

# Algorithmen und Datenstrukturen (für ET/IT)

Wintersemester 2012/13

Dr. Tobias Lasser

Computer Aided Medical Procedures  
Technische Universität München



## Programm heute

7 Fortgeschrittene Datenstrukturen

8 Such-Algorithmen

9 Graph-Algorithmen

10 Numerische Algorithmen

Matrizen

Lineare Gleichungen

3

## Lineare Gleichungen

### Lineare Gleichung

Eine **lineare Gleichung** hat die Form

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b,$$

wobei  $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$  die **Unbekannten** sind, und die  $a_1, \dots, a_n, b \in \mathbb{R}$  Konstanten.

- Schreibweise mit **Skalarprodukt**:

$$\langle a, x \rangle = b$$

oder auch

$$a^T x = b$$

mit  $a = (a_j) \in \mathbb{R}^n$ ,  $x = (x_j) \in \mathbb{R}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}$ .

## Lineares System

### Lineares System

Ein **lineares System** bzw. **lineares Gleichungssystem** ist eine endliche Menge von linearen Gleichungen mit Unbekannten  $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ :

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n & = & b_m \end{array}$$

mit Konstanten  $(a_{ji}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $(b_i) \in \mathbb{R}^m$ .

- wir betrachten hier meist den **quadratischen** Fall mit  $n$  Gleichungen und  $n$  Unbekannten

4

5

## Lineares System

- Matrix-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

- Kurz-Notation mit Matrix:

$$Ax = b$$

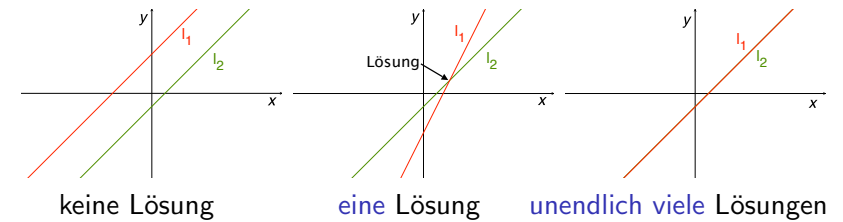
mit  $A = (a_{ji}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b = (b_j) \in \mathbb{R}^m$  und Unbekannten  $x = (x_i) \in \mathbb{R}^n$ .

## Beispiel: Lineares System

- Zwei Geraden in der Ebene ( $\mathbb{R}^2$ ):

$$(l_1) \quad a_1x + b_1y = c_1 \quad (a_1, b_1) \neq (0, 0)$$

$$(l_2) \quad a_2x + b_2y = c_2 \quad (a_2, b_2) \neq (0, 0)$$



6

7

## Lineares System: Eigenschaften

Sei  $Ax = b$  lineares System mit  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  und  $x \in \mathbb{R}^n$ .

- Ein lineares System hat immer entweder **keine Lösung**, **eine Lösung** oder **unendlich viele Lösungen**.
- Ist  $m < n$ , so heißt das lineare System **unterbestimmt**.
- Ist  $m > n$ , so heißt das lineare System **überbestimmt**.
- Wir betrachten im weiteren den Fall  $m = n$  ( $A$  quadratisch).

## Lineare Systeme: Anwendungen

- Kalibrierung von Kameras
  - z.B. für Augmented Reality
- Registrierung von Bilddaten
- Segmentierung von Bilddaten
- Objekt-Detektierung und -Tracking
- Modelle für Finanzmärkte, Populationsbiologie
- Tomographische Rekonstruktion

8

9

## Lösen von linearen Systemen

### Inverse Matrix

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  quadratische Matrix. Falls ein  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  existiert mit

$$AB = BA = I_n$$

(wobei  $I_n$  die  $n \times n$  Einheitsmatrix ist), dann heißt  $A$  **invertierbar** und wir nennen  $B =: A^{-1}$  das **Inverse** von  $A$ .

Existiert  $A^{-1}$ , so heißt  $A$  **invertierbar**.

- Ist  $Ax = b$  lineares System mit  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  invertierbar, dann ist

$$x = A^{-1}b$$

die **Lösung** des linearen Systems. Diese Lösung ist **eindeutig**.

