Dietrich Feldmann

Repetitorium der Numerischen Mathematik

2. Auflage

HANSER

REPETITORIUM

DER

NUMERISCHEN MATHEMATIK

Dietrich Feldmann

2. Auflage

Binomi Verlag	**Schützenstr. 9, 30890 Barsinghausen**	
	Telefon	**05105 6624000**
	Telefax	**05105 515798**
	E–Mail	**verlag@binomi.de**
	Internet	**www.binomi.de**

Druck BWH GmbH Medien Kommunikation

Zu beziehen beim Verlag oder im Buchhandel

ISBN 978–3–923 923–07–6

Hannover 10/07

Vorwort

Dieses Buch ist weder ein Lehrbuch noch kann es mathematische Vorlesungen ersetzen, im Gegenteil: Die Möglichkeiten, den Stoff parallel zur Vorlesung zu erarbeiten, soll es verbessern helfen, um mehr Studenten in die Lage zu versetzen, den Stoff *sofort* nacharbeiten zu können.

Unsere Erfahrungen zeigen, daß viele Studenten zum Verständnis mathematischen Stoffes Beispiele benötigen, anhand derer sie versuchen, Inhalt und Aussage von Sätzen, Formeln und Verfahren zu verstehen. Das geschieht gewöhnlich in Übungen, leider aber zunehmend unter Zeitdruck. Damit ist ein Ziel dieses Buches umrissen: Mathematik durch Beispiele leichter verständlich zu machen. Da es sich in der Angewandten Mathematik meist um das handelt, was man "Verfahren" nennt, werden in der Mehrzahl Rechnungen vorgeführt, die Theorie dazu ist Gegenstand von Vorlesungen. Auch werden die Verfahren gewöhnlich in ihrer "ursprünglichen" Form vorgeführt, also ohne Abwandlungen für Sonderfälle bzw. weitere Verallgemeinerungen.
Wir meinen, daß viele "Verfahren" im Grunde recht einfach sind. Um so bedauerlicher ist es, daß nicht wenige Studenten hiermit Probleme haben. Das Ziel einer *wissenschaftlichen* Ausbildung geht aber weit über ein Anwendenkönnen von Verfahren hinaus: Die zugehörige Theorie und ihre Grenzen soll der Student kennenlernen um ggf. diese dem vorliegenden Problem anpassen und die dann gewonnenen Ergebnisse richtig einschätzen zu können. Wir hoffen, daß es dem Lernenden anhand unserer Beispiele erleichtert wird, die Verfahren zu verstehen, um Zeit für das Verständnis der genannten Zusammenhänge zu finden, wie sie in Vorlesungen gebracht werden.

Ein weiteres Ziel dieses Buches ist es, bei Prüfungen, insbesondere Klausuren, zu helfen; viele der Beispiele waren Klausuraufgaben. Daher sind die Beispiele meist einfach, um "per Hand" gerechnet werden zu können. Hier befindet sich der Student *vor* Prüfungen in der Situation, sich selbst prüfen zu müssen, um herauszufinden, ob seine Vorbereitung ausreichend, besser: gut ist. *Während* einer Klausur sucht er, soweit erlaubt, nach Hilfsmitteln, die ihn auf den richtigen Weg führen und ist für Tips dankbar. Dazu soll der zu Beginn eines jeden Kapitels stehende kurze Abschnitt "Besondere Tips und Hinweise" dienen: Man kann sich damit hoffentlich schnell und richtig an Wesentliches und Nützliches erinnern; Grafiken und Übersichten sollen den Ablauf eines Verfahrens veranschaulichen. Hier stehen häufig auch Tips mit dem Tenor *"erst denken - dann rechnen"*. So geschieht es in Klausuren "im Eifer des Gefechts" leider oft, daß jemand das Integral über ein Intervall [-a,a] für eine ungerade Funktion "berechnet" und dann (hoffentlich) 0 herausbekommt; besser ist es, *vorher* zu bemerken, daß dieses notwendig der Wert des Integrals ist. Solche und ähnliche Tips findet man hier, bezogen auf den Stoff des jeweiligen Abschnittes. Wenn das nicht ausreicht, suchen sich viele Studenten in Klausursituation Beispiele, die der Klausuraufgabe möglichst ähneln und versuchen, sich daran zu orientieren. Um dieses zu erleichtern, sind wie die Übersichten auch die Beispiele weitgehend gegliedert. Etwa: 1) Auflösen nach ..., 2) Einsetzen in ..., 3) Integrieren ... usw.. Auch dadurch soll der Ablauf einer Rechnung übersichtlich gemacht werden.

Ein ausführlicher alphabetischer Index soll die Suche nach Begriffen erleichtern.

Dietrich Feldmann

Inhaltsverzeichnis

Lineare Gleichungssysteme

Besondere Tips und Hinweise

1. Man mache sich die im 1. Abschnitt genannten Sachverhalte gut klar.
2. Gaußscher Algorithmus
   a) Ein Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{b}$ wird gelöst durch Überführung in $R\vec{x}=\vec{c}$, wobei R eine obere Dreiecksmatrix ist (wenn A quadratisch), das dann durch Rückwärtssubstitution ("von unten") gelöst wird. Um Rundungsfehler möglichst klein zu halten, sollte man, insbesondere wenn Koeffizienten stark abweichender Größenordnungen auftretetn, das System vor der weiteren Behandlung äquilibrieren (skalieren) – besser: so tun, als ob man es täte (Beispiel 2 am Schluß).
   Dabei sind drei Fälle möglich:
   1. Natürliche Pivotwahl: Die jeweils links oben stehende Zahl des entstandenen Systems wird zur Elimination benutzt (Beispiele 1 und 4).
   2. Partielle Pivotwahl (Spalten-Pivotwahl): Die betragsgrößte *unter* der links oben stehenden Zahl wird zur Elimination benutzt, z.B. wenn oben links eine 0 steht. Das hat auf die Lösung keinen Einfluß.
      ♥ Besonderer Tip: Bei Handrechnung erzeugt man leicht Brüche, daher nehme man dann nicht unbedingt die betragsgrößte Zahl sondern eine andere (wenn möglich ±1) (Beispiel 2).
   3. Totale Pivotwahl: Die betragsgrößte Zahl im Rest-System Zahl wird nach links oben gebracht. Das erfordert die Notierung der Spaltenvertauschungen in einem Permutationsvektor, weil die Lösung des entstandenen Systems eine Permutation der des gegebenen ist (Beispiel 3).
      ♥ Besonderer Tip: Bei Handrechnung meist schwerfällig, man erzeugt Brüche, auch wenn A und $\vec{b}$ ganzzahlig sind; im Rechner vorteilhaft.

   b) Bei 1. und 2. ergibt sich ohne Zusatzrechnung eine Zerlegung von A, nämlich $A=L\cdot R$ (bei natürlicher, Beispiel 1) oder $P\cdot A=L\cdot R$ (bei partieller Pivotwahl Beispiel 2), wobei P eine Permutationsmatrix ist, R obere ("rechte") und L untere ("linke") Dreiecksmatrix, die auf der Diagonale lauter 1 hat. $P\cdot A$ entsteht dabei aus A durch Vertauschung der Zeilen untereinander.
   c) Auch lineare Matrizengleichungen $A\cdot X=B$ lassen sich als "mehrere Gleichungssysteme mit gleicher Koeffizientenmatrix A und mehreren rechten Seiten, den Spalten von B" behandeln (Beispiel 5), insbesondere Berechnung der Inversen (Beispiel 6).
3. Sonderfall: Tridiagonalmatrizen
   Variante des Gauß-Algorithmus, die berücksichtigt, daß viele Elemente der Koeffizientenmatrix bereits 0 sind (Beispiel 7).
4. Verfahren von Banachiewicz (erläuterndes Beispiel 8)
   Variante des Gauß-Algorithmus, die Schreibarbeit erspart: man schreibt das System, ohne die Zwischenresultate zu notieren, Zeile für Zeile um. Man richte sich bei der Rechnung nach den angegebenen Skizzen, die die Vorgehensweise verdeutlichen (wird Pivotwahl gemacht, wird die Sache leicht zu einer verwirrenden Konzentrationsaufgabe).

5. QR-Zerlegung (Beispiel 10)

   Die Matrix A wird dargestellt als Produkt $A=Q\cdot R$, wobei Q orthogonale Matrix ist (d.h. $Q^{-1}=Q^T$) und R obere Dreiecksmatrix. Man berechnet $A^{(1)}, A^{(2)},..., A^{(n-1)}=R$ und Q als Produkt von Householder-Matrizen. Die Lösung des Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{b}$ ist dann aus $R\vec{x}=Q^T\vec{b}$ zu berechnen.

   ♥ Besonderer Tip: $A^{(i)}$ hat dieselben Zeilen und Spalten 1 bis i-1 wie $A^{(i-1)}$.

6. Cholesky-Verfahren (Beispiele 11, 12, 13)

   Die Matrix A wird zdargestellt als Produkt $A=U\cdot U^T$, wobei U untere Dreiecksmatrix mit positiven Diagonalelementen ist. Geht genau dann, wenn A symmetrisch (im komplexen Fall: hermitesch) und positiv definit ist. Ist die letzte Voraussetzung (die man A nicht wie die erste sofort ansieht) nicht erfüllt, ergibt sich ein Widerspruch. Ist wohl das einfachste Verfahren, um positive Definitheit zu prüfen (Beispiel 11). Zur Vorgehensweise siehe die Übersichtsskizzen. Man berechnet die Lösung des Gleichungssystems $A\vec{x}=\vec{b}$ aus $U\vec{c}=\vec{b}$ und dann $U^T\vec{x}=\vec{c}$. (Beispiele 12, 13, 14).

7. Jacobi-Verfahren (Gesamtschritt-Verfahren) (Beispiele 15, 16, 17)

   Typisches Iterationsverfahren: Aus einer "Näherung" wird eine neue berechnet, aus dieser dann nach derselben Regel wieder eine neue usw. Man löst nach der Diagonale auf und dividiert durch das jeweilige Diagonalelement. Dann setzt man rechts einen Startvektor ein und berechnet daraus (links) einen "neuen" Vektor, den man wieder rechts einsetzt usw. Die entstehende Folge konvergiert gegen die Lösung, wenn das starke Zeilensummenkriterium erfüllt ist.

   Wenn es nicht erfüllt ist: Könnte es nach Änderung der Reihenfolge der Gleichungen zu erfüllen sein?

   2 Fehlerabschätzungen (wobei Zeilensummennorm einfach zu handhaben):

   a) a priori: nach dem ersten Iterationsschritt durch Vergleich mit dem Startvektor.

   b) a posteriori: nach dem letzten Schritt durch Vergleich mit dem vorletzten (genauer).

8. Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschrittverfahren) (Beispiele 18, 19, 20)

   Man gebe einen Startvektor vor. Aus der ersten Gleichung berechne man die erste Komponente des neuen Vektors (wie beim Jacobi-Verfahren); dann aus der 2. Gleichung dessen 2. Komponente, verwende aber bereits die berechnete *neue* erste Komponente. Aus der 3. Gleichung berechne man die neue 3. Komponente, verwende aber dabei die *neu* berechnete 1. und 2.Komponente usw. (hier liegt der Unterschied zum Jacobi-Verfahren). Wie das Jacobi-Verfahren insbesondere für große Systeme geeignet. 2 Fehlerabschätzungen analog dem Jacobi-Verfahren. Die entstehende Folge konvergiert gegen die Lösung, wenn das starke Zeilensummenkriterium erfüllt ist. Wenn es nicht erfüllt ist: Könnte es nach Änderung der Reihenfolge der Gleichungen zu erfüllen sein?

9. Rundungsfehler

   A. Abschätzung der Fehler bei der Lösung linearer Gleichungssysteme (Beispiel 21).

   B. Verbesserung von Näherungen: Nachiteration (Beispiel 22).

   C. Untersuchung, wie genau die *Lösung* sein kann, wenn die *Eingangs-Werte* (in A und/oder $\vec{b}$) nicht genau bekannt sind (Beispiel 23).

D. Satz von Prager und Öttli: Beantwortet die Frage, ob ein Vektor $\vec{x}$ als Lösung eines Gleichungssystems "brauchbar, akzeptabel" ist aufgrund der Rundungen der Matrix und der rechten Seite des Gleichungssystems.

♥ Besonderer Tip: Die Verwendung der ∞-Norm (Zeilensummen-Norm) ist meist am einfachsten (nicht unbedingt am effektivsten).

♥ Besonderer Tip: Man denke bei Abschätzungen insbesondere an die *Submultiplikativität:* $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ (für jede Matrixnorm).

♥ Besonderer Tip: Vorsicht, wenn Vektoren als *Zeilen*-Vektoren geschrieben werden, obwohl sie im Sinne der Matrizenrechnung als *Spalten*-Vektoren zu schreiben wären oder transponiert sind (mit ′ oder ^{T} oben): Dann ist z.B. $\|(2,3,-9)^T\|_\infty = 9$ und $\|(2,3,-9)^T\|_1 = 14$ (der Name Zeilensummen- bzw. Spaltensummenmaximum kann bei oberflächlicher Betrachtung zu Mißverständnissen führen).

