

Algorithmen und Datenstrukturen (für ET/IT)

Sommersemester 2016

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

2

What is the matrix?

Was ist eine Matrix?

- Anordnung von Zahlen $(a_{ij}) \subset \mathbb{R}$ in einem $m \times n$ Muster:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} =: A$$

- Element des Vektorraumes $\mathbb{R}^{m \times n}$

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

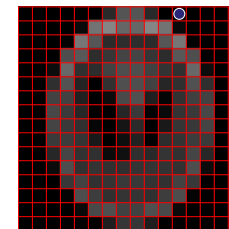
- Lineare Abbildung $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit

$$f(x) = Ax$$

wobei A $m \times n$ Matrix.

Beispiel: Anwendung von Matrizen

- Adjazenzmatrix von Graphen
 - effizienter als Adjazenzlisten für dichte Graphen (viele Kanten)
 - erlaubt analytische Operationen wie Laplace-Operator/Eigenwerte
- Bilder im Computer: gespeichert als Matrix



3

4

Speicherung von Matrizen

Speicherung als sequentielle Liste / Array:

- **row-major:** Zeilen werden zuerst durchlaufen

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow [a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{21}, a_{22}, a_{23}, a_{31}, a_{32}, a_{33}]$$

- **column-major:** Spalten werden zuerst durchlaufen

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow [a_{11}, a_{21}, a_{31}, a_{12}, a_{22}, a_{32}, a_{13}, a_{23}, a_{33}]$$

Matrix-Operationen

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $A = (a_{ji})$, $B = (b_{ji})$ und $\lambda \in \mathbb{R}$.

- **Addition:**

$$A + B = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & \cdots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix}$$

Komplexität: $\Theta(mn)$ arithmetische Operationen (FLOPs)

- **Skalarmultiplikation:**

$$\lambda A = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \cdots & \lambda a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{m1} & \cdots & \lambda a_{mn} \end{pmatrix}$$

Komplexität: $\Theta(mn)$ arithmetische Operationen (FLOPs)

5

6

Matrix-Operationen (Fortsetzung)

Seien $A = (a_{ji}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x = (x_i) \in \mathbb{R}^n$ und $B = (b_{ji}) \in \mathbb{R}^{n \times r}$.

- **Matrix-Vektor-Multiplikation:**

$$A \cdot x = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n \end{pmatrix}$$

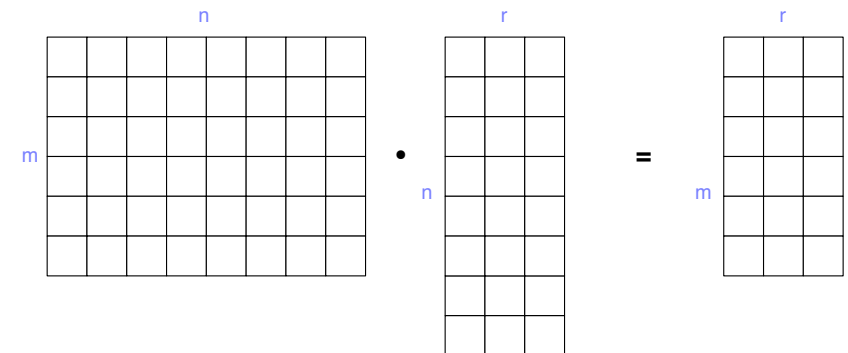
Komplexität: $\Theta(mn)$ arithmetische Operationen (FLOPs)

- **Matrix-Matrix-Multiplikation:**

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + \cdots + a_{1n}b_{n1} & \cdots & a_{11}b_{1r} + \cdots + a_{1n}b_{nr} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{11} + \cdots + a_{mn}b_{n1} & \cdots & a_{m1}b_{1r} + \cdots + a_{mn}b_{nr} \end{pmatrix}$$

→ ...

