

# Algorithmen und Datenstrukturen (für ET/IT)

Sommersemester 2018

Dr. Stefanie Demirci

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

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

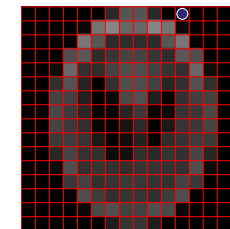
- Lineare Abbildung  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  mit

$$f(x) = Ax$$

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:**

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

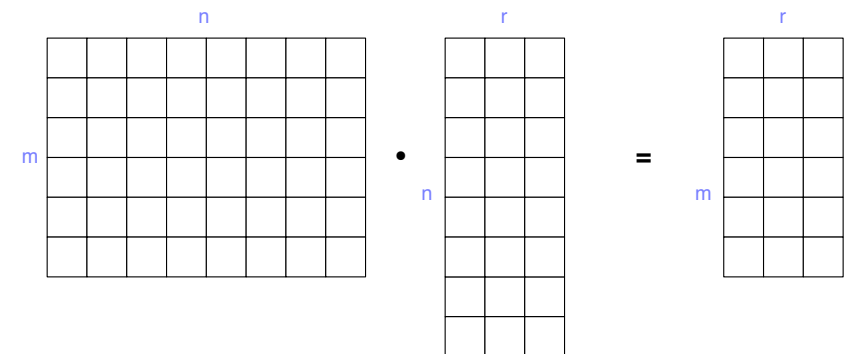
Komplexität:  $\Theta(mn)$  arithmetische Operationen (FLOPs)

- **Matrix-Matrix-Multiplikation:**

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

→ ...

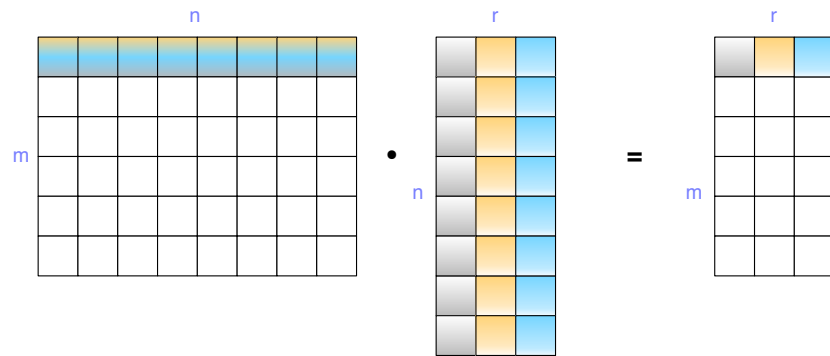
## Matrix-Multiplikation