10. Methode der kleinsten Quadrate für überbestimmte Systeme

Ein überbestimmtes System (mehr Gleichungen als "Unbekannte") hat i.a. keine Lösung. Man berechnet den Vektor, der in gewissem Sinne den "Fehler" minimal macht. Er genügt einem aus dem gegebenen Gleichungssystem gewonnenen linearen Gleichungssystem.

Zu allen in diesem Kapitel behandelten Verfahren (und weiteren) stehen Quelltexte (Prozeduren, Programme und weitere Beispiele) in *"Turbo-Pascal-Quelltexte zur Ingenieur-Mathematik"*. Auch die verschiedenen Normen, Konditionszahlen usw. sind dort programmiert.

Eine vielleicht überflüssige Bemerkung:

In der *Geometrie* schreibt man Vektoren als oft "Zeilen- oder Spaltenvektoren", sie meinen jeweils dasselbe *geometrische Objekt:* $(3,5,1)$ und $(3,5,1)^T$ ist derselbe Punkt oder Ortsvektor ein und desselben Punktes.

In der *Matrizenrechnung* muß man zwischen beiden unterscheiden: Die Vektoren $(3,5,1)$ und $(3,5,1)^T$ sind verschiedene Objekte (1 Zeile 3 Spalten bzw. 3 Zeilen 1 Spalte).

Besondere Aufmerksamkeit ist erforderlich, wenn Produkte auftreten ("Zeilen mal Spalten") oder Normen ("Zeilen- oder Spaltensummennorm"), da diese Ausdrücke sonst etwas Falsches suggerieren könnten. So ist z.B. das Skalarprodukt von $(2,3,5)$ mit $(3,-1,3)$ als $(2,3,5)\cdot(3,-1,3)^T$ zu schreiben (auch $(3,-1,3)'$ ist verbreitet) -in der Vektorrechnung oft kurz $(2,3,5)\cdot(3,-1,3)$. Auch bei $\vec{x}^T A\vec{x}$ ($\vec{x}$ Spaltenvektor) beachte man dieses; $\vec{x}^T$ ist Zeilenvektor. Ferner ist z.B.

$\|(2,-6,3)\|_\infty = 11$ aber $\|(2,-6,3)^T\|_\infty = 6$ (s.o.)

1. Vorbemerkungen zu den numerischen Verfahren

A. Bei der Beschreibung und Anwendung vieler Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme oder Eigenwertaufgaben kommen besondere Typen von Matrizen vor, mit deren Hilfe die gegebene Matrix (meist sukzessive) in gewisser Hinsicht vereinfacht wird, wobei bestimmte Eigenschaften (z.B. die Lösungen des Gleichungssystems oder das charakteristische Polynom, damit die Eigenwerte) erhalten bleiben oder auf übersichtliche Art verändert werden (z.B. die Eigenvektoren). So bringen z.B. der Gaußsche Algorithmus das System auf Dreiecksform, das Wilkinsonverfahren und die Householder-Transformation die Matrix auf Hessenbergform.

B. Bei der Fehlerabschätzung ist es nötig, den "Abstand" zweier Vektoren oder Matrizen zu "messen". Hier sind drei "Abstandsbegriffe" (sie werden Normen genannt) von besonderer Bedeutung.

Beispiel: Welche Näherung für (1.0,3.7,2.6,1.3) ist "besser":

(1.1,3.6,2.5,1.2) oder (1.0,3.7,2.6,1.7)?

Die Antwort lautet zunächst wohl: "Das kommt darauf an, was man will", mathematisch: welche Norm man verwendet.

A. Besondere Matrizen und ihre Eigenschaften

Im Folgenden stehen leere Plätze in Matrizen für Nullen.

1. Transpositionsmatrizen

a) Begriff

Es sei E die n×n-Einheitsmatrix (also auf der Diagonale 1, sonst 0). Jede Matrix, die aus E durch Vertauschung zweier Zeilen (oder Spalten) hervorgeht, heißt eine *Transpositionsmatrix:* P_{ik} geht aus E durch Vertauschung der i-ten mit der k-ten Spalte (oder Zeile, was dasselbe Resultat hat) hervor.

Beispiel

Ist n=5, so ist

$$P_{24} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \text{(alte 4. Zeile)} \\ \\ \text{(alte 2. Zeile)} \\ \\ \end{matrix}$$

b) Eigenschaften bezüglich der Multiplikation

Multipliziert man eine Matrix A *von links* (bzw. *rechts*) mit einer Transpositionsmatrix P_{ik}, so entsteht dieses Produkt $P_{ik}A$ (bzw. AP_{ik}) aus A durch Vertauschung der i-ten mit der k-ten *Zeile* (bzw. *Spalte*).

Beispiel (n=4)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 & 5 \\ 2 & 1 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 2 & 1 & 4 & 3 \\ 2 & 4 & 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}, \quad P_{23}A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 1 & 4 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}, \quad AP_{23} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 1 & 2 & 1 \\ 4 & 1 & 2 & 4 & 3 \\ 2 & 2 & 4 & 3 & 6 \end{pmatrix}$$

c) Inverse

Die Inverse von P_{ik} ist wieder P_{ik} (denn Multiplikation von P_{ik} mit sich selbst bewirkt ein "Rückvertauschen"). Ferner ist auch die Transponierte wieder P_{ik}.

2. Permutationsmatrizen

a) Begriff

Jedes Produkt von Transpositionsmatrizen heißt *Permutationsmatrix.*

Beispiel (n=4)

$$P = P_{24}P_{14} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Diese Matrix wird durch die zugehörige Permutation $\vec{\sigma} = (2,4,3,1)$ beschrieben, da in ihr die *Spalten* der Einheitsmatrix in dieser Reihenfolge stehen. Man kann auch so beschreiben: Eine Permutationsmatrix ist eine Matrix, die aus der Einheitsmatrix durch eine beliebige Vertauschung (Permutation) der Spalten (bzw. Zeilen) hervorgeht. Dann steht in jeder Zeile und jeder Spalte *genau eine* 1, sonst 0.

b) Inverse

Die Inverse der Permutationsmatrix P ist P^T. Ein Beispiel für zwei Faktoren:

$$\text{Aus } P = P_{ik}P_{rs} \text{ folgt } P^{-1} = (P_{ik}P_{rs})^{-1} = P_{rs}^{-1}P_{ik}^{-1} = P_{rs}^T P_{ik}^T = (P_{ik}P_{rs})^T = P^T.$$

Beispiel

Die vorige Matrix P hat die Inverse

$$P^{-1} = P^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Zu ihr gehört die Permutation $\vec{\tau} = (4,1,3,2)$, die auch mit $\vec{\sigma}^{-1}$ bezeichnet wird, wenn $\vec{\sigma}$ die von P bezeichnet (in ihr stehen die *Zeilen* in der Reihenfolge (2,4,3,1)).

c) Eigenschaften bezüglich der Multiplikation

Multipliziert man eine Matrix A von *links* (bzw. *rechts*) mit einer Permutationsmatrix P, so vertauschen sich ihre *Zeilen* (bzw. *Spalten*) entsprechend der Permutationsmatrix P (bzw. P^T) miteinander (d.h. der zugehörigen Permutationen, die diese Vertauschungen beschreiben).

Beispiel

Multipliziert man die folgende Matrix A von links bzw. rechts mit der zu $\vec{\sigma}=(2,4,3,1)$ gehörigen Permutationsmatrix P (siehe oben), so bekommt man

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 & 7 \\ 1 & 3 & 2 & 6 \\ 0 & 3 & 1 & 3 \\ 2 & 9 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad PA = \begin{pmatrix} 2 & 9 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & 4 & 7 \\ 0 & 3 & 1 & 3 \\ 1 & 3 & 2 & 6 \end{pmatrix}, \quad AP = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 4 & 3 \\ 3 & 6 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 1 & 0 \\ 9 & 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

In AP stehen die *Spalten* in der Reihenfolge $\vec{\sigma}=(2,4,3,1)$, dem zu P gehörigen Permutationsvektor, in PA die *Zeilen* in der Reihenfolge (4,1,3,2), dem zu $P^{-1}=P^T$ gehörenden Permutationsvektor.

3. Diagonalmatrizen

a) Begriff

Eine *Diagonalmatrix* ist eine quadratische Matrix, deren Elemente außerhalb der Diagonale alle 0 sind. Wir bezeichnen die Diagonalelemente einer solchen Matrix mit d_1, d_2, ...

b) Eigenschaften bezüglich der Multiplikation

Multipliziert man eine Matrix von *links* (bzw. *rechts*) mit einer Diagonalmatrix, so multipliplizieren sich die *Zeilen* (bzw. *Spalten*) von A der Reihe nach mit d_1, d_2, ...

Beispiel (Leerplätze stehen für 0)

$$\begin{pmatrix} 3 & & \\ & 4 & \\ & & -3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 1 \\ 3 & -2 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 6 & 9 \\ 8 & 8 & 4 \\ -9 & 6 & 12 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 1 \\ 3 & -2 & -4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & & \\ & 4 & \\ & & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 8 & -9 \\ 6 & 8 & -3 \\ 9 & -8 & 12 \end{pmatrix}$$

c) Inverse einer Diagonalmatrix

Sind alle Diagonalelemente d_1, d_2, ... der Diagonalmatrix D ungleich 0, so existiert die Inverse von D und ist ebenfalls Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen $1/d_1$, $1/d_2$, ...

Beispiel

$$\begin{pmatrix} 3 & & & & \\ & -1/3 & & & \\ & & 2 & & \\ & & & -1 & \\ & & & & 0.2 \end{pmatrix} \text{ hat die Inverse } \begin{pmatrix} 1/3 & & & & \\ & -3 & & & \\ & & 1/2 & & \\ & & & -1 & \\ & & & & 5 \end{pmatrix}.$$

4. Frobenius-Matrizen

a) Begriff

Ist E Einheitsmatrix und ersetzt man die Nullen unterhalb *einer* der 1 durch beliebige Zahlen, so erhält man eine *Frobenius-Matrix*.

Beispiel

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & 2 & 1 & \\ & -1 & & 1 \end{pmatrix}$$

ist eine Frobenius-Matrix. Wir bezeichnen sie mit L_2; der Index 2 soll andeuten, daß in der 2. Spalte von E unter dem Diagonalelement beliebige Zahlen stehen. (Der Buchstabe L soll an die LR-Zerlegung von Matrizen erinnern, wo diese Matrizen auftreten.) Es werden die Zahlen 2 bzw. -1 mit l_3 bzw. l_4 bezeichnet.

b) Eigenschaften bezüglich der Multiplikation

Multipliziert man eine Matrix A von *links* mit einer Frobenius-Matrix L_k, so entsteht das Produkt $L_k \cdot A$ aus A dadurch, daß

- die *Zeilen* 1 bis k ungeändert bleiben und
- Vielfache der k-ten *Zeile* zu den folgenden *Zeilen* addiert werden und zwar
  - zur k+1-ten Zeile das in der l_{k+1}-fache
  - zur k+2-ten Zeile das in der l_{k+2}-fache
  - usw.

Beispiel

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & 5 & 1 & \\ & -2 & & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 \\ 1 & 3 & 6 & 0 \\ 2 & 2 & 7 & 1 \\ 1 & 1 & 3 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 \\ 1 & 3 & 6 & 0 \\ 7 & 17 & 37 & 1 \\ -1 & -5 & -9 & 7 \end{pmatrix}$$

Hier ist k=2. Die Zeilen 1 und 2 bleiben also ungeändert, die 3. Zeile der rechts stehenden Poduktmatrix entsteht aus der alten 3. Zeile durch Addition des l_3=5-fachen (die 5 in der 3. Zeile von L_2) der 2. Zeile und die 4. Zeile durch Addition des l_4=(-2)-fachen (-2 der 4. Zeile von L_2) der 2. Zeile zur alten 4. Zeile.

Multipliziert man eine Matrix A von *rechts* mit einer Frobenius-Matrix L_k, so entsteht das Produkt $A \cdot L_k$ aus A dadurch, daß

- alle *Spalten* bis auf die k-te Spalte ungeändert bleiben und
- die k-te *Spalte* aus der alten k-ten Spalte dadurch entsteht, indem zu ihr addiert wird
  - das l_{k+1}-fache der k+1-ten Spalte
  - das l_{k+2}-fache der k+2-ten Spalte
  - usw.

Beispiel

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 5 & 1 \\ 4 & 1 & 0 & -1 \\ 4 & 5 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & -4 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & 2 & 1 & \\ & -3 & & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 9 & 5 & 1 \\ 4 & 4 & 0 & -1 \\ 4 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & -19 & -4 & 3 \end{pmatrix}$$

Hier ist k=2. Nur die 2. Spalte von A ändert sich und entsteht dadurch, daß zu ihr das 2-fache der 3. und das (-3)-fache der 4. Spalte addiert werden (z.B. $-19=-2+2\cdot(-4)+(-3)\cdot 3$).

c) Inverse einer Frobenius-Matrix

Die Inverse einer Frobenius-Matrix L_k entsteht dadurch, daß die Elemente unterhalb der Diagonale mit (-1) multipliziert werden.

