Technische Universität München
Institut für Informatik
Prof. Dr. Thomas Huckle
Dipl.-Tech. Math. Stefanie Schraufstetter
Michael Lieb, M. Sc.

SS 2010

Numerisches Programmieren, Übungen

3. Übungsblatt: LR-Zerlegung, Pivotsuche, QR-Zerlegung

1) LR-Zerlegung

In dieser Aufgabe wollen wir den Algorithmus der LR-Zerlegung aus der Vorlesung an Beispielen nachvollziehen. Die LR-Zerlegung zur Lösung eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ besteht aus drei Teilen:

1. Zerlegung der Matrix A**:** $A = L \cdot R$

```
for i=1:n
    % Assembliere L
    for k=1:i-1
        L[i,k] := A[i,k];
        for j=1:k-1
            L[i,k] := L[i,k]-L[i,j]*R[j,k];
        end
        L[i,k] := L[i,k]/R[k,k];
    end
    % Assembliere R
    for k=i:n
        R[i,k] := A[i,k];
        for j=1:i-1
            R[i,k] := R[i,k]-L[i,j]*R[j,k];
        end
    end
end
```

2. Vorwärtssubstitution: $Ly = b$

```
for i=1:n
    y[i] := b[i];
    for j=1:i-1
        y[i] := y[i]-L[i,j]*y[j];
    end
end
```

3. Rückwärtssubstitution: $Rx = y$

```
for i=n:-1:1
    x[i] := y[i];
    for j=i+1:n
        x[i] := x[i]-R[i,j]*x[j];
    end
    x[i] := x[i]/R[i,i];
end
```

i) Veranschaulichen Sie sich den Zerlegungs-Algorithmus (1.)! In welcher Reihenfolge werden die Einträge der Matrizen L und R belegt? Wie würde der direkte Gauß-Eliminationsprozess arbeiten?

ii) Berechnen Sie die Zerlegung (1.) der Matrix $A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$.

iii) Führen Sie nun die Vorwärts- und Rückwärtssubstitution (2.) und (3.) durch, indem Sie den Vektor $b = (2, 1, 2)^T$ verwenden.

2) Gauß-Elimination und Pivotsuche

Lösen Sie das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} -10^{-3} & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} x \;=\; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit der Gauß-Elimination:

i) Ohne Spalten-Pivotsuche (keine Zeilenvertauschungen) in exakter Arithmetik (d.h. mit Brüchen rechnen)!

ii) Ohne Spalten-Pivotsuche (keine Zeilenvertauschungen) mit Rundungsfehlern: jedes Zwischenergebnis auf 3 Dezimalstellen runden (Gleitpunktarithmetik mit $B = 10$, $t = 3$ und korrekter Rundung: $0.01236 = 123.6 \cdot 10^{-4}$ ergibt 0.0124).

iii) Mit Spalten-Pivotsuche und mit Rundungsfehlern wie in ii).

3) QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen

Die QR-Zerlegung ist ein verwandtes Verfahren der LR-Zerlegung, das hohe Stabilität aufweist. Wieder wird die Matrix A in ein Produkt aus zwei Matrizen zerlegt:

$$A = Q \cdot R.$$

R ist wieder eine rechte obere Dreiecksmatrix, wohingegen Q nun eine orthogonale Matrix ist. Es gilt also:

$$Q^T \cdot Q = I_n \quad \text{bzw.} \quad Q^{-1} = Q^T, \quad \det(Q) = \pm 1, \quad \|Qx\|_2 = \|x\|_2,$$

wobei I_n die $n \times n$-Einheitsmatrix bezeichnet.
Angewendet auf das zu lösende Gleichungssystem $Ax = b$ ergibt sich:

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad Q \cdot Rx = b \quad \Leftrightarrow \quad Rx = Q^T b. \tag{1}$$

Damit reduziert sich das Problem auf eine Rückwärtssubstitution, sobald man die Matrizen Q und R kennt.

Wir wollen in dieser Aufgabe eine rel. einfache QR-Zerlegung mit Hilfe der sogenannten Givens-Rotationen berechnen. Die Idee ist, die Matrix Q aus aufeinanderfolgenden Drehungen aufzubauen, die – analog zum Gauß-Algorithmus – sukzessive Spalteneinträge unterhalb der Diagonalen eliminieren.
Für 2×2-Matrizen ist das nur ein einziger Eintrag (und entsprechend nur eine Drehung in der Ebene $\mathbb{R}^2$). Eine Drehung im $\mathbb{R}^2$ um den Winkel φ ist durch eine orthogonale Rotationsmatrix G_φ charakterisiert,

$$G_\varphi = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}, \quad c^2 + s^2 = 1,$$

wobei $c = cos(\varphi)$ und $s = sin(\varphi)$.

Diese Rotation soll nun auf die erste Spalte $(a, b)^T$ einer 2×2-Matrix A angewendet werden und den Eintrag unter der Diagonalen zu Null machen:

$$G_\varphi \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \overset{!}{=} \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}.$$

In der Praxis benötigt man den Drehwinkel φ nicht, sondern kann c und s direkt berechnen:

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

Unsere gesuchte Matrix Q ist nun einfach die Inverse (also Transponierte) der Rotationsmatrix: $Q = G_\varphi^T$. Die obere Dreiecksmatrix R erhalten wir durch Multiplikation von G_φ mit A:

$$A = Q \cdot R \quad \Leftrightarrow \quad Q^{-1} \cdot A = R \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{G_\varphi \cdot A = R}.$$

i) Berechnen Sie die Matrizen Q und R mit Hilfe der Givens-Rotation nach obigem Schema für die Matrix

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

ii) Berechnen Sie die Lösung x des Gleichungssystems $Ax = b$ mit $b = (1, 0)^T$ mit Hilfe der QR-Zerlegung aus i)!

Bemerkungen:

- Für $n \times n$-Matrizen lassen sich verallgemeinerte Drehungen $G_{i,k}$ angeben, die analog genau das Spaltenelement k zu Null machen bzw. i in r überführen (Drehung in der (i, k)-Ebene des $\mathbb{R}^n$).
  Mit der Multiplikation dieser einzelnen Matrizen $G_{i,k}^T$ zu einer Gesamtmatrix Q, lässt sich das Verfahren analog zu unserem Beispiel durchführen.
- Die QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen ist im Allgemeinen etwas teuerer als die LR-Zerlegung (ca. $4n^3/3$ statt $n^3/3$), dafür aber stabiler. Eine Pivotsuche ist nicht nötig.
- Bei dünnbesetzten Matrizen und mit Hilfe schneller Implementierungen (fast givens) lässt sich der Aufwand wesentlich reduzieren.
- In der Praxis werden die einzelnen Rotationsmatrizen $G_{i,k}$ natürlich nie explizit aufgestellt, sondern stets nur ihre Wirkung $G_{i,k} \cdot A$ berechnet und abgespeichert. $G_{i,k}$ kann dabei durch eine einzige Zahl codiert/decodiert werden.