5. VL, 29.4.2009, G. Bärwolff

Existenz und Eindeutigkeit der LR-Zerlegung

Definition 2.1

Eine obere oder untere Dreiecksmatrix, deren Diagonalelemente alle gleich eins sind, heißen unipotent. Die Zerlegung $A = LR$ heißt LR-Zerlegung, wenn L eine unipotente untere Dreiecksmatrix ist.

Satz 2.3.

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ besitzt genau dann eine LR-Zerlegung, wenn

$$\det(A(1:k, 1:k)) \neq 0, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

Falls die LR-Zerlegung existiert und A regulär ist, dann sind L und R eindeutig bestimmt, und es gilt

$$\det A = r_{11} r_{22} \cdot \ldots \cdot r_{nn}$$

Beweis

a) A besitze LR-Zerlegung

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n\,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & & r_{1n} \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & \ddots & r_{nn} \end{bmatrix}$$

Die r_{jj} sind die sogenannten Pivots, durch die in den Schritten $1, \dots, n-1$ dividiert werden konnte, d.h. $r_{jj} \neq 0$, $j = 1, \dots, n-1$

$$\to \det(A(1:k, 1:k)) = \underbrace{\det(L(1:k, 1:k))}_{=1} \cdot \underbrace{\det(R(1:k, 1:k))}_{\prod_{j=1}^{k} r_{jj}} \neq 0, \quad 1 \le k \le n-1$$

b) Es gelte $\det(A(1:k, 1:k)) \neq 0$, $k = 1, 2, \dots, n-1$

Induktion über k

$k = 1$ nach Vor. $\det(A(1:1, 1:1)) = a_{11} \neq 0$ d.h. 1 Schritt ins ...

Nun seien k-1 Schritte allg. ausgeführt, und wir zeigen, dass auch Schritt k ausgeführt werden kann

$k-1 \longrightarrow k$ Schritt ist möglich, falls Pivot $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$

Es sei $A^{(k-1)} = M_{k-1} \cdots M_1 A$

$$\underbrace{M_{k-1}\cdots M_1}_{M^{(k-1)}} A = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & & & \\ * & \ddots & & & 0 & \\ * & * & 1 & & & \\ \hline * & & * & 1 & & 0 \\ & & & & \ddots & \\ * & & * & 0 & & 1 \end{array}\right] A = \left[\begin{array}{ccc|ccc} a_{11}^{(k-1)} & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ 0 & & a_{k-1,k-1}^{(k-1)} & & & \\ \hline & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & \\ & & & \vdots & & \\ & & & \vdots & \cdots & \end{array}\right] = A^{(k-1)}$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ k \end{array}$$

$$\det\left(A^{(k-1)}(1:k,1:k)\right) = \prod_{j=1}^{k} a_{jj}^{(k-1)}$$

und

$$\det\left(A^{(k-1)}(1:k,1:k)\right) = \underbrace{\det\left(M^{(k-1)}(1:k,1:k)\right)}_{=1} \cdot \underbrace{\det\left(A(1:k,1:k)\right)}_{\substack{\neq 0 \\ \text{laut Voraussetzung}}} \neq 0$$

Damit muss $\prod_{j=1}^{k} a_{jj}^{(k-1)} \neq 0$ gelten, weshalb $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ sein muss. D.h. ein weiterer Schritt ist möglich

c) Eindeutigkeit der Zerlegung, A^{-1} existiere

Sei $A = L_1 R_1 = L_2 R_2$. Wegen $\det A \neq 0$ sind auch R_1, R_2 regulär $\Longrightarrow L_2^{-1} L_1 = R_2 R_1^{-1}$

Die Inverse einer unteren Dreiecksmatrix mit Diag. 1 ist wieder unipotent (und eine untere Dreiecksmatrix), die einer oberen ist wieder eine obere