Beispiel (Leerplätze 0)

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & 5 & 1 & & \\ & -3 & & 1 & \\ & 0 & & & 1 \end{pmatrix} \text{ hat die Inverse } \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -5 & 1 & & \\ & 3 & & 1 & \\ & 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

B. Vektor- und Matrixnormen

Vektornormen

Um den "Abstand" zwischen zwei Vektoren anzugeben, gibt es verschiedene Möglichkeiten:

Beispiel

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 2.34 \\ 1.36 \\ -2.40 \end{pmatrix} \text{ sei eine "Näherung" für } \vec{b} = \begin{pmatrix} 2.38 \\ 1.31 \\ -2.42 \end{pmatrix}, \text{ dann ist } \vec{a}-\vec{b} = \begin{pmatrix} -0.04 \\ -0.05 \\ 0.02 \end{pmatrix}.$$

1. Möglichkeit: Der Betrag $|\vec{a}-\vec{b}| = \sqrt{(0.04^2+0.05^2+0.02^2)} = 0.067$ ist ein "Maß" für die "Güte der Näherung" $\vec{a}$ für $\vec{b}$. Wir schreiben hierfür auch $\|\vec{a}-\vec{b}\|_2$. Das ist die *euklidische Norm.*
2. Möglichkeit: Die Summe der Beträge der Elemente von $\vec{a}-\vec{b}$, die mit $\|\vec{a}-\vec{b}\|_1$ bezeichnet wird: $0.04+0.05+0.02 = 0.11$; sie ist ebenfalls ein "Maß" für die Güte der Näherung. Dieses ist die *Spaltensummennorm.*
3. Möglichkeit: Der Betrag der betragsgrößten Komponente von $\vec{a}-\vec{b}$, der mit $\|\vec{a}-\vec{b}\|_\infty$ bezeichnet wird: 0.05. Das ist die *Maximumnorm.*

Eigenschaften:

Es gilt für jede dieser Normen die Dreiecksungleichung $\|\vec{a}+\vec{b}\| \leq \|\vec{a}\|+\|\vec{b}\|$.

Es gilt für jeden n-dimensionalen Vektor $\vec{x}$: $\|\vec{x}\|_\infty \leq \|\vec{x}\|_2 \leq \|\vec{x}\|_1 \leq n\cdot\|\vec{x}\|_\infty$.

Beispiel

Ein lineares Gleichungssystem wurde gelöst und man erhielt als Näherung für die Lösung $\vec{x}$ den Vektor

$$\vec{x}_o = \begin{pmatrix} 71.326 \\ 39.753 \\ 88.232 \end{pmatrix}.$$

1. Wenn man weiß, daß $\|\vec{x}-\vec{x}_o\|_\infty \leq 0.003$ gilt, dann weicht *keine* der Komponenten der Näherung $\vec{x}_o$ um mehr als 0.003 von denen der (unbekannten) Lösung ab, es liegt also die erste Komponente von $\vec{x}$ zwischen 71.326−0.003 und 71.326+0.003, die zweite zwischen 39.753−0.003 und 39.753+0.003 und die dritte zwischen 88.232−0.003 und 88.232+0.003.
2. Wenn man weiß, daß $\|\vec{x}-\vec{x}_o\|_1 \leq 0.007$ gilt, dann ist die *Summe* der Differenzen der Komponenten höchstens 0.007. Wenn die erste Komponente um mindestens 0.005 abweicht, bleibt für die anderen noch eine Abweichung um höchstens 0.002.
3. Bei $\|\vec{x}-\vec{x}_o\|_2$ handelt es sich um den "normalen" (euklidisch genannten) Abstand der durch $\vec{x}_o$ und $\vec{x}$ bestimmten Punkte (Satz von Pythagoras).

Matrixnormen

Zu jeder der drei genannten *Vektor*-Normen gehört eine *Matrix-Norm.* Ist $A = (a_{ik})$ eine $m\times n$-Matrix, so sind:

1. $\|A\|_1 = \max \{ \sum_{i=1}^{m} |a_{ik}| \ / \ 1\leq k\leq n\}$: *Spaltensummennorm*

Beispiel

Für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 3 \\ 5 & 5 & -4 \\ 0 & 8 & -5 \end{pmatrix}$$

ist $\|A\|_1 = \max\{7\ ,\ 16\ ,\ 12\} = 16$ (16 ist die Summe der Beträge der 2. Spalte).

2. $\|A\|_2$ bezeichnet die Wurzel aus dem größten Eigenwert der symmetrischen Matrix $U:=A^T A$ und wird *Spektralnorm* genannt. Auch $A \cdot A^T$ ist möglich, beide Matrizen haben dieselben Eigenwerte. Es ist dann übrigens

$$\|A\|_2 = \max\{\ \|A \cdot \vec{x}\|_2\ /\ \|\vec{x}\|_2 = 1\ \}.$$

Alle Eigenwerte von U sind reell und nicht-negativ.

Beispiel

Für die Matrix A aus obigem Beispiel ist

$$A^T = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ -3 & 5 & 8 \\ 3 & -4 & -5 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad A^T A = \begin{pmatrix} 29 & 19 & -14 \\ 19 & 98 & -69 \\ -14 & -69 & 50 \end{pmatrix}.$$

(Man sieht, daß $A^T A$ symmetrisch ist.) Die Matrix $A^T A$ hat die Eigenwerte 0.93859, 24.46546 und 151.59684, die Wurzel aus dem größten unter ihnen ist 12.31247 (alle Werte auf diese Stellen gerundet). Also ist $\|A\|_2 = 12.31247$.

3. $\|A\|_\infty = \max\{\ \sum_{k=1}^{n} |a_{ik}|\ /\ 1 \le i \le m\ \}$: *Zeilensummennorm*

Beispiel

Die obige Matrix A hat die Zeilensummennorm $\|A\|_\infty = \max\{8\ ,\ 14\ ,\ 13\} = 14$ (14 ist Summe der Beträge der Elemente der 2. Zeile von A).

Es gilt für jede dieser Matrixnormen die "Dreiecksungleichung": $\|A+B\| \le \|A\| + \|B\|$.

Ferner gilt die *Submultiplikativität*: $\|A \cdot B\| \le \|A\| \cdot \|B\|$, das ist Kennzeichen einer *Matrix*-Norm.

Zusammenhang zwischen Vektor- und Matrixnorm:

Für das Produkt einer *Matrix* A mit einem *Vektor* $\vec{x}$ gilt $\|A\vec{x}\| \le \|A\| \cdot \|\vec{x}\|$, wobei jeweils für Matrix und Vektor *dieselbe* Norm (Index 1, 2 oder ∞) zu nehmen ist. Diese Eigenschaft nennt man *Verträglichkeit* von Matrix- und Vektornorm. Aus diesem Grunde bezeichnet man diese sich so entsprechenden Normen häufig mit dem gleichen Symbol.

C. Konditionszahl einer Matrix

Ist A eine quadratische reguläre (d.h. invertierbare) Matrix, so heißt die Zahl $\mathrm{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ die *Konditionszahl* von A. Dabei bedeuten die beiden Normen eine der drei behandelten (1, 2 oder ∞, die auch als Index, z.B. $\mathrm{cond}_\infty(A)$ angefügt wird).

Beispiel

Für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -14 & 12 & -2 \\ 2 & 0 & -2 \\ 2 & -4 & 2 \end{pmatrix} \text{ ist } A^{-1} = \begin{pmatrix} -1/4 & -2/4 & -3/4 \\ -1/4 & -3/4 & -4/4 \\ -1/4 & -4/4 & -3/4 \end{pmatrix}.$$

Ihre Zeilensummennormen sind $\|A\|_\infty$=28 und $\|A^{-1}\|_\infty$=2, daher ist $\text{cond}_\infty(A) = 28 \cdot 2 = 56$.

Es ist $\|A\|_1$=18, $\|A^{-1}\|_1$=2.5 und daher $\text{cond}_1(A)=18\cdot 2.5=45$.

Die Berechnung von $\text{cond}_2(A)$ ist erheblich mühseliger:

Man berechnet (beachten, daß $A^{T^{-1}}=(A^{-1})^T$ gilt)

$$A^T A = \begin{pmatrix} 204 & -176 & 28 \\ -176 & 160 & -32 \\ 28 & -32 & 12 \end{pmatrix}, \quad A^{T^{-1}} A^{-1} = \frac{1}{16} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 9 & 10 \\ 9 & 29 & 30 \\ 10 & 30 & 34 \end{pmatrix}$$

und findet die größten Eigenwerte dieser beiden Matrizen mit einem der Verfahren zur Eigenwert-Berechnung (z.B. von Mises-Iteration): $\lambda = 364.4166$ der ersten und $\lambda = 4.0340$ der zweiten Matrix. Daher sind die 2-Normen dieser Matrizen (Wurzeln daraus):

$\|A^T A\|_2$=19.0897, $\|A^{T^{-1}} A^{-1}\|_2$=2.0085 und $\text{cond}_2(A)=19.0897\cdot 2.0085 \approx 38.3415$.

2. Der Gauß-Algorithmus

Der Gauß-Algorithmus dient

a) zur Lösung linearer Gleichungssysteme und ist die mehr algorithmische Form des bekannten Gaußschen Eliminationsverfahrens,

b) zur Berechnung der LR-Zerlegung (Links-Rechts) einer Matrix,

c) zur Berechnung der Determinante einer quadratischen Matrix.

Gegeben sei ein lineares Gleichungssystem $A\vec{x} = \vec{b}$, wobei A eine $m \times n$-Matrix ist.

a) Das Gleichungssystem wird durch Elimination (äquivalent) so umgeformt, daß ein Gleichungssystem $B\vec{y} = \vec{c}$ entsteht, dabei hat die $m \times n$-Matrix B die Form

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1r} & * & * & \cdots & * \\ & b_{22} & \cdots & b_{2r} & * & * & \cdots & * \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & b_{rr} & * & * & \cdots & * \\ & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Hier stehen leere Plätze für Nullen. Dieses Gleichungssystem kann man dann "rückwärts" durch Einsetzen ab r-ter Gleichung lösen, wenn es lösbar ist (i.a. hat es dann mehrere, unendlich viele Lösungen). Bei quadratischen Systemen (m=n) wird oft r=n sein. Hierbei geht $\vec{y}$ aus $\vec{x}$ durch Vertauschungen der Komponenten hervor (oft ist $\vec{y}=\vec{x}$, z.B. bei natürlicher und partieller Pivotwahl).

b) Es werden je eine Matrix L ("links"), R ("rechts") und P ("Permutation") berechnet, wobei L eine untere Dreiecksmatrix mit nur 1 auf der Diagonale ist, R eine obere Dreiecksmatrix und P eine Permutationsmatrix sind, für die gilt

$P \cdot A = L \cdot R$ (L-R d.h. "links-rechts-Zerlegung" von $P \cdot A$).

$P \cdot A$ entsteht also aus A durch Vertauschung der Zeilen (was auf die Lösung des Gleichungssystems keinen Einfluß hat, da das lediglich eine andere Reihenfolge der Gleichungen bedeutet; vielfach ist P=E). $P \cdot A$ ist also als Produkt von zwei Dreiecksmatrizen dargestellt.

Häufig wird die Zerlegung als LU-Zerlegung bezeichnet: 'Lower-Upper'.

c) Ist A quadratisch, so ist detA das Produkt der Diagonalelemente von R, wenn keine Permutationen gemacht wurden, sonst gilt $|\det A| = |\det R|$.

<u>Beispiel 1</u>

Man löse das Gleichungssystem $A\vec{x} = \vec{b}$, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & -1 & 3 \\ 4 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 12 & 8 & 8 & 1 & 0 \\ 4 & 4 & 2 & -3 & 6 \\ 8 & 5 & 4 & 1 & 6 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 13 \\ 1 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

Ferner bestimme man eine LR-Zerlegung von A (falls möglich).

Lösung:

Die erste Gleichung wird der Reihe nach mit 1, 3, 1 und 2 multipliziert und jeweils von der 2., 3., 4. und 5. Gleichung (Zeile) *subtrahiert*, um x_1 aus diesen Gleichungen zu eliminieren. Diese Faktoren sind die Quotienten a_{i1}/a_{11} für i=2,3,4,5, also der Reihe nach 4/4, 12/4, 4/4 und 8/4 (wichtig für die mehr formale Berechnung mit einem Programm auf einem Rechner). Wir schreiben nur die Koeffizientenmatrix und etwas abgesetzt den entstehenden Vektor $\vec{b}$ auf, hinter den Gleichungen notieren wir die genannten Faktoren 1, 3, 1 und 2 (schreiben also diese Faktoren nicht hinter die *erste* Gleichung, wie man es oft übersichtlich macht, man beachte auch, daß *subtrahiert* wird; leere Plätze stehen für Nullen:

$$\begin{array}{ccccc|c|c}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 & \\
 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 & 1 \\
 & 2 & 5 & 4 & -9 & 4 & 3 \\
 & 2 & 1 & -2 & 3 & -2 & 1 \\
 & 1 & 2 & 3 & 0 & 3 & 2
\end{array}$$

In der ersten Spalte stehen also unter der 4 (dem *Pivot-Element*) Nullen.