10

## Ansätze zum Lösen linearer Systeme

Gegeben sei lineares System  $Ax = b$  mit  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$  und  $x \in \mathbb{R}^n$ .

- direktes Lösen über **Inverse**  $A^{-1}$ 
  - numerisch oft nicht stabil
  - sehr effizient (besonders falls für mehrere  $b$  gelöst wird)
- Lösen über **Zerlegung** von  $A$  (z.B.  $A = LU$ )
  - numerisch stabil
  - sehr effizient (besonders falls für mehrere  $b$  gelöst wird)
- **iterative Algorithmen**, schrittweise Annäherung an Lösung
  - besonders geeignet für sehr grosse  $n$
  - auch geeignet falls keine Lösung existiert, berechnet dann z.B. Approximation

$$\min \|Ax - b\|_2^2$$

12

## Invertierbarkeit von Matrizen

**Problem 1:** wann ist eine Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  invertierbar?

- man findet explizit ein Inverses  $A^{-1}$ 
  - für kleine Matrizen geeignet (z.B.  $2 \times 2$ )
- $\det(A) \neq 0$
- $\ker(A) = \{0\}$
- $\text{rank}(A) = n$
- $Ax = 0$  hat nur die triviale Lösung  $x = 0$

**Problem 2:** falls  $A$  invertierbar, wie findet man das Inverse  $A^{-1}$ ?

- Berechnung mit Gauss-Jordan Elimination
- Umweg über Zerlegungen von  $A$  (z.B. LU-Zerlegung)
- **generell:** Berechnung der Inversen meist numerisch nicht stabil

11

## Gauss Elimination

Sei  $Ax = b$  lineares System mit  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$  und  $x \in \mathbb{R}^n$ .

- **Gauss-Elimination:** Überführung der Matrix  $A$  in **Dreiecksform** durch **elementare Zeilenumformungen**
- **Gauss-Jordan-Elimination:** Überführung der Matrix  $A$  in **Diagonalform** durch **elementare Zeilenumformungen**
- **Elementare Zeilenumformungen:**
  - Vielfaches einer Zeile zu einer anderen Zeile addieren
  - zwei Zeilen vertauschen
  - Vielfaches einer Zeile berechnen
- für lineare Systeme: Gauss-Elimination auf erweiterter Matrix

$$(A|b) = \left( \begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

13

## Gauss Elimination: Beispiel

$$2x + y - z = 8 \quad (G_1)$$

$$-3x - y + 2z = -11 \quad (G_2)$$

$$-2x + y + 2z = -3 \quad (G_3)$$

$$\left( \begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 8 \\ -3 & -1 & 2 & -11 \\ -2 & 1 & 2 & -3 \end{array} \right) \xrightarrow{G_2 + \frac{3}{2}G_1} \left( \begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 8 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ -2 & 1 & 2 & -3 \end{array} \right)$$

$$\xrightarrow{G_3 + G_1} \left( \begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 8 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 5 \end{array} \right) \xrightarrow{G_3 + (-4)G_2} \left( \begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 8 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{array} \right)$$

$$\xrightarrow{G_1/2, G_2 \cdot 2, G_3 \cdot (-1)} \left( \begin{array}{ccc|c} 1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{array} \right)$$

Lösung nun durch **Rücksubstitution**:  $z = -1$ ,  $y = 3$  und  $x = 2$

14

## Berechnung der Inversen mit Gauss-Jordan Elimination

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

- Bilde erweiterte Matrix

$$(A|I_n) = \left( \begin{array}{ccc|ccc} a_{11} & \cdots & a_{n1} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & 0 & \cdots & 1 \end{array} \right)$$

wobei  $I_n$  die  $n \times n$  Identitätsmatrix ist.

- Führe Gauss-Jordan Elimination für  $A$  aus (linker Teil) bis auf  $I_n$  reduziert, repliziere elementare Zeilenumformungen für  $I_n$  (rechter Teil).
- Am Ende entspricht rechter Teil  $A^{-1}$ .

15

## Günstige Matrix-Formen

Sei  $Ax = b$  lineares System mit  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $x, b \in \mathbb{R}^n$ .