Damit ist

$$L_2^{-1} L_1 = E = R_2 R_1^{-1} \Longrightarrow L_1 = L_2,\ R_1 = R_2 \text{ und } \det A = \det R_1$$

Bemerkungen zur Implementierung der LR-Zerl. ohne Zeilenvertauschungen (Pivotisierung)

1) Man braucht nur den Speicherplatz der Matrix:

die obere Dreiecksmatrix entsteht durch die sukz. Multiplikation von A mit Frobenius-Matrizen (Gauß-Transformationen)

$$\begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

An den Positionen $(k+1,k)$, $(k+2,k)$, $\vdots$, (n,k) wo durch die Gauß-Transformationen (Multiplikation mit M_k) Nullen erzeugt werden, können die Elemente $t_{k+1\,k}$, $t_{k+2\,k}$, $\vdots$, t_{nk} sukzessive für $k=1,\dots,n-1$ eingetragen werden und man erhält

$$\begin{pmatrix} t_{21} & & & \\ t_{31} & t_{32} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ t_{n1} & \cdots & & t_{n\,n-1} \end{pmatrix}$$

also die nicht redundanten Elemente von L

2) Berechnung von $L = M_1^{-1} \cdot \ldots \cdot M_{n-1}^{-1}$ kostet nichts, sondern besteht nur in der Ablage der jeweils bei den Gauß-Transformationen erzeugten t_{kj}-Werte ($k>j$, $k=2,\ldots,n$, $j=1,\ldots,n-1$).

3) Rechenaufwand ca. $\frac{n^3}{3}$ Multiplikationen (flops)

Für die Fehleranalyse bei der Konstruktion einer LR-Zerlegung ergibt sich

Satz 2.4 Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ Matrix von Maschinenzahlen. Falls bei der Konstruktion der LR-Zerlegung kein $\tilde{a}_{kk} = 0$ zum Abbruch führt, dann erfüllen die berechneten Faktoren $\tilde{L}, \tilde{R}$ die Gleichung

$$\tilde{L}\tilde{R} = A + H$$

mit

$$|H| \leq 3(n-1)\,\text{eps}\,(|A| + |\tilde{L}||\tilde{R}|) + O(\text{eps}^2)$$

Beweis: Bollhöfer/Mehrmann

Satz 2.5 Sind $\tilde{L}, \tilde{R}$ die Matrizen aus Satz 2.4, so erhält man bei den Algorithmen zum Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen

$$\tilde{L}\vec{\tilde{y}} = \vec{b} \qquad \tilde{R}\vec{\tilde{x}} = \vec{\tilde{y}}$$

eine Lösung $\vec{\tilde{x}}$ von $(A+\Delta)\vec{\tilde{x}} = \vec{b}$ mit

$$|\Delta| \leq n\,\text{eps}\,(3|A| + 5|\tilde{L}||\tilde{R}|) + O(\text{eps}^2)$$

Beweis

Rückwärtsanalyse ergibt

$$(\tilde{L} + F)\tilde{\vec{y}} = \vec{b} \quad , \quad |F| \le n \,\mathrm{eps}\, |\tilde{L}| + \mathcal{O}(\mathrm{eps}^2)$$

$$(\tilde{R} + G)\tilde{\vec{x}} = \tilde{\vec{y}} \quad , \quad |G| \le n \,\mathrm{eps}\, |\tilde{R}| + \mathcal{O}(\mathrm{eps}^2)$$

$$\rightarrow (\tilde{L}+F)(\tilde{R}+G)\tilde{\vec{x}} = \vec{b}$$

$$\Longleftrightarrow (\underbrace{\tilde{L}\tilde{R}}_{A+H} + F\tilde{R} + \tilde{L}G + FG)\tilde{\vec{x}} = \vec{b}$$

$$\Longleftrightarrow (A + \Delta)\tilde{\vec{x}} = \vec{b}$$

mit $\Delta = H + F\tilde{R} + \tilde{L}G + FG$. Mit der Absch. aus Satz 2.4 für H ergibt sich