Nun verfahren wir analog mit dem "Rest", indem das 2-, 2- bzw. 1-fache der nun zweiten Zeile (Gleichung) von den drei folgenden subtrahiert wird (die erste Zeile bleibt ungeändert). Diese Faktoren sind die Zahlen a_{i2} (i=3,4,5) dividiert durch das Pivot-Element a_{22} (jeweils in dem letzten System - man wird, wenn man mit einem Computer arbeitet, für die neu entstehenden Matrizen keine neuen Variablen vereinbaren sondern die alte Matrix "überschreiben"). Dann lautet das entstehende System

$$\begin{array}{ccccc|c|cc}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 & & \\
 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 & 1 & \\
 & & 1 & 2 & -3 & 2 & 3 & 2 \\
 & & -3 & -4 & 9 & -4 & 1 & 2 \\
 & & 0 & 2 & 3 & 2 & 2 & 1
\end{array}$$

Hier haben wir hinter die vorigen Gleichungen erneut die genannten Faktoren geschrieben. Mit dem nun entstandenen System verfahren wir analog, subtrahieren also das -3-fache der 3. Zeile von der 4. und das 0-fache von der 5. Zeile:

$$\begin{array}{ccccc|c|ccc}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 & & & \\
 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 & 1 & & \\
 & & 1 & 2 & -3 & 2 & 3 & 2 & \\
 & & & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & -3 \\
 & & & 2 & 3 & 2 & 2 & 1 & 0
\end{array}$$

Im letzten Schritt subtrahieren wir das 1-fache der 4. Zeile (Gleichung) von der 5. Zeile und erhalten so das "Endschema"

$$\begin{array}{ccccc|c|cccc}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 & & & & \\
 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 & 1 & & & \\
 & & 1 & 2 & -3 & 2 & 3 & 2 & & \\
 & & & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & -3 & \\
 & & & & 3 & 0 & 2 & 1 & 0 & 1
\end{array}$$

Die Determinante von A ist $4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3 = 24$.

Das entstandene System wird nun "rückwärts" durch Einsetzen ("Rückwärts-Substitution") gelöst, man erhält der Reihe nach

$x_5 = 0,\ x_4 = 1\ ,\ x_3 = 0,\ x_2 = 0,\ x_1 = 1,$ also den Lösungsvektor

$\vec{x} = (1,0,0,1,0)^T .$

Wir schreiben $\vec{x}$ also als Spaltenvektor (^{T} deutet das an); der Grund ist, daß in Matrix-Schreibweise $A\vec{x}=\vec{b}$ die Lösung $\vec{x}$ ein Spaltenvektor ist; in bezug auf die Lösung des Gleichungssystems ist das unwesentlich.

Der Grund dafür, daß wir die Faktoren hinter den "eigentlichen" Gleichungen notiert haben, ist der Folgende: Die hier entstandene Matrix ist, wenn man ihre Diagonale durch lauter 1 ersetzt, die gesuchte Matrix L, links steht die aus A entstandene Matrix R:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 1 & 1 & & & \\ 3 & 2 & 1 & & \\ 1 & 2 & -3 & 1 & \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & -1 & 3 \\ & 1 & 2 & 1 & -3 \\ & & 1 & 2 & -3 \\ & & & 2 & 0 \\ & & & & 3 \end{pmatrix},$$

wobei leere Plätze für 0 stehen. Man prüfe nach, daß in der Tat $A = L \cdot R$ gilt (hierbei sieht man, daß obige Rechnung erneut nachvollzogen wird). Hier ist also P=E die Einheitsmatrix.

Hinweis: Der erste Schritt (also die Erzeugung der Matrix mit Nullen unter der 4 in der ersten Spalte) bedeutet in Matrix-Formulierung, daß A von *links* mit der Frobenius-Matrix

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -1 & 1 & & & \\ -3 & & 1 & & \\ -1 & & & 1 & \\ -2 & & & & 1 \end{pmatrix} \quad \text{multipliziert wird}$$

(siehe Multiplikationseigenschaften der Frobenius-Matrizen), weswegen Frobenius-Matrizen mit dem Buchstaben L (links) bezeichnet wurden.

Rechnet man mit einem Rechner, so wird man, um Platz im Arbeitsspeicher zu sparen, die Zahlen der Matrix L (bis auf die Diagonalelemente) auf den entsprechenden Plätzen der Matrix A (wo nun Nullen entstanden sind) speichern. Dann sieht das letzte Schema im Rechner so aus (ohne die rechte Seite):

$$\begin{array}{cccc|c} 4 & 2 & 1 & -1 & 3 \\ 1 & 1 & 2 & 1 & -3 \\ 3 & 2 & 1 & 2 & -3 \\ 1 & 2 & -3 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 3 \end{array}$$

Der Strich soll die Trennungslinie der Elemente der Matrizen R und L (ohne die Diagonale 1,1,1,1,1 von L) markieren.

Wäre auf der Diagonale eine 0 (und darunter nicht überall auch) entstanden, so hätte das Verfahren *so* offenbar nicht geklappt. Man sagt, wir haben das Verfahren mit *natürlicher Pivotwahl* durchgeführt (durchführen können, nicht müssen). Das folgende Beispiel zeigt, wie man im anderen Fall verfahren kann.

<u>Beispiel 2</u>

Man löse folgendes Gleichungssystem $A\vec{x} = \vec{b}$ und berechne eine LR-Zerlegung:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & -1 \\ 8 & 2 & 3 & 0 \\ 16 & 3 & 1 & 10 \\ 12 & -2 & -3 & 16 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 9 \\ 14 \\ 8 \\ -10 \end{pmatrix}$$

Lösung:

In obiger Schreibweise bekommt man

$$\begin{array}{cccc|c|c} 4 & 1 & 2 & -1 & 9 & \\ & 0 & -1 & 2 & -4 & 2 \\ & -1 & -7 & 14 & -28 & 4 \\ & -5 & -9 & 19 & -37 & 3 \end{array}$$

Hier kann man die -1 und -5 nicht mit Hilfe der 0 darüber eliminieren. Daher suche man nun in der zweiten Spalte unter der 0 eine Zahl $\neq 0$ (wenn es eine solche nicht gibt, hat man also die gewünschten Nullen und kann mit der nächsten Spalte weitermachen) und vertausche die entsprechende Zeile mit der zweiten Zeile (was einer Multiplikation mit einer Transpositionsmatrix von links entspricht, siehe dort, und auf die Lösung des *Gleichungssystems* keinen Einfluß hat, wohl aber eine andere *Matrix* entstehen läßt). Wir wählen die -1 unter der Null, vertauschen also die 2. mit der 3. Zeile; das entspricht einer Multiplikation mit der Transpositionsmatrix P_{23}: wir haben es fortan mit der Matrix $P_{23}A$ zu tun. Die Zahl -1, die dann auf der Diagonale steht, ist unser Pivot-Element.

Wir hätten ebensogut die zweite mit der vierten Gleichung vertauschen können, dann wäre die Zahl -5 Pivot-Element geworden und die Matrix $P_{24}A$ behandelt worden. Da -5 die betragsgrößte der Zahlen ist, wäre dieses Vorgehen *partielle Pivotwahl* oder *Spalten-Pivot-Wahl.*

$$\begin{array}{cccc|c|c} 4 & 1 & 2 & -1 & 9 & \\ & -1 & -7 & 14 & -28 & 4 \\ & 0 & -1 & 2 & -4 & 2 \\ & -5 & -9 & 19 & -37 & 3 \end{array}$$

Nun geht es weiter wie beschrieben, um Nullen unter der -1 zu erzeugen:

$$\begin{array}{cccc|c|cc} 4 & 1 & 2 & -1 & 9 & & \\ & -1 & -7 & 14 & -28 & 4 & \\ & & -1 & 2 & -4 & 2 & 0 \\ & & 26 & -51 & 103 & 3 & 5 \end{array}$$

Weiter mit der entstandenen -1 auf der Diagonale als Pivot-Element:

$$\begin{array}{cccc|c|ccc} 4 & 1 & 2 & -1 & 9 & & & \\ & -1 & -7 & 14 & -28 & 4 & & \\ & & -1 & 2 & -4 & 2 & 0 & \\ & & & 1 & -1 & 3 & 5 & -26 \end{array}$$

Hieraus ist das Ergebnis, die Lösung des Gleichungsstems zu berechnen:

$$x_4 = -1,\ x_3 = 2,\ x_2 = 0,\ x_1 = 1, \text{ also } \vec{x} = (1,0,2,-1)^T .$$

Eine LR-Zerlegung der Matrix A ist also nicht möglich, wir haben aber eine LR-Zerlegung der

Matrix $P \cdot A$ erhalten, also $P \cdot A = L \cdot R$, wobei (Probe) $P = P_{23}$ und

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 4 & 1 & & \\ 2 & 0 & 1 & \\ 3 & 5 & -26 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & -1 \\ & -1 & -7 & 14 \\ & & -1 & 2 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Hätte man noch einmal vertauschen müssen, wäre P das Produkt *zweier* Transpositionsmatrizen, also eine Permutationsmatrix.

Es ist noch $\det(P \cdot A) = \det(L \cdot R) = \det(R) = 4 \cdot (-1) \cdot (-1) \cdot 1 = 4$ (Produkt der Diagonalelemente von R), da $\det(P) = (-1)^1$ (eine Permutation), ist $\det A = -4$.

Bevor man ein Gleichungssystem löst, kann man es *skalieren:* Dazu dividiere man jede Gleichung durch die Summe der Beträge aller Koeffizienten dieser Zeile. Das ist besonders dann empfehlenswert, wenn die Koeffizienten unterschiedliche Größenordnung haben.

In unserem Beispiel ist die erste Gleichung durch $4+1+2+1=8$, die zweite durch $8+2+3+0=13$, die dritte durch 30 und die vierte durch 33 zu dividieren. Nach dieser *Skalierung* ist es *zeilenäquilibriert,* d.h. alle Zeilensummen (der Beträge) sind einander gleich, hier 1. Danach fährt man mit etwa partieller Pivot-Wahl fort.

Diese Skalierung führt man allerdings nicht wirklich aus, sondern benutzt im ersten Schritt als Pivot-Element das betragsgrößte der ersten Spalte nach (gedachter) Skalierung: Die erste Spalte lautet nach Skalierung 4/8, 8/13, 16/30 und 12/33, die betragsgrößte dieser Zahlen ist 8/13, also wird im Ausgangssystem die Zahl $a_{21}=8$ Pivot-Element: Zeile 1 und 2 werden vertauscht (wie betont: ohne die Zeilen wirklich zu dividieren). Der Rest ist dann analog zu rechnen.

Bei partieller Pivot-Wahl ohne Skalierung wäre $a_{31}=16$ Pivot-Element geworden. Hätte man die 1. Gleichung mit 100 multipliziert, so wäre bei partieller Pivot-Wahl diese $a_{11}=400$ Pivot-Element: Man sieht, *so* könnte man (außer Nullen) jede zur betragsgrößten machen wobei i.a. Zahlen unterschiedlicher Größenordnung entstehen.

Man kann auch in jedem Schritt das betragsgrößte Element der "Restmatrix" nach links oben, also in die Position des Pivot-Elementes auf der Diagonale bringen. Man spricht dann von *totaler Pivotwahl.* Das folgende Beispiel zeigt das.

Beispiel 3

Man berechne die Lösung des Gleichungssystems $A\vec{x}=\vec{b}$, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 & -1 \\ 2 & 8 & 3 & 0 \\ 6 & 32 & 2 & 20 \\ -2 & 12 & -3 & 16 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 9 \\ 14 \\ 16 \\ -10 \end{pmatrix}$$

unter Verwendung totaler Pivot-Wahl.

