte ...

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

$$Q_1 A = A^{(2)}$$



Reduktion auf obere Dreiecksform

N3.21

- Sei \mathbf{a}^1 die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an, d.h., man setzt

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(\mathbf{a}_{1,1}) \|\mathbf{a}^1\|_2 \mathbf{e}^1, \quad Q_1 := Q_{\mathbf{v}^1},$$

und berechnet $Q_1 A$.

- Sei $\tilde{\mathbf{a}}^{(2),1}$ die erste Spalte ...

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

*	*	*
*	*	*
⋮	⋮			⋮
⋮	⋮			⋮
*	*	*

→

$$Q_1 A = A^{(2)}$$

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

→

$$Q_2 Q_1 A = A^{(3)}$$

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

Reduktion auf obere Dreiecksform

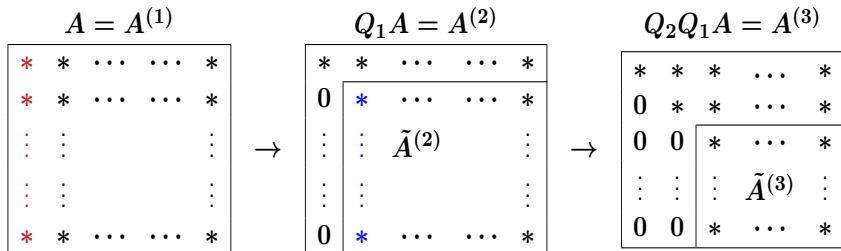
N3.21

- Sei \mathbf{a}^1 die erste Spalte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$.
- Man wendet die Grundaufgabe mit $\mathbf{y} = \mathbf{a}^1$ an, d.h., man setzt

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{a}^1 + \text{sign}(\mathbf{a}_{1,1}) \|\mathbf{a}^1\|_2 \mathbf{e}^1, \quad Q_1 := Q_{\mathbf{v}^1},$$

und berechnet $Q_1 A$.

- Sei $\tilde{\mathbf{a}}^{(2),1}$ die erste Spalte ...



$$Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R, \text{ bzw. } A = Q_1^T Q_2^T \dots Q_{n-1}^T R = QR$$

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

1. Grundaufgabe mit $y = a^1$ (erste Spalte von A) ergibt

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

1. Grundaufgabe mit $y = a^1$ (erste Spalte von A) ergibt

$$v^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} + 3e^1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad Q_1 = Q_{v^1}.$$

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

1. Grundaufgabe mit $y = a^1$ (erste Spalte von A) ergibt

$$v^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} + 3e^1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad Q_1 = Q_{v^1}.$$

2. Für die zwei Spalten der Matrix $Q_1 A$ ergibt sich

Beispiel 3.52.

Bestimmen Sie die QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformation.

1. Grundaufgabe mit $y = a^1$ (erste Spalte von A) ergibt

$$v^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} + 3e^1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad Q_1 = Q_{v^1}.$$

2. Für die zwei Spalten der Matrix $Q_1 A$ ergibt sich

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{siehe Beispiel 3.51})$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 =$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

3. Daraus folgt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

3. Daraus folgt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

4. Grundaufgabe mit y gleich erster Spalte von $A^{(2)}$, d.h.
 $y = (-\frac{2}{3}, -\frac{2}{3})^T$, ergibt

Beispiel 3.52.

$$Q_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{(v^1)^T v^1} v^1 (v^1)^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} v^1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

3. Daraus folgt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

4. Grundaufgabe mit y gleich erster Spalte von $A^{(2)}$, d.h.
 $y = (-\frac{2}{3}, -\frac{2}{3})^T$, ergibt

$$v^2 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} - \frac{2}{3} \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3}(1 + \sqrt{2}) \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q}_2 = \tilde{Q}_{v^2}.$$

Beispiel 3.52.

5. Damit ergibt sich

$$\tilde{Q}_2 \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix} =$$

Beispiel 3.52.

5. Damit ergibt sich

$$\tilde{Q}_2 \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beispiel 3.52.

5. Damit ergibt sich

$$\tilde{Q}_2 \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

6. Insgesamt erhält man

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{Q}_2 \\ 0 & \end{pmatrix}}_{Q_2} Q_1 A = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Householder-Transformation: Zusammenfassung

- ▶ Die QR-Zerlegung über Householder-Transformationen ist ebenfalls *sehr stabil*.
- ▶ Gesonderte Pivotisierung ist *nicht erforderlich*.
- ▶ Der Aufwand für die QR-Zerlegung einer vollbesetzten $m \times n$ -Matrix über Householder-Transformationen ist etwa $\frac{2}{3}n^3$ Operationen, falls $m \approx n$, und etwa mn^2 Operationen, falls $m \gg n$.

Wichtige Anwendungen der **QR**-Zerlegung:

Ausgleichsrechnung (siehe nächstes Kapitel), Berechnung von Eigenwerten

Zusammenfassung lineare Gleichungssysteme

- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$
 - ▶ Nur für symmetrisch positiv definite Matrizen (“symmetrische” LR-Zerlegung)
 - ▶ Berechnung durch elementweise Auswertung von $A = LDL^T$

Zusammenfassung lineare Gleichungssysteme

- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$
 - ▶ Nur für symmetrisch positiv definite Matrizen (“symmetrische” LR-Zerlegung)
 - ▶ Berechnung durch elementweise Auswertung von $A = LDL^T$
- ▶ QR-Zerlegung: $A = QR$
 - ▶ Existiert auch für rechteckige Matrizen
 - ▶ Berechnung über Givens-Rotation, Housholder-Transformation (oder Gram-Schmidt)

Zusammenfassung lineare Gleichungssysteme

- ▶ Cholesky-Zerlegung: $A = LDL^T$
 - ▶ Nur für symmetrisch positiv definite Matrizen (“symmetrische” LR-Zerlegung)
 - ▶ Berechnung durch elementweise Auswertung von $A = LDL^T$
- ▶ QR-Zerlegung: $A = QR$
 - ▶ Existiert auch für rechteckige Matrizen
 - ▶ Berechnung über Givens-Rotation, Housholder-Transformation (oder Gram-Schmidt)
- ▶ Übersicht Lösungsverfahren **N3.22**