$$|\Delta| \le |H| + \underbrace{|F|}_{\le n\,\mathrm{eps}|\tilde{L}|}|\tilde{R}| + |\tilde{L}|\underbrace{|G|}_{\le n\,\mathrm{eps}|\tilde{R}|} + \underbrace{|F||G|}_{\mathcal{O}(\mathrm{eps}^2)}$$

$$\le 3(n-1)\,\mathrm{eps}\,(|A| + |\tilde{L}||\tilde{R}|) + 2n\,\mathrm{eps}\,|\tilde{L}||\tilde{R}| + \mathcal{O}(\mathrm{eps}^2)$$

$$\le n\,\mathrm{eps}\,(3|A| + 5|\tilde{L}||\tilde{R}|) + \mathcal{O}(\mathrm{eps}^2) \quad \square$$

Bemerkung

Problematisch, d.h. recht groß können die Elemente von $|\tilde{L}|$ und $|\tilde{R}|$ werden, wenn bei der Berechnung der t_{kj} im Rahmen der Gauß-Transformationen große Zahlen entstehen!

Abhilfe: Pivotisierung

LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung

Um zu vermeiden, dass der Algorithmus zur Konstruktion einer LR-Zerlegung aufgrund von $\tilde{a}_{kk} = 0$ abbricht, oder durch betragsmäßig sehr kleine $\tilde{a}_{kk}$ (kleine Pivots) bei der Berechnung der t_{kj} betragsmäßig sehr große Zahlen entstehen, kann man durch Zeilenvertauschungen das betragsmäßig maximale Element in die Diagonalposition bringen.

Zeilenvertauschungen bewirkt man durch Multiplikation mit Permutationsmatrizen P_k (von links).

Beispiel

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

$$\rightsquigarrow \quad P_1 A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 1 & 6 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_1 P_1 A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 3/2 \\ 0 & \frac{11}{2} & 3/4 \end{pmatrix} \quad \text{mit } M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow \quad P_2 M_1 P_1 A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{11}{2} & 3/4 \\ 0 & 2 & 3/2 \end{pmatrix} \quad \text{mit } P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

7

$$M_2 P_2 M_1 P_1 A = \underbrace{\begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{11}{2} & \frac{3}{4} \\ 0 & 0 & \frac{27}{22} \end{pmatrix}}_{R} \quad \text{mit } M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{11} & 1 \end{pmatrix}$$

$$M_2 P_2 M_1 \underbrace{P_2 P_2}_{E} P_1 A = R$$

E für elementare Permutationsmatrizen, die nur „2 Zeilen vertauscht"

$\rightarrow$

$$M_2 \cdot \underbrace{P_2 M_1 P_2}_{\hat{M}_1} \cdot P A = R, \quad \text{mit } P = P_2 P_1$$

$$P_2 M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{Zeilentausch}$$

$$\hat{M}_1 = P_2 M_1 P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{Spaltentausch}$$

$\hat{M}_1$ ist genau wie M_1 Frobeniusmatrix

$$\rightarrow \hat{M}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Letztendlich findet man

$$P A = \hat{M}_1^{-1} M_2^{-1} R = L R \quad \text{mit}$$

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

Bei den durchgeführten Betrachtungen haben wir benutzt, dass für Permutationsmatrizen

$$P \cdot P = E$$

gilt, d.h. die Matrix gleich ihrer Inverse ist. Die Erfahrungen des Beispiels kann man zusammenfassen.

Definition 2.6
Wir bezeichnen den im Beispiel beschriebenen Algorithmus als Konstruktion einer LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung (und Gaußelimination mit partieller Pivotisierung).