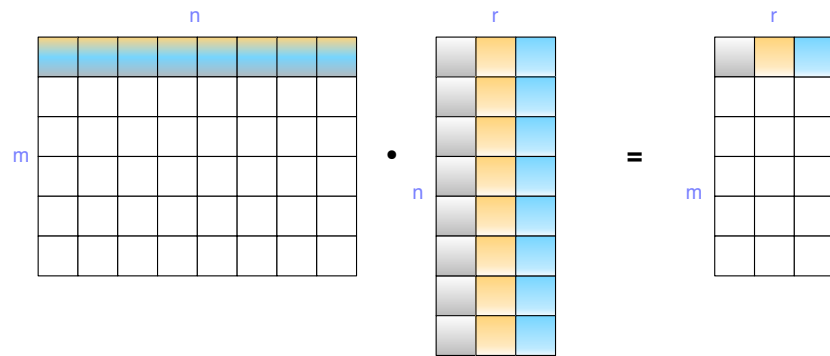
Matrix-Multiplikation



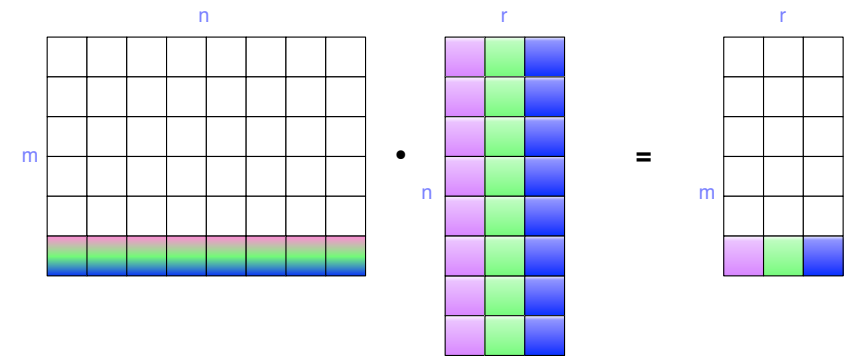
7

8

Matrix-Multiplikation 2



Matrix-Multiplikation 3



9

10

Matrix-Multiplikation: Komplexität

Seien $A = (a_{ji}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $B = (b_{ji}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (quadratisch).

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + \dots + a_{1n}b_{n1} & \dots & a_{11}b_{1n} + \dots + a_{1n}b_{nn} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}b_{11} + \dots + a_{nn}b_{n1} & \dots & a_{n1}b_{1n} + \dots + a_{nn}b_{nn} \end{pmatrix}$$

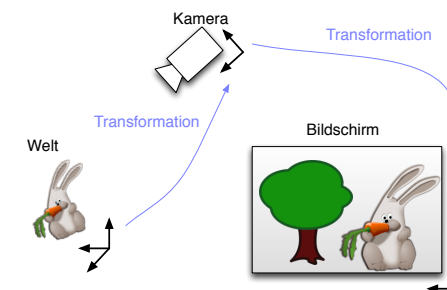
Komplexität:

- pro Eintrag: n Multiplikationen, $n - 1$ Additionen
- insgesamt n^2 Einträge
- $A \cdot B$ also n^3 Multiplikationen und $n^2(n - 1)$ Additionen
- Komplexität: $\Theta(n^3)$ arithmetische Operationen (FLOPs)

Beispiel: Anwendung von Matrix-Multiplikation

- Wechsel von Koordinaten-Systemen können als Matrix-Vektor-Multiplikation dargestellt werden
 - Matrix heisst hier auch **Transformation**
- mehrere Wechsel hintereinander können mittels Matrix-Matrix-Multiplikation zu einer Transformation zusammengefasst werden

Beispiel: Augmented Reality



11

12

Matrix-Multiplikation: Strassen-Algorithmus

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit n 2er-Potenz ($n = 2^k$), $n > 1$.

- Divide & Conquer Ansatz zur Matrizen-Multiplikation
- A, B aufteilen in vier $n/2 \times n/2$ Matrizen:

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{11} & \mathbf{b}_{12} \\ \mathbf{b}_{21} & \mathbf{b}_{22} \end{pmatrix}$$

- Produkt $A \cdot B$ berechnen als:

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11}\mathbf{b}_{11} + \mathbf{a}_{12}\mathbf{b}_{21} & \mathbf{a}_{11}\mathbf{b}_{12} + \mathbf{a}_{12}\mathbf{b}_{22} \\ \mathbf{a}_{21}\mathbf{b}_{11} + \mathbf{a}_{22}\mathbf{b}_{21} & \mathbf{a}_{21}\mathbf{b}_{12} + \mathbf{a}_{22}\mathbf{b}_{22} \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{a}_{ik}\mathbf{b}_{kj}$ ist selbst Matrix-Matrix-Produkt
- rekursiv aufteilen bis 1×1 Produkt
- Komplexität: immer noch $\Theta(n^3)$