Lösung:

Pivot-Element im ersten Schritt ist die betragsgrößte Zahl der Matrix A, also 32. Um diese Zahl der 3. Zeile und 2. Spalte nach links oben zu bringen, müssen die 1. und 3. Zeile vertauscht werden (entspricht Multiplikation mit der Transpositionsmatrix P_{13} von *links* und hat keinen Einfluß auf die Lösung, da es auf die Reihenfolge der Gleichungen nicht ankommt; da wir eine LR-Zerlegung nicht suchen, notieren wir diese Vertauschung nicht) und dann die 1. mit der 2. *Spalte*. Letzteres entspricht der Multipliklation mit der Transpositionsmatrix P_{12} von *rechts*. Nach diesem letzten Schritt gehört die Variable ("Unbekannte") x_1 zur 2. und x_2 zur 1. Spalte, anders: Diese Variablen stehen nun in der Reihenfolge x_2,x_1,x_3,x_4 - das muß also im Folgenden bedacht werden. Wir notieren daher diese Vertauschung in dem Permutationsvektor (siehe bei Permutationsmatrizen) $\vec{\sigma} = (2\ 1\ 3\ 4)$, der die Reihenfolge der *Spalten* im Vergleich zur Matrix A beschreibt. Nun lautet das System

$$\begin{array}{rrrr|r} 32 & 6 & 2 & 20 & 16 \\ 8 & 2 & 3 & 0 & 14 \\ 4 & 1 & 2 & -1 & 9 \\ 12 & -2 & -3 & 16 & -10 \end{array} \qquad \vec{\sigma} = (2\ 1\ 3\ 4)$$

Nun werden mit der 32 als Pivot-Element die Zahlen darunter zu 0 gemacht (aus den entsprechenden Gleichungen x_2, das ja nun zur ersten Spalte gehört, eliminiert). Man bekommt in der üblichen Notierung (wobei wir die Faktoren, die die Frobenius-Matrix L_1 bestimmen, der Übersichtlickkeit wegen wieder dahinter schreiben):

$$\begin{array}{rrrr|rl} 32 & 6 & 2 & 20 & 16 & \vec{\sigma} = (2\ 1\ 3\ 4) \\ & 0.50000 & 2.50000 & -5.00000 & 10 & 0.25 \\ & 0.25000 & 1.75000 & -3.50000 & 7 & 0.125 \\ & -4.25000 & -3.75000 & \mathit{8.50000} & -16 & 0.375 \end{array}$$

Man erkennt, daß "krumme" Zahlen entstehen, weswegen dieses Verfahren mit totaler Pivotwahl im Falle einer Handrechnung ungeeignet erscheint; bei Benutzung eines Computers allerdings hat es viele Vorteile (der Rechner speichert die reelle Zahl 6 z.B. als +0.600000000E+001 o.ä. und rechnet *damit*). Pivot-Element ist nun 8.5 (kursiv gedruckt) als betragsgrößte Zahl im nun zu behandelnden Restsystem, sie steht als a_{44} in der 4. Zeile, 4. Spalte. Um sie nach links oben, genauer: als a_{22} an die Stelle der 0.5 (2. Zeile, 2. Spalte) zu bekommen, muß von links mit P_{24} multipliziert werden (bewirkt Vertauschung der 2. mit der 4. Zeile, aber keine Änderung des Lösungsvektors) und von rechts mit P_{24} (bewirkt Vertauschung der *Spalten* 2 und 4), womit nun die Ausgangsmatrix insgesamt von *rechts* mit der Permutationsmatrix $P_{12}P_{24}$ multipliziert wurde, zuerst die 1. und 2. Spalte, dann die (neue) 2. mit der (neuen) 4. Spalte vertauscht wurden. Hiermit wird aus der bisherigen Permutation $\vec{\sigma} = (2\ 1\ 3\ 4)$ die neue Permutation $\vec{\sigma} = (2\ 4\ 3\ 1)$ (Element an 2. und 4. Stelle vertauschen) der *Spalten*. Dann also entsteht

$$\begin{array}{rrrr|r} 32 & 20 & 2 & 6 & 16 \\ & 8.50000 & -3.75000 & -4.25000 & -16 \\ & -3.50000 & 1.75000 & 0.25000 & 7 \\ & -5.00000 & 2.50000 & 0.50000 & 10 \end{array} \qquad \vec{\sigma} = (2\ 4\ 3\ 1)$$

Nun werden mit der 8.5 als Pivot-Element dieses zweiten Gauß-Schrittes die darunter stehenden

Zahlen zu Null gemacht (wir notieren die Faktoren Übersicht wegen rechts daneben und notieren nur 5 Stellen nach dem Komma):

$$\begin{array}{rrrr|rr}
32 & 20 & 2 & 6 & 16 & \vec{\sigma} = (2\ 4\ 3\ 1) \\
 & 8.50000 & -3.75000 & -4.25000 & -16 & \\
 & & 0.20588 & -1.50000 & 0.41177 & -0.41176 \\
 & & 0.29412 & \mathit{-2.00000} & 0.58816 & -0.58824
\end{array}$$

Das Pivot-Element ist -2 (kursiv gedruckt, 4. Zeile, 4. Spalte). Um sie auf die Diagonalstelle links oben im Restsystem zu bekommen, müssen die 3. und 4. Zeile miteinander vertauscht werden (keinen Einfluß auf die Lösung) und die 3. und 4. Spalte. Damit entsteht aus der letzten Permutation $\vec{\sigma} = (2\ 4\ 3\ 1)$ die Permutation $\vec{\sigma} = (2\ 4\ 1\ 3)$. Man bekommt dann nach der Vertauschung und dem nächsten Eliminationsschritt das Endschema

$$\begin{array}{rrrr|rr}
32 & 20 & 6 & 2 & 16 & \vec{\sigma} = (2\ 4\ 1\ 3) \\
 & 8.50000 & -4.25000 & -3.75000 & -16 & \\
 & & -2.00000 & 0.29412 & 0.58824 & \\
 & & & -0.01471 & -0.02941 &
\end{array}$$

Wir haben die Faktoren für die Elimination rechts nun fortgelassen.

Dieses letzte System liefert der Reihe nach, von rückwärts gelöst, die Zahlen

$y_4 = 2,\ y_3 = 0,\ y_2 = -1,\ y_1 = 1$, also $\vec{y} = (1,-1,0,2)$.

Diese sind eine Permutation der Komponenten x_1, x_2, x_3, x_4 von $\vec{x}$.

Berechnung von $\vec{x}$

1. Möglichkeit (genau hinsehen)

   Die Komponenten von $\vec{x}$ stehen in der Reihenfolge $\vec{\sigma} = (2\ 4\ 1\ 3)$:

   An 1., 2., 3. bzw. 4. Stelle von $\vec{y}$ stehen x_2, x_4, x_1, bzw. x_3.

   Umgekehrt: x_1, x_2, x_3 bzw. x_4 stehen an 3., 1., 4. bzw. 2. Stelle in $\vec{y}$:

   $\vec{x} = (y_3, y_1, y_4, y_2)^T = (0,1,2,-1)^T$.

2. Möglichkeit (mehr formal)

   Bezeichnet P die zu $\vec{\sigma} = (2\ 4\ 1\ 3)$ gehörige Permutationsmatrix (bezieht sich immer auf die Reihenfolge der *Spalten*), so ist $P^{-1} = P^T$ (siehe Permutationsmatrizen). In P^T stehen die *Spalten* in der Reihenfolge $\vec{\tau} = (3\ 1\ 4\ 2) = \vec{\sigma}^{-1}$.

   Daher multipliziere man den Spaltenvektor $\vec{y}$ von *links* mit P^T: Die *Zeilen* (Elemente) vertauschen sich gemäß $\vec{\tau}$.

Es soll ein Beispiel für ein nicht-quadratisches Gleichungssystem vorgeführt werden:

Beispiel 4

Man berechne alle Lösungen des Gleichungssystems $A\vec{x} = \vec{b}$, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 & 6 & 1 \\ 2 & 7 & 5 & 4 & 1 \\ 4 & 11 & 7 & 12 & 3 \\ 2 & 1 & -3 & 4 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} -7 \\ 0 \\ -10 \\ -10 \end{pmatrix}.$$

Lösung:

Wir schreiben die entstehenden Schemata hin, notieren dort, wo die Nullen entstehen, die Fakoren, die zur Elimination benutzt wurden. Wenn nicht anders vermerkt, verwenden wir natürliche Pivotwahl, d.h. benutzen immer die jeweils auf der Diagonale stehende Zahl als Pivot-Element.

$$\begin{array}{ccccc|c}
2 & 4 & 2 & 6 & 1 & -7 \\
1 & 3 & 3 & -2 & 0 & 7 \\
2 & 3 & 3 & 0 & 1 & 4 \\
1 & -3 & -5 & -2 & -2 & -3
\end{array}$$

Nächster Schritt:

$$\begin{array}{ccccc|c}
2 & 4 & 2 & 6 & 1 & -7 \\
1 & 3 & 3 & -2 & 0 & 7 \\
2 & 1 & 0 & 2 & 1 & -3 \\
1 & -1 & -2 & -4 & -2 & 4
\end{array}$$

Hier wird Pivotwahl nötig: Wir vertauschen die 3. mit der 4. Zeile (entspricht Multiplikation mit der Transpositionsmatrix P_{34} von links und hat auf die Lösung des Gleichungssystem keinen Einfluß):

$$\begin{array}{ccccc|c}
2 & 4 & 2 & 6 & 1 & -7 \\
1 & 3 & 3 & -2 & 0 & 7 \\
1 & -1 & -2 & -4 & -2 & 4 \\
2 & 1 & 0 & 2 & 1 & -3
\end{array}$$

Nun ist also ein System entstanden, das von rückwärts gelöst werden kann. Dabei kann eine der beiden Variablen ("Unbekannten") x_5 oder x_4 beliebig gewählt werden (hätte etwa x_4 den Faktor 0 statt 2, so könnte man *nur* x_4 beliebig vorgeben; würde man x_5 beliebig wählen, etwa 1, so ergäbe sich die Gleichung $0 \cdot x_4 = 1$, die keine Lösung hat). Setzt man etwa $x_5 = t$, so bekommt man der Reihe nach:

$$x_5 = t, \; x_4 = (-3-t)/2, \; x_3 = 1, \; x_2 = (1-t)/3, \; x_1 = (-2+5t)/3,$$

als Vektor geschrieben

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} -2/3 \\ 1/3 \\ 1 \\ -3/2 \\ 0 \end{pmatrix} + t \cdot \begin{pmatrix} 5/3 \\ -1/3 \\ 0 \\ -1/2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Man kann auch lineare Matrix-Gleichungen $A \cdot X = B$ mit dem Gaußschen Algorithmus lösen. Der einzige Unterschied zum bisher behandelten Fall eines linearen Gleichungssystems ist, daß man mehrere rechte Seiten hat.

Ein Sonderfall ergibt sich für $B=E$ (Einheitsmatrix), dann ist X die Inverse (wenn sie existiert, A also regulär ist).

Beispiel 5

Man berechne alle Matrizen X mit AX=B, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 3 \\ 4 & -3 & 3 & 8 \\ 6 & -8 & 2 & 6 \\ 8 & -5 & 3 & 17 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -3 & -10 & 1 \\ -3 & -23 & 5 \\ -14 & -26 & -2 \\ -4 & -50 & 12 \end{pmatrix}.$$

Lösung:

Man erhält der Reihe nach bei natürlicher Pivotwahl folgende Schemata, wobei wir die Quotienten l_{ij} links auf die Plätze der a_{ij} schreiben:

1. Schritt:

$$\begin{array}{c|ccc|ccc} 2 & -2 & 1 & 3 & -3 & -10 & 1 \\ \hline 2 & 1 & 1 & 2 & 3 & -3 & 3 \\ 3 & -2 & -1 & -3 & -5 & 4 & -5 \\ 4 & 3 & -1 & 5 & 8 & -10 & 8 \end{array}$$

2. Schritt:

$$\begin{array}{cc|cc|ccc} 2 & -2 & 1 & 3 & -3 & -10 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 3 & -3 & 3 \\ 3 & -2 & 1 & 1 & 1 & -2 & 1 \\ 4 & 3 & 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{array}$$

3. Schritt:

$$\begin{array}{ccc|c|ccc} 2 & -2 & 1 & 3 & -3 & -10 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 3 & -3 & 3 \\ 3 & -2 & 1 & 1 & 1 & -2 & 1 \\ 4 & 3 & -4 & 3 & 3 & -9 & 3 \end{array}$$

Dieses ist die schematische Schreibweise für *drei* Gleichungssysteme, nämlich für die 1., die 2. und die 3. Spalte der rechten Seite, wobei die linke Seite stets dieselbe ist.

Wir bezeichnen die Elemente der 4×3-Matrix X mit x_{ij} und bekommen dann für die erste Spalte der rechten Seite:

$$x_{41} = 1, \quad x_{31} = 0, \quad x_{21} = 1, \quad x_{11} = -2$$

und analog für die 2. und 3. Spalte die Werte

$$x_{42} = -3, \quad x_{32} = 1, \quad x_{22} = 2, \quad x_{12} = 1$$

$$x_{43} = 1, \quad x_{33} = 0, \quad x_{23} = 1, \quad x_{13} = 0$$

und also als Lösung der Matrizengleichung $A\cdot X=B$

$$X = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Es ist übrigens det(A)=6 (Produkt der Diagonalelemente von R, da natürliche Pivotwahl gemacht wurde).

$$A^{-1} = \frac{1}{6}\cdot\begin{pmatrix} 158 & -32 & -25 & -4 \\ 82 & -16 & -14 & -2 \\ 10 & 2 & -2 & -2 \\ -52 & 10 & 8 & 2 \end{pmatrix}.$$

Beispiel 6

Man berechne die Inverse der folgenden Matrix A, wenn sie existiert.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 3 \\ 2 & 5 & -5 & 4 \\ 2 & 6 & -5 & 4 \\ 1 & 5 & -3 & 4 \end{pmatrix}$$

Lösung:

Wir haben also die Gleichung $A \cdot X = E$ zu lösen (E ist 4-reihige Einheitsmatrix). Das Ausgangsschema lautet demnach

$$\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 2 & -3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & -5 & 4 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & -5 & 4 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & -3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

Wir rechnen mit dem Gauß-Algorithmus und bekommen der Reihe nach:

1. Schritt:

$$\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 2 & -3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 1 & -2 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

2. Schritt:

$$\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 2 & -3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -1 & 2 & 2 & -2 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & -3 & 7 & 5 & -3 & 0 & 1 \end{array}$$

3. Schritt:

$$\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 2 & -3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -1 & 2 & 2 & -2 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 1 & -1 & 3 & -3 & 1 \end{array}$$

Hieraus berechnet man die 4 Spalten von $X = A^{-1}$, indem man die 4 Gleichungssysteme mit diesen 4 rechten Seiten löst. Man bekommt dann

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -8 & 17 & -14 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -4 & 8 & -7 & 2 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die LR-Zerlegung der Matrix A ist demnach übrigens $A = L \cdot R$:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 3 \\ 2 & 5 & -5 & 4 \\ 2 & 6 & -5 & 4 \\ 1 & 5 & -3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 2 & 2 & 1 & \\ 1 & 3 & 3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 3 \\ & 1 & 1 & -2 \\ & & -1 & 2 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Ähnlich dem Gauß-Verfahren ist das *Gauß-Jordan-Verfahren*. Bei diesem erzeugt man auch *über* dem jeweiligen Pivot-Element Nullen. Dann erhält man bei quadratischen Systemen und natürlicher Pivotwahl am Schluß statt einer Dreiecksmatrix sogar eine Diagonalmatrix. Ist letztere gleich E, so kann man die Lösung ohne Rechnung ablesen.

Wir wenden das auf das vorige Beispiel an:

1	2	-3	3	|	1	0	0	0
2	5	-5	4	|	0	1	0	0
2	6	-5	4	|	0	0	1	0
1	5	-3	4	|	0	0	0	1

Daraus mit den entsprechenden Schreibweisen (natürliche Pivotwahl)

1	2	-3	3	|	1	0	0	0	|	•
0	1	1	-2	|	-2	1	0	0	|	2
0	2	1	-2	|	-2	0	1	0	|	2
0	3	0	1	|	-1	0	0	1	|	1

Und dann ergibt sich (natürliche Pivotwahl)

1	0	-5	7	|	5	-2	0	0	|	•	2
0	1	1	-2	|	-2	1	0	0	|	2	•
0	0	-1	2	|	2	-2	1	0	|	2	2
0	0	-3	7	|	5	-3	0	1	|	1	3

Hier wurde, im Unterschied zum Gauß-Verfahren, auch von der ersten Zeile das 2-fache der zweiten Zeile subtrahiert um die 0 in der ersten Zeile zu erzeugen. So fährt man fort und erhält am Ende, wenn man noch durch die Diagonalelemente dividiert

1	0	0	0	|	-8	17	-14	3
0	1	0	0	|	0	-1	1	0
0	0	1	0	|	-4	8	-7	2
0	0	0	1	|	-1	3	-3	1

Hier steht links dann die Einheitsmatrix, rechts die Lösung, in diesem Falle die Inverse von A.

3. Gleichungssysteme mit Tridiagonalmatrix

Gegeben sei das quadratische lineare Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{s}$, wobei A eine invertierbare *Tridiagonalmatrix* ist (leere Plätze stehen für Nullen):

$$A = \begin{pmatrix} d_1 & b_1 & & & & & \\ a_2 & d_2 & b_2 & & & & \\ & a_3 & d_3 & b_3 & & & \\ & & a_4 & d_4 & b_4 & & \\ & & & \cdots\cdots & & & \\ & & & & a_{n-1} & d_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & a_n & d_n \end{pmatrix}, \quad \vec{s} = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \\ \cdot\cdot \\ s_{n-1} \\ s_n \end{pmatrix}.$$

Solche Gleichungssysteme treten, oft mit großem n, bei Interpolationsaufgaben (Splines) und bei der Numerik partieller Differentialgleichungen auf. *Nur* die $n+2\cdot(n-1)$ Zahlen d, a und b auf der Diagonale, der Sub- und Superdiagonale legen eine Tridiagonalmatrix eindeutig fest.

Es wird der Gauß-Algorithmus angewendet, nur: da schon an vielen Stellen, an die eine Null soll, eine steht, vereinfacht sich das Verfahren (man würde bei seiner formalen Anwendung die meiste Zeit damit zu tun haben, Nullen zu addieren oder mit Nullen zu multiplizieren). Man bekommt dann nach LR-Zerlegung (leere Plätze stehen für 0) das Gleichungssystem $R\vec{x}=\vec{\sigma}$, wobei:

$$R = \begin{pmatrix} \delta_1 & b_1 & & & & \\ & \delta_2 & b_2 & & & \\ & & \delta_3 & b_3 & & \\ & & & \delta_4 & b_4 & \\ & & & \cdots\cdots & & \\ & & & & \delta_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & \delta_n \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \cdot\cdot \\ \sigma_{n-1} \\ \sigma_n \end{pmatrix}.$$

Diese Zahlen berechnen sich so:

$\delta_1 = d_1, \ \sigma_1 = s_1$

$l_i = a_i/\delta_{i-1}, \ \delta_i = d_i - l_i\cdot b_{i-1}, \ \sigma_i = s_i - l_i\cdot\sigma_{i-1}$ für $i=2,3,\ldots,n$.

Aus diesen berechnet man dann die Lösung durch Rückwärtssubstitution:

$x_n = \sigma_n/\delta_n$

$x_i = (\sigma_i - b_i\cdot x_{i+1})/\delta_i$ für $i=n-1,n-2,\ldots,1$.

Auch dieses sind entsprechend "verkürzte" Formeln, die berücksichtigen, daß R oberhalb der Superdiagonale nur Nullen hat.

Beispiel 7

Das lineare Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{s}$ soll gelöst werden, wobei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & & & \\ 0.5 & 2 & 0.5 & & \\ & 0.5 & 2 & 0.5 & \\ & & 0.5 & 2 & 0.5 \\ & & & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \\ -21 \\ -6 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Leere Plätze stehen für 0.

Lösung:

Man rechnet "eigentlich" nach dem oben angegebenen Algorithmus; aber: Bei Handrechnung ist es der Gauß-Algorithmus (man wird natürlich nicht "wirklich" z.B. das 0-fache der ersten Zeile von der dritten subtrahieren).

Es ergibt sich am Schluß der Rechnung das folgende Schema, wobei wir wie in Beispiel 1 die Matrix L (ohne die 1 auf der Dagonale) zu Kontrollzwecken rechts notieren.

$$\begin{array}{ccccc|ccccc}
2 & 0 & & & & 0 & & & & \\
 & 2 & 0.5 & & & 6 & 0.25 & & & \\
 & & 1.875 & 0.5 & & -22.5 & 0 & 0.25 & & \\
 & & & 1.8667 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0.2667 & \\
 & & & & 1.8661 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2679
\end{array}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ist $(0,6,-12,0,0)^T$, wie man leicht nachrechnet.

Wir bemerken noch, daß dieses Gleichungssystem bei der Berechnung einer interpolierenden Splinefunktion zu lösen ist (siehe dort).

4. Das Verfahren von Banachiewicz

Es handelt sich um den Gauß-Algorithmus in einer "verketteten" Form, indem man nach Eliminaton einer Variablen aus *einer* der Gleichungen sofort *diese und die nächste Variable* aus der nächsten Gleichung eliminiert u.s.w. A werde als reguläre Matrix vorausgesetzt.

Wir wollen das erläutern, indem wir das Beispiel 1 erneut rechnen, um die Unterschiede zum Gauß-Algorithmus zu verdeutlichen.

Beispiel 8

Mit dem Verfahren von Banachewicz sollen die LR-Zerlegung und die Lösung von $A\vec{x}=\vec{b}$ berechnet werden.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & -1 & 3 \\ 4 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 12 & 8 & 8 & 1 & 0 \\ 4 & 4 & 2 & -3 & 6 \\ 8 & 5 & 4 & 1 & 6 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 13 \\ 1 \\ 9 \end{pmatrix}$$

Lösung:

Zum Verständnis ist es empfehlenswert, das genannte Beispiel vor Augen zu haben.

Zunächst wird (wie beim Gauß-Algorithmus) die erste Zeile hingeschrieben, dann die Quotienten a_{i1}/a_{11} für $i=2,3,...$ berechnet, diese tragen wir an die Stellen der a_{i1} (erste Spalte) ein.

Danach wird von der zweiten Zeile, auch wie beim Gauß-Algorithmus, das $a_{21}/a_{11}=4/4=1$-fache der ersten Zeile subtrahiert: es entsteht die neue zweite Zeile.

$$\begin{array}{c|ccccc|c} 4 & 2 & 1 & -1 & 3 & & 3 \\ \hline 1 & 1 & 2 & 1 & -3 & & 1 \\ 3 & * & & & & & \\ 1 & & & & & & \\ 2 & & & & & & \end{array}$$

Die Zahl $a_{31}=3$ in der ersten Spalte ist der Quotient $a_{31}/a_{11}=12/4$.

Die Zahl $a_{25}=-3$ in der zweiten Zeile ist $a_{25}-a_{21}\cdot a_{15}=0-1\cdot 3=-3$, wobei die bereits berechneten "neuen" Werte (erste Spalte) wie beschrieben bereits eingetragen und verwendet werden. Man mache sich klar, wo die beteiligten drei Zahlen stehen. Wir bemerken noch, daß die nicht ausgefüllten Plätze noch die "alten" Zahlen enthalten. Lediglich aus Gründen der besseren Erklärung schreiben wir das Schema erneut hin.

Nun werden in einem zweiten Schritt die Quotienten berechnet, die dann die Zahlen a_{i2} für $i=3,4,...$ ersetzen (also unter die mit * markierte Stelle kommen), und zwar so:

An die Stelle von z.B. a_{32} (oben mit * markiert) kommt zunächst die Zahl, die entsteht, wenn das 3-fache der ersten Zeile von der dritten subtrahiert wird; dann entsteht hier die Zahl $a_{32}-a_{31}\cdot a_{12} = 8-3\cdot 2 = 2$ (diese steht nach dem ersten Schritt des Gauß-Algorithmus auch an dieser Stelle, siehe jenes Beispiel). Um eine 0 an diese Stelle zu bekommen, d.h. x_2 aus der 3. Gleichung zu eliminieren, muß das $2/a_{22}$ = 2-fache der 2. Zeile von der 3. Zeile subtrahiert werden, daher schreiben wir diesen Quotienten an diese Stelle. Für die Zeilen darunter lauten die Quotienten, die in die 2. Spalte kommen:

4. Zeile: $(a_{42}-a_{41}\cdot a_{12})/a_{22} = (4-1\cdot 2)/1 = 2$ und

5. Zeile: $(a_{52}-a_{51}\cdot a_{12})/a_{22} = (5-2\cdot 2)/1 = 1.$

Dann werden die weiteren Zahlen der 3. Zeile eingetragen. Es ergibt sich nach diesem zweiten Schritt folgendes Schema:

$$\begin{array}{rrrrr|r}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 \\
1 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 \\
3 & 2 & 1 & 2 & -3 & 2 \\
1 & 2 & & & & \\
2 & 1 & & & &
\end{array}$$

Z.B. ist die Zahl $a_{35}=-3$ wie folgt berechnet worden:

$$a_{35} - (a_{31}\cdot a_{15} + a_{32}\cdot a_{25}) = 0 - (3\cdot 3+2\cdot(-3)) = -3.$$

(Hierbei entsteht die Zahl $0 - 3\cdot 3$ nach dem ersten Schritt (3. Zeile minus 3·erste Zeile), der hier nicht hingeschrieben wird, dann wird im zweiten Schritt das 2-fache der zweiten Zeile von der dritten subtrahiert.) Auch hier mache man sich klar, wo die beteiligten Zahlen, die in der Klammer stehen, im Schema stehen: Es handelt sich in der Klammer um das *Skalarprodukt* der ersten 2 Elemente der *3. Zeile* mit denen der

5. Spalte, die vom "alten" a_{35} subtrahiert werden:

$$\begin{array}{l|l|c|l}
 & & \text{5. Spalte:} & \\
 & & 3 & \\
 & & -3 & \\
\hline
\text{3. Zeile:} & 3 \quad 2 & * & \text{von } a_{35}=0 \text{ subtrahieren}
\end{array}$$

Das nun entstandene Schema ist bis hier dasselbe, das beim Gauß-Algorithmus nach zwei Schritten entstanden ist (nur: wir haben hier eben nicht die letzten Zeilen hingeschrieben und die Quotienten nicht hinter das System sondern auf die "frei" werdenden Stellen geschrieben).

Um nun x_3 aus den Gleichungen 4 und 5 zu eliminieren, d.h. an Stelle der Zahlen a_{i3} ($i=4$ und 5) Nullen zu erzeugen, muß für

a_{43} das $[a_{43}-(a_{41}\cdot a_{13}+a_{42}\cdot a_{23})]/a_{33} = [2-(1\cdot 1+2\cdot 2)]/1 = -3$-fache

der 3. Zeile von der 4. Zeile subtrahiert werden; diese Zahl kommt an die Stelle a_{43}. Darunter der Quotient $[4-(2\cdot 1+1\cdot 2)]/1 = 0$. Dann wird von der "alten" 4. Zeile subtrahiert das 1-fache der ersten, das 2-fache der 2. und das (-3)-fache der 3. Zeile. Man erhält nach diesem Schritt das Schema:

$$\begin{array}{rrrrr|r}
4 & 2 & 1 & -1 & 3 & 3 \\
1 & 1 & 2 & 1 & -3 & 1 \\
3 & 2 & 1 & 2 & -3 & 2 \\
1 & 2 & -3 & 2 & 0 & 2 \\
2 & 1 & 0 & & &
\end{array}$$

Die Zahl $a_{45}=0$ ist also gleich $6-(1\cdot 3+2\cdot(-3)+(-3)\cdot(-3))$; man mache sich klar, wo diese Zahlen im Schema stehen:

$$\begin{array}{lccc|c|l} & & & & \text{5. Spalte:} & \\ & & & & 3 & \\ & & & & -3 & \\ & & & & -3 & \\ \cline{2-5} \text{4. Zeile:} & 1 & 2 & -3 & * & \text{von } a_{45}=6 \text{ subtrahieren} \end{array}$$

um zu erkennen, daß von der *"alten" 6 (kursiv)* ein Skalarprodukt subtrahiert wird.

Die Zahl 2 (rechte Seite unten) ist 1 (alte b_4) $-$ $(1\cdot3+2\cdot1+(-3)\cdot2)$; auch hier ist es nützlich, sich klarzumachen, wo diese Zahlen stehen (b_4-Skalarprodukt). Nun stimmt das Schema, soweit hingeschreiben, mit dem nach dem 3.Eliminationsschritt beim Gauß-Algorithmus überein.

Im letzten Schritt wird die letzte Zeile ergänzt:

An die Stelle a_{54} kommt der Qutotient

$$[a_{54} - (a_{51}\cdot a_{14}+a_{52}\cdot a_{24}+a_{53}\cdot a_{34})]/a_{44} = [1-(2\cdot(-1)+1\cdot1+0\cdot2)]/2 = 1,$$

Dann erhält man, wenn man die letzte Zeile berechnet, folgendes Schema:

4	2	1	-1	3	3
1	1	2	1	-3	1
3	2	1	2	-3	2
1	2	-3	2	0	2
2	1	0	1	3	0

Hier sind a_{55} = 1 (alte a_{55}) $-$ $(2\cdot3+1\cdot(-3)+0\cdot(-3)+1\cdot0)$ = 3 und der untere Wert auf der rechten Seite: 9 (=alte b_5) $-$ $(2\cdot3+1\cdot1+0\cdot2+1\cdot2)$ = 0.

Damit ist die Umformung des Gleichungssystems beendet.

Wir betonen noch einmal: Man schreibt das Schema natürlich nicht immer wieder neu hin (wir taten das nur, um das Verfahren besser erklären zu können), sondern ergänzt es stets in der Reihenfolge "Spalte runter, Zeile nach rechts".

Es entsteht dasselbe Schema wie bei Verwendung des Gauß-Algorithmus, siehe dort. Auch hier deutet die Linie die Trennung der Quotienten in der Matrix L von der Matrix R an. Man beachte noch, daß, um L aus dieser Matrix der Quotienten zu erhalten, noch lauter 1 auf die Diagonale zu schreiben sind.

Wir bemerken noch, daß wir mit natürlicher Pivotwahl ausgekommen sind. Wenn man nicht mit natürlicher Pivotwahl auskommt (weil auf der Diagonale eine 0 entsteht) oder man etwa totale Pivotwahl verwenden will, wird die Rechnung etwas unübersichtlicher.

Wir fassen zusammen:

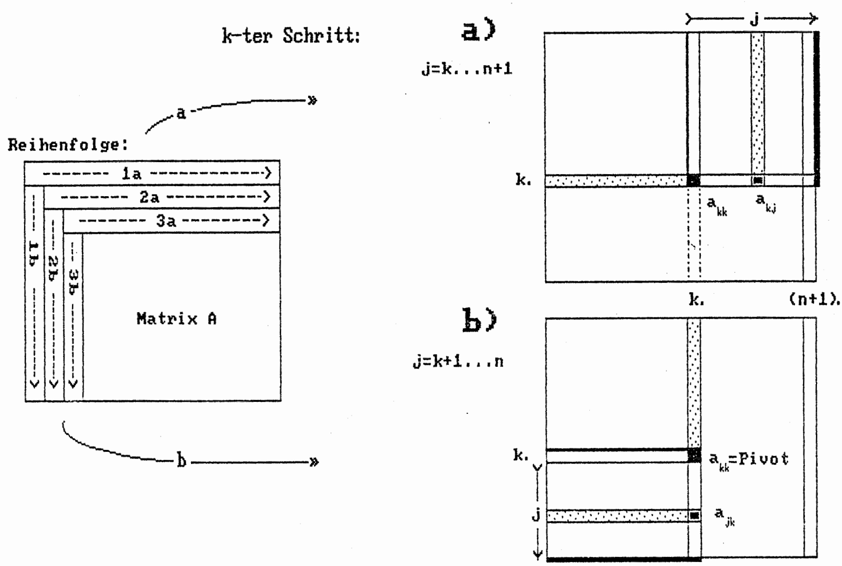
Das System wird sukzessive Zeile für Zeile geändert. Dabei werden *zuerst die Quotienten* l_{ij} (links von der Trennungslinie unterhalb des Pivotelementes) berechnet und dort notiert und *danach der Rest der nächsten Zeile* und die rechte Seite. Wenn man das programmiert, wird man zweckmäßig die rechte Seite mit $a_{i,n+1}$ (im Beispiel $a_{i,6}$) bezeichnen und nach der Formel

$$a_{ij} - (a_{i1}\cdot a_{1j}+a_{i2}\cdot a_{2j}+ \dots + a_{i,i-1}\cdot a_{i-1,j})$$

rechnen, die dann auch auf die rechte Seite anzuwenden ist. Bei den links stehenden Zahlen

l_{ij} (i>j) ist durch das jeweilige Pivotelement a_{jj} auf der Diagonale zu teilen.
Wenn natürliche Pivotwahl nicht möglich ist, wird die Sache etwas unübersichtlicher, wenn man die Zahlen nicht wirklich vertauscht, wie beim Gauß-Algorithmus, sondern an ihren Plätzen stehen läßt. Man rechnet nach folgenden Formeln (die rechte Seite wird als $a_{k,n+1}$ bezeichnet):

> Für k=1,2,...,n:
>
> a) Zeile nach rechts:
>
> a_{kj}(neu) <= {a_{kj} − (k-te Zeile × j-te Spalte)} für j=k,k+1,...,n,n+1
>
> b) Spalte nach unten:
>
> a_{jk}(neu) <= {a_{jk} − (j-te Zeile × k-te Spalte)}/a_{kk} für j=k+1,...,n



Beispiel 9

Mit dem Verfahren von Banachiewicz soll eine LR-Zerlegung der Matrix A berechnet werden und das Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{b}$ gelöst werden:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 3 \\ 4 & -3 & 3 & 8 \\ 6 & -8 & 2 & 6 \\ 8 & -5 & 3 & 17 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} -10 \\ -23 \\ -26 \\ -50 \end{pmatrix}.$$

Lösung:

Eine Rechnung ergibt am Ende folgendes Schema:

$$\begin{array}{cccc|c} 2 & -2 & 1 & 3 & -10 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & -3 \\ 3 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 4 & 3 & -4 & 3 & -9 \end{array}$$

Berechnungsbeispiele (vergleiche auch anhand der Skizzen):

♣ Zuerst wird die erste Zeile hingeschrieben.

♣ Dann werden die *unter* $a_{11}=2$ stehenden Quotienten berechnet. Beispiel: $a_{31}=3$ ergibt sich als $a_{31}/a_{11}=6/2$. Dann werden die übrigen Zahlen der 2. Zeile berechnet.
Beispiel: $a_{24}=2$ ergibt sich so: $a_{24}-a_{21}\cdot a_{14}$ = 8 (alt) $- 2\cdot 3 = 2$.
Die Zahl -3 auf der rechten Seite ist b_2 (besser mit a_{25} zu bezeichnen) $- a_{21}\cdot b_1$ (besser mit a_{15} zu bezeichnen) = -23 (alt) $- 2\cdot(-10)$.

♣ Dann werden die *unter* $a_{22}=1$ stehenden Quotienten berechnet. Beispiel: $a_{42}=3$ ergibt sich so:
$[a_{42} - (a_{41}\cdot a_{12})]/a_{22} = [-5 - (4\cdot(-2))]/1$.
Dann die übrigen Zahlen der 3. Zeile. Beispiel: Die Zahl -2 auf der rechten ergibt sich so: $[b_3$ (besser a_{35} nennen) $- (a_{31}\cdot b_1+a_{32}\cdot b_2)] = [-26 - (3\cdot(-10)+(-2)\cdot(-3))]$ (-26 ist die noch alte dort stehende rechte Seite, -10 und -3 die inzwischen schon neu berechneten Werte).

♣ Es folgen schließlich die Quotienten *unter* $a_{33}=1$ (nur noch einer), der ergibt sich so:
$[a_{43} - (a_{41}\cdot a_{13}+a_{42}\cdot a_{23})]/a_{33} = [3 - (4\cdot 1+3\cdot 1)]/1$.
Dann werden die übrigen Elemente der 4. Zeile berechnet. Beispiel: $a_{44}=3$ ergibt sich so:
17 (alte Zahl dort) $- (4\cdot 3+3\cdot 2+(-4)\cdot 1)$.

Damit ist $A=L\cdot R$ die LR-Zerlegung von A, wobei

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 3 & -2 & 1 & \\ 4 & 3 & -4 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 3 \\ & 1 & 1 & 2 \\ & & 1 & 1 \\ & & & 3 \end{pmatrix}.$$

Aus dem "gestaffelten" System $R\vec{x}=\vec{b}$ (dem neuen $\vec{b}$) bekommt man durch rückwärts einsetzen (von unten gerechnet) die Lösung

$x_4 = -3,\ x_3 = 1,\ x_2 = 2,\ x_1 = 1$, also $\vec{x} = (1,2,1,-3)^T$.

5. QR-Zerlegung einer Matrix (auch QU-Zerlegung)

Die QR-Zerlegung der reellen $n \times n$-Matrix A ist ihre Darstellung als Produkt $A=Q \cdot R$ einer *orthogonalen Matrix* Q (d.h. $Q^T \cdot Q=E$: Q und Q^T sind invers; äquivalent: Jede Spalte hat den Betrag 1 und je zwei verschiedene Spalten sind orthogonal - daher der Name) mit einer oberen Dreiecksmatrix R. Die QR-Zerlegung ist eindeutig, wenn die Matrix regulär ist und die Vorzeichen aller Diagonalelemente von R vorgeschrieben werden (etwa > 0), was wir nicht tun.

Die Berechnung von Q und R aus $A=A^{(0)}$ erfolgt in (n-1) Schritten:

$$A^{(1)} = H_1 A^{(0)}, \quad A^{(2)} = H_2 A^{(1)}, \ldots, \quad R = A^{(n-1)} = H_{n-1} A^{(n-2)}, \quad Q = H_1 H_2 \cdots H_{n-1}.$$

Hat A weniger als n Spalten, etwa m, so werden R und Q aus nur m Schritten berechnet (siehe am Ende des folgenden Beispiels).

Die Berechnung der Matrizen $A^{(k)}$ und H_k aus $A^{(k-1)}$ erfolgt in drei Schritten (im Folgenden sind die $a_{..}$ die Elemente der *vorigen* Matrix $A^{(k-1)}$):

a) Berechnung eines Vektors $\vec{h} = (h_1, \ldots, h_n)^T$:

Sind alle Zahlen unter dem Diagonalelement a_{kk} bereits 0, so gehe zur nächsten Matrix (setze also $A^{(k)}=A^{(k-1)}$ und $H_k=E$). Andernfalls berechne

$$t = \sqrt{a_{kk}^2 + a_{k+1,k}^2 + \ldots + a_{nk}^2} \quad \text{(die } a_{..} \text{ der Matrix } A^{(k-1)}\text{, k. Spalte)}$$

Wenn $a_{kk} \geq 0$ ist, setze $s = -t$ andernfalls $s = t$.

$$h_1 = h_2 = \ldots = h_{k-1} = 0$$

$$h_k = \sqrt{0.5 \cdot (1 - a_{kk}/s)}$$

$$w = \frac{-1}{2 \cdot h_k \cdot s}$$

$$h_j = w \cdot a_{jk} \quad \text{für } j=k+1,\ldots,n$$

Dann ist übrigens $|\vec{h}|=1$.

b) Berechnung der sogenannten *Householder-Matrix* H_k:

$$H_k = E - 2 \cdot \vec{h} \cdot \vec{h}^T \quad (\text{dann ist } H_k = H_k^{-1})$$

$\vec{h} \cdot \vec{h}^T$ ist Spalten- mal Zeilenvektor, sogenanntes *dyadisches Produkt.*

c) Berechnung von $A^{(k)}=H_k \cdot A^{(k-1)}$

$A^{(k)}$ hat dann unter den Diagonalelementen der ersten k Spalten Nullen und stimmt in den ersten k-1 Zeilen und Spalten mit der vorigen Matrix $A^{(k-1)}$ überein.

Diese Multiplikation entspricht einer "Drehung" der Spaltenvektoren von $A^{(k-1)}$ so, daß insbesondere die (k+1)-te bis n-te Komponente der k-ten Spalte 0 werden und die Spalten 1 bis k-1 ungeändert bleiben. "Drehung" erhält insbesondere die Länge jedes Spaltenvektors.

Wenn man das Gleichungssystem $A\vec{x}=\vec{b}$ lösen will, berechne man $\vec{x}$ aus $R\vec{x}=Q^T \vec{b}$ durch Rückwärtssubstitution (diese Gleichung folgt aus $QR\vec{x}=\vec{b}$ wegen $A=Q \cdot R$ und $Q^T \cdot Q=E$, was $Q^{-1}=Q^T$ impliziert).

Beispiel 10

Man berechne die QR-Zerlegung von A und löse dann mit dem QR-Verfahren $A\vec{x}=\vec{b}$:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -2 & 3 \\ -1 & 4 & -1 & 6 \\ 1 & -4 & -1 & -4 \\ 2 & 0 & 5 & -4 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 12 \\ -16 \\ 9 \end{pmatrix}$$

Lösung:

1. Berechnung von H_1 aus $A^{(0)}=A$ (k=1 in den Formeln)

a) Berechnung von $\vec{h}$

$s = +\sqrt{(-1)^2+(-1)^2+1^2+2^2} = 2.64575$ (Zahlen der ersten Spalte von A; Plus-Zeichen, weil $a_{11} = -1 < 0$ ist)

$$h_1 = \sqrt{0.5\cdot(1-(-1)/2.64575)} = 0.830050$$

$$w = \frac{-1}{2\cdot 0.830050\cdot 2.64575} = -0.227676$$

$h_2 = -0.227676\cdot(-1)$, $h_3 = -0.227676\cdot 1$, $h_4 = -0.227676\cdot 2$ (die Faktoren −1, 1 bzw. 2 von w stehen in der k=1. Spalte), also

$\vec{h} = (0.830050, 0.227676, -0.227676, -0.455352)^T$.

b) Householder-Matrix H_1 in diesem Schritt

$$H_1 = \begin{pmatrix} -0.377964 & -0.377964 & 0.377964 & 0.755929 \\ -0.377964 & 0.896327 & 0.103673 & 0.207345 \\ 0.377964 & 0.103673 & 0.896327 & -0.207345 \\ 0.755929 & 0.207345 & -0.207345 & 0.585310 \end{pmatrix}$$

Dazu ist $\vec{h}\cdot\vec{h}^T$ zu berechnen (Zeilen mal Spalten, je eine: *dyadisches Produkt):*

$$(\,0.830050 \quad 0.227676 \quad -0.227676 \quad -0.455352\,) = \vec{h}^T$$

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} 0.830050 \\ 0.227676 \\ -0.227676 \\ -0.455352 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0.688983 & 0.188982 & -0.188982 & -0.377965 \\ 0.188982 & 0.051836 & -0.051836 & -0.103673 \\ -0.188982 & -0.051836 & 0.051836 & 0.103673 \\ -0.377965 & -0.103673 & 0.103673 & 0.207345 \end{pmatrix} = \vec{h}\cdot\vec{h}^T$$

Diese Matrix ist mit 2 zu multiplizieren und dann von E zu subtrahieren.

c) Matrix $A^{(1)}$ ist das Produkt

$$A^{(1)} = H_1\cdot A^{(0)} = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 & -7.937254 \\ & 2.792655 & 0.792655 & 3.000000 \\ & -2.792655 & -2.792655 & -1.000000 \\ & 2.414690 & 1.414690 & 2.000000 \end{pmatrix}.$$

Sie hat in der ersten Spalte (k=1) unter dem Diagonalelement nur Nullen.

2. Berechnung von H_2 und $A^{(2)}$ aus $A^{(1)}$ (k=2 in den Formeln)

a) Berechnung von $\vec{h}$

$s = -\sqrt{2.792655^2+(-2.792655)^2+2.414690^2} = -4.629100$ (2. Spalte von $A^{(1)}$; Minus-Zeichen, weil $a_{22} = 2.792655 \geq 0$ ist)

$$h_1 = 0, \quad h_2 = \sqrt{0.5\cdot(1-2.792655/(-4.629100))} = 0.895344$$

$$w = \frac{-1}{2\cdot 0.895344\cdot(-4.629100)} = 0.120638,$$

$h_3 = 0.120638\cdot(-2.792655) = -0.336900$, $h_4 = 0.120638\cdot 2.414690 = 0.291303$

daher ist $\vec{h} = (0\ ,\ 0.895344\ ,\ -0.336900\ ,\ 0.291303)^T$.

b) Householder-Matrix in diesem Schritt ist $H_2 = E-2\cdot\vec{h}\cdot\vec{h}^T =$

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1.000000 & & & \\ & -0.603282 & 0.603282 & -0.521633 \\ & 0.603282 & 0.772997 & 0.196280 \\ & -0.521633 & 0.196280 & 0.830285 \end{pmatrix} \quad \text{(Leerplätze für 0).}$$

c) Die Matrix $A^{(2)}$ ist das Produkt (Leerplätze für Nullen, die entstehen *sollen)*

$$A^{(2)} = H_2\cdot A^{(1)} = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 & -7.937254 \\ & -4.629100 & -2.900903 & -3.456495 \\ & & -1.402845 & 1.429409 \\ & & 0.212980 & -0.100607 \end{pmatrix}.$$

Man beachte, daß die erste Zeile und Spalte von $A^{(1)}$ unverändert blieben.

3. Berechnung von H_3 und $A^{(3)}$ aus $A^{(2)}$ (k=3 in obigen Formeln; letzter Schritt)

a) Berechnung von $\vec{h}$:

$s = +\sqrt{(-1.402845)^2+0.212980^2} = 1.418920$ (3. Spalte von $A^{(2)}$, + weil $a_{33}<0$)

$h_1 = h_2 = 0$, $h_3 = \sqrt{0.5\cdot(1-(-1.402845)/1.41892)} = 0.997164$

$w = -1/(2\cdot 0.997164\cdot(1.418920) = -0.353383$

$h_4 = -0.353383\cdot(-0.212980) = -0.075264$

Also $\vec{h} = (0\ ,\ 0\ ,\ 0.997164\ ,\ -0.075264)^T$.

b) Householder-Matrix in diesem Schritt (Leerplätze Null)

$$H_3 = \begin{pmatrix} 1.000000 & & & \\ & 1.000000 & & \\ & & -0.988671 & 0.150100 \\ & & 0.150100 & 0.988671 \end{pmatrix}$$

c) Matrix $A^{(3)}$, die die gesuchte obere Dreiecksmatrix R ist, ist

$$R = A^{(3)} = H_3\cdot A^{(2)} = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 & -7.937254 \\ & -4.629100 & -2.900903 & -3.456495 \\ & & 1.418920 & -1.428317 \\ & & & 0.115087 \end{pmatrix}.$$

Man beachte, daß die ersten zwei Zeilen und Spalten sich nicht änderten; ferner, daß jede Spalte von R denselben Betrag wie die entsprechende von A hat.

Die orthogonale Matrix Q ist das Produkt der H:

$$Q = H_1\cdot H_2\cdot H_3 = \begin{pmatrix} -0.377964 & 0.061721 & -0.075175 & 0.920697 \\ -0.377964 & -0.586353 & -0.695365 & -0.172631 \\ 0.377964 & 0.586353 & -0.714158 & 0.057544 \\ 0.755929 & -0.555492 & -0.028190 & 0.345261 \end{pmatrix}$$

Es ist $Q^{-1}=Q^T$. Q ist nicht symmetrisch, obwohl die Householder-Matrizen H es sind (Produkte symmetrischer Matrizen sind nicht notwendig symmetrisch) aber:

Jede Spalte von Q hat den Betrag 1, je zwei verschiedene Spalten sind orthogonal.

Nun zur Lösung des Gleichungssystems. Es ist $\vec{x}$ aus $R\vec{x}=Q^T\vec{b}$ zu berechnen. Es ist

$Q^T\vec{b} = (-3.779645,-21.417305,2.828443,0.115087)^T$ und daher lautet es schematisch

$$\begin{array}{cccc|c} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 & -7.937254 & -3.779645 \\ & -4.629100 & -2.900903 & -3.456495 & -21.417305 \\ & & 1.418920 & -1.428317 & 2.828443 \\ & & & 0.115087 & 0.115087 \end{array}$$

Links steht R, rechts $Q^T \vec{b}$. Die Lösung von $A\vec{x}=\vec{b}$ ist hieraus durch Rückwärtssubstitution (also von unten) zu berechnen und lautet auf 6 Stellen gerundet $(-1.000000, 2.000000, 3.000000, 1.000000)^T$ (exakte Lösung ist $(-1,2,3,1)^T$).

Wir wollen die QR-Zerlegung der folgenden Matrix berechnen:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -2 \\ -1 & 4 & -1 \\ 1 & -4 & -1 \\ 2 & 0 & 5 \end{pmatrix}$$

Es ist dieselbe, wie im obigen Beispiel, allerdings nur die ersten drei Spalten. Daher lautet die erste Householder-Matrix H_1 genauso, wie dort (sie hängt ja *nur* von den Zahlen der ersten Spalte von $A^{(0)}=A$ ab). Also ist

$$A^{(1)} = H_1 \cdot A^{(0)} = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 \\ & 2.792655 & 0.792655 \\ & -2.792655 & -2.792655 \\ & 2.414690 & 1.414690 \end{pmatrix}$$

Es ist (bis auf die fehlende letzte Spalte) dieselbe, wie in obigem Beispiel. Daher ist auch die folgende Householder-Matrix dieselbe wie dort und die neue Matrix $A^{(2)}$ lautet ebenso, wie dort, lediglich die letzte Spalte fehlt. Auch im letzten Schritt entsteht wieder dieselbe Householder-Matrix. Dann lautet die entstehende Matrix $R=A^{(3)}$

$$R = A^{(3)} = H_3 \cdot A^{(2)} = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 & 4.535574 \\ & -4.629101 & -2.900903 \\ & & 1.418920 \\ 0.000000 & 0.000000 & 0.000000 \end{pmatrix}$$

Die Transformationsmatrix Q ist das Produkt der drei Householder-Matrizen:

$$H = H_3 \cdot H_2 \cdot H_1 = \begin{pmatrix} -0.377964 & 0.061721 & -0.075175 & 0.920697 \\ -0.377964 & -0.586353 & -0.695365 & -0.172631 \\ 0.377964 & 0.586353 & -0.714158 & 0.057544 \\ 0.755929 & -0.555492 & -0.028190 & 0.345261 \end{pmatrix}$$

Es ist dann $A=Q \cdot R$. R besteht "oben" aus einer Dreiecksmatrix, darunter Nullen.

Nimmt man folgende aus den ersten beiden Spalten bestehende Matrix:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 4 \\ 1 & -4 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

so hat man nur die ersten *zwei* Multiplikationen mit Householder-Matrizen durchzuführen, um die Matrix R zu berechnen. Dann lauten R und Q

$$R = \begin{pmatrix} 2.645751 & -3.401680 \\ & -4.629101 \\ 0.000000 & 0.000000 \\ 0.000000 & 0.000000 \end{pmatrix}$$

$$Q = H_2 \cdot H_1 = \begin{pmatrix} -0.377964 & 0.061721 & 0.212520 & 0.898982 \\ -0.377964 & -0.586353 & 0.661575 & -0.275049 \\ 0.377964 & 0.586353 & 0.714705 & -0.050304 \\ 0.755929 & -0.555492 & 0.079695 & 0.337118 \end{pmatrix}$$