Satz 2.7
Für die Gaußelimination mit partieller Pivotisierung mit dem Resultat

$$M_{n-1} P_{n-1} \cdots M_1 P_1 A = R$$

gilt

$$PA = LR$$

mit $P = P_{n-1} \cdots P_1$. Für L gilt

$$L = \hat{M}_1^{-1} \cdots \hat{M}_{n-1}^{-1}$$

mit

$$\hat{M}_{n-1} = M_{n-1}$$

$$\hat{M}_k = P_{n-1} \cdots P_{k+1} M_k P_{k+1} \cdots P_{n-1}, \quad k \leq n-2$$

wobei $\hat{M}_k$ Frobeniusmatrizen sind (deren Inverse trivial zu berechnen ist)

Beweis

Durch die Eigenschaft $PP = E$ von Permutationsmatrizen überlegt man sich, dass

$$M_{n-1}P_{n-1}M_{n-2}P_{n-2} \ldots M_1 P_1 A$$

$$= \underbrace{M_{n-1}}_{\hat{M}_{n-1}} \underbrace{P_{n-1}M_{n-2}P_{n-1}}_{\hat{M}_{n-2}} P_{n-1}P_{n-2} \ldots \underbrace{M_1 P_2 \ldots P_{n-1}}_{\hat{M}_1} \underbrace{P_{n-1} \ldots P_2 P_1}_{P} A$$

gilt. Außerdem hat $\hat{M}_k = P_\mu M_k P_\mu$ die gleiche Struktur wie M_k, da durch die Multiplikation von P_μ von links und rechts nur die Reihenfolge der t_{kj} vertauscht wird.
Die Multiplikation von

$$\hat{M}_{n-1}\hat{M}_{n-2} \ldots \hat{M}_1 P A \qquad \text{mit } L = \hat{M}_1^{-1} \ldots \hat{M}_{n-1}^{-1}$$

ergibt

$$PA = LR.$$

Dabei ist L ebenso wie im Fall der LR-Zerlegung ohne Pivotisierung als Produkt von Frobeniusmatrizen eine untere Dreiecksmatrix mit Diagonalelementen gleich eins. $\square$

Bemerkung

Konsequenz dieser LR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung ist, dass $|\tilde{L}|$ in der Regel wesentlich kleinere Elemente (≤ 1) hat, was zu einer Verbesserung der Abschätzung aus Satz 2.5 hat.

Cholesky-Zerlegung

Bei vielen Aufgabenstellungen der angewandten Mathematik sind Gleichungssysteme $A\vec{x}=\vec{b}$ mit symmetrischen und pos. definiten Matrizen A zu lösen. Z.B.

- numerische Lösung elliptischer und parabolischer Differentialgleichungen
- Spline-Approximation

Voraussetzung: A ist pos. definit und symmetr., $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, d.h.

$$\vec{x}^T A \vec{x} > 0 \quad \text{f.a. } \vec{x} \neq 0 \quad \text{und} \quad A = A^T$$

Unter diesen Voraussetzungen kann man die Gauß-Elimination (LR-Zerlegung) durch die sogenannte Cholesky-Zerlegung ersetzen und verbessern!

Satz von Sylvester (lin. Algebra)

Notwendig und hinreichend für pos. Definitheit einer symm. Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist die Positivität aller Hauptabschnittsdeterminanten, d.h.

$$\det A(1:k,1:k) > 0 \quad \text{f.a. } k = 1,\dots,n$$

(auch Krit. von Hurwitz)

Satz 2.8

Sei A symmetrisch und pos. definit. Dann existiert eine untere Dreiecksmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit pos. Diagonalelementen, so dass $A = GG^T$.