13

Matrix-Matrix-Multiplikation

Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- naiver Algorithmus: $\Theta(n^3)$
- Strassen-Algorithmus (1969): $\Theta(n^{2.807})$
 - weniger numerisch stabil als naiver Algorithmus
 - n muss 2er-Potenz sein
 - benötigt deutlich mehr Speicher als naiver Algorithmus
- Coppersmith-Winograd Algorithmus (1987): $O(n^{2.376})$
 - erst praktikabel für Größen, die mit heutigen Computern nicht bearbeitet werden können
 - es existieren verbesserte Varianten (2011) mit $O(n^{2.3727})$

15

Strassen-Algorithmus

- Berechne:

$$\mathbf{q}_1 = (\mathbf{a}_{11} + \mathbf{a}_{22}) \cdot (\mathbf{b}_{11} + \mathbf{b}_{22})$$

$$\mathbf{q}_2 = (\mathbf{a}_{21} + \mathbf{a}_{22}) \cdot \mathbf{b}_{11}$$

$$\mathbf{q}_3 = \mathbf{a}_{11} \cdot (\mathbf{b}_{12} - \mathbf{b}_{22})$$

$$\mathbf{q}_4 = \mathbf{a}_{22} \cdot (\mathbf{b}_{21} - \mathbf{b}_{11})$$

$$\mathbf{q}_5 = (\mathbf{a}_{11} + \mathbf{a}_{12}) \cdot \mathbf{b}_{22}$$

$$\mathbf{q}_6 = (\mathbf{a}_{21} - \mathbf{a}_{11}) \cdot (\mathbf{b}_{11} + \mathbf{b}_{12})$$

$$\mathbf{q}_7 = (\mathbf{a}_{12} - \mathbf{a}_{22}) \cdot (\mathbf{b}_{21} + \mathbf{b}_{22})$$

- Dann ist:

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_4 - \mathbf{q}_5 + \mathbf{q}_7 & \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_5 \\ \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4 & \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3 - \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_6 \end{pmatrix}$$

- Komplexität: $\Theta(n^{\lg 7}) = \Theta(n^{2.807})$

14

Programm heute

- 7 Fortgeschrittene Datenstrukturen
- 8 Such-Algorithmen
- 9 Graph-Algorithmen
- 10 Numerische Algorithmen
 - Matrizen
 - Lineare Gleichungen

16

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).

21

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**.

23

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

22

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. 2×2)
- $\det(A) \neq 0$
- $\ker(A) = \{0\}$
- $\text{rank}(A) = n$
- $Ax = 0$ 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

24

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

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

25

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 $x = 2$

27

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
 - Komplexität: $\Theta(n^3)$
- Gauss-Jordan-Elimination: Überführung der Matrix A in Diagonalform durch elementare Zeilenumformungen
 - Komplexität: $\Theta(n^3)$
- 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

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

26

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} .

28

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

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

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

29

Rückwärts-Substitution

Lineares System in oberer Dreiecksform:

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

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)

30

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

31

32

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

33

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 σ_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 $\sigma_i \neq 0$!)

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

35

Zerlegungen von Matrizen: LUP

LUP Zerlegung:

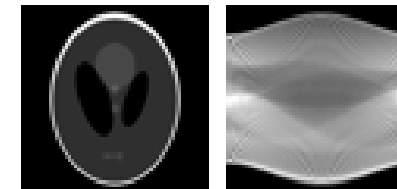
- Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar.
- Dann gibt es eine untere Einheitsdreiecksmatrix $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, eine obere Dreiecksmatrix $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie eine Permutationsmatrix $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so daß

$$PA = LU.$$

- 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

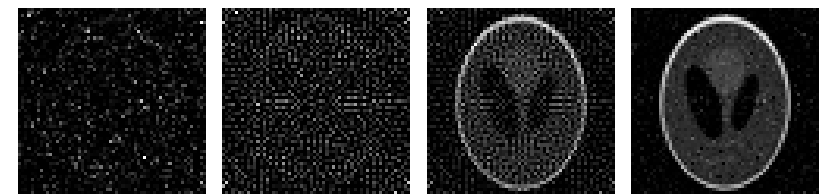
34

Anwendungs-Beispiel: Tomographie



Original

Messungen



Gauss-Elimination

QR Zerlegung

LUP Zerlegung

SVD

36

Zusammenfassung

7 Fortgeschrittene Datenstrukturen

8 Such-Algorithmen

9 Graph-Algorithmen

10 Numerische Algorithmen

Matrizen

Lineare Gleichungen