- **A diagonal**: Lösung kann abgelesen werden

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix} x = b$$

- **A obere Dreiecksmatrix**: Lösung durch **Rückwärts-Substitution**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix} x = b$$

- **A untere Dreiecksmatrix**: Lösung durch **Vorwärts-Substitution**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} x = b$$

## Rückwärts-Substitution

Lineares System in **oberer Dreiecksform**:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{21}x_2 + \dots + a_{1,n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{22}x_2 + \dots + a_{2,n-1}x_{n-1} + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n &= b_{n-1} \\ a_{n,n}x_n &= b_n \end{aligned}$$

**Rückwärts** nacheinander nach  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_1$  auflösen:

$$x_i = \left( b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$$

**Aufwand**:  $n^2$  arithmetische Operationen (FLOPs)

16

17

## Vorwärts-Substitution

Lineares System in unterer Dreiecksform:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n-1,1}x_1 + a_{n-1,2}x_2 + \dots + a_{n-1,n-1}x_{n-1} &= b_{n-1} \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{n,n-1}x_{n-1} + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

Vorwärts nacheinander nach  $x_1, x_2, \dots, x_n$  auflösen:

$$x_i = \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$$

Aufwand:  $n^2$  FLOPs

18

## Zerlegungen von Matrizen: LUP

LUP Zerlegung:

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  invertierbar.
- Dann gibt es eine untere Einheitsdreiecksmatrix  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , eine obere Dreiecksmatrix  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  sowie eine Permutationsmatrix  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , so daß

$$PA = LU.$$

- Aufwand:  $\sim \frac{2n^3}{3}$  FLOPs
- Lösung von  $Ax = b$ : betrachte  $PAx = Pb \Leftrightarrow LUx = Pb$ ,
  - löse  $Lz = Pb$  mit Vorwärts-Substitution nach  $z$  auf
  - löse  $Ux = z$  mit Rückwärts-Substitution nach  $x$  auf

20

## Zerlegungen von Matrizen: Cholesky

Cholesky Zerlegung:

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  symmetrisch ( $A^T = A$ ) und positiv definit ( $\langle x, Ax \rangle > 0$  für alle  $x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$ ).
- Dann gibt es eine untere Dreiecksmatrix  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit strikt positiven Diagonalelementen, so daß

$$A = LL^T.$$

- Aufwand:  $\sim \frac{n^3}{3}$  FLOPs
- Lösung von  $Ax = b$ : betrachte  $LL^T x = b$  und
  - löse  $Lz = b$  mit Vorwärts-Substitution nach  $z$  auf
  - löse  $L^T x = z$  mit Rückwärts-Substitution nach  $x$  auf

19

## Zerlegungen von Matrizen: QR

QR Zerlegung:

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  invertierbar.
- Dann gibt es eine orthogonale Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ( $Q^{-1} = Q^T$ ) und eine obere Dreiecksmatrix  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit positiven Diagonaleinträgen, so daß

$$A = QR.$$

- Aufwand:  $\sim \frac{2n^3}{3}$  FLOPs
- Lösung von  $Ax = b$ : löse  $Rx = Q^T b$  mit Rückwärts-Substitution nach  $x$  auf

21

## Zerlegungen von Matrizen: SVD

Singular Value Decomposition (SVD):

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .
- Dann existiert eine Matrix  $U \in \mathbb{R}^{m \times n}$  mit  $U^T U = I_n$ , eine orthogonale Matrix  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ( $V^{-1} = V^T$ ) sowie eine diagonale Matrix  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit nicht-negativen Diagonalelementen in monoton fallender Reihenfolge  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$ , so daß


$$A = U \Sigma V^T.$$

Die  $\sigma_i$  heißen **Singulärwerte** von  $A$ .

- **Aufwand:**  $2mn^2 + 2n^3$  FLOPs (kann je nach Implementation höher sein)
- **Lösen von  $Ax = b$ :** (funktioniert nur falls alle  $\sigma_i \neq 0$ !)

$$x = A^{-1}b = (U \Sigma V^T)^{-1}b = V \Sigma^{-1} U^T b$$

## Anwendungs-Beispiel

 separate Präsentation

22

23

## Zusammenfassung

7 Fortgeschrittene Datenstrukturen

8 Such-Algorithmen

9 Graph-Algorithmen

10 Numerische Algorithmen

Matrizen

Lineare Gleichungen

24