Beweis

Nach dem Satz von Sylvester gilt

$A(1:k,1:k)$, $k=1,\dots,n$ sind pos. definit

und $\det A(1:k,1:k) \neq 0$,

sowie A invertierbar (regulär)

$\leadsto$ nach Satz 2.3 (Ex. ein LR-Zerlegung)

$$A = LR$$

mit L untere Dreiecksmatrix mit 1-Diagonale und R obere Dreiecksmatrix, in diesem Fall gilt

$$A(1:k,1:k) = L(1:k,1:k)\,R(1:k,1:k)$$

$$\leadsto 0 < \det A(1:k,1:k) = \underbrace{\det L(1:k,1:k)}_{=1} \cdot \underbrace{\det R(1:k,1:k)}_{=r_{11} r_{22} \cdots r_{kk}}$$

$$\leadsto 0 < \det R(1:k,1:k) = r_{11} r_{22} \cdots r_{kk} \quad \text{für alle } k=1,\dots,n$$

$$\leadsto r_{jj} > 0 \qquad \text{f.a. } j=1,2,\dots,n$$

Nun betrachten wir die Diagonalmatrix

$$D = \operatorname{diag}(r_{11}, r_{22}, \dots, r_{nn}) =: \operatorname{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n),\ d_k > 0$$

und es gilt

$$R = D\hat{R}$$

mit $\hat{r}_{jj} = 1$, $j=1,2,\dots,n$. Definiere $D^{\frac{1}{2}} = \operatorname{diag}(d_1^{\frac{1}{2}}, \dots, d_n^{\frac{1}{2}})$

$$\leadsto A = LR = LD\hat{R} = LD^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} \hat{R} \qquad (2.1)$$

$$\leadsto D^{-\frac{1}{2}} L^{-1} A = D^{\frac{1}{2}} \hat{R}, \quad \left(D^{-\frac{1}{2}} = \operatorname{diag}(d_1^{-\frac{1}{2}}, \dots, d_n^{-\frac{1}{2}})\right)$$

weiterhin gilt

$$\underbrace{D^{-1/2}L^{-1}A(L^{-1})^T(D^{-1/2})^T}_{\text{Matrix ist symmetrisch}} = \underbrace{D^{1/2}\hat{R}(L^{-1})^T(D^{-1/2})^T}_{\substack{\text{ist obere}\\ \text{Dreiecksmatrix}\\ \text{mit 1-Diagonale}}},$$

$$\rightsquigarrow \quad D^{1/2}\hat{R}(L^{-1})^T D^{-1/2} = E \qquad \left((D^{-1/2})^T = D^{-1/2}\right)$$

$$\rightsquigarrow \quad \hat{R}(L^{-1})^T = D^{-1/2}D^{1/2} = E$$

$$\rightsquigarrow \quad \hat{R} = L^T$$

einsetzen in (2.1) ergibt

$$A = LD^{1/2}D^{1/2}\hat{R} = LD^{1/2}D^{1/2}L^T$$

$$= (LD^{1/2})(LD^{1/2})^T$$

$$\rightsquigarrow \quad G = LD^{1/2}$$

$\square$

Konstruktion der Cholesky-Zerlegung

$$G G^T = A \quad \longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} g_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & \cdots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & \cdots & g_{n1} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & g_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$\rightsquigarrow$

$$a_{kk} = g_{k1}^2 + g_{k2}^2 + \dots + g_{k\,k-1}^2 + g_{kk}^2, \quad k = 1, \dots, n$$

$\rightsquigarrow$ $k=1 \quad g_{11}^2 = a_{11} \rightsquigarrow g_{11} = \sqrt{a_{11}}$

$$g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{kj}^2}$$

außerdem für $j>k$

$$a_{kj} = g_{j1} g_{k1} + g_{j2} g_{k2} + \dots g_{j\,k-1} g_{k\,k-1} + g_{jk} g_{kk}$$

$$\rightsquigarrow g_{kj} = \frac{1}{g_{kk}} \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} g_{ji} g_{ki} \right)$$

Pseudo-Code:

```
FOR k=1:n
  g_kk = (a_kk - sum_{j=1}^{k-1} g_kj^2)^(1/2)
  FOR j=k+1:n
    g_jk = (a_jk - sum_{i=1}^{k-1} g_ji g_ki)/g_kk
  END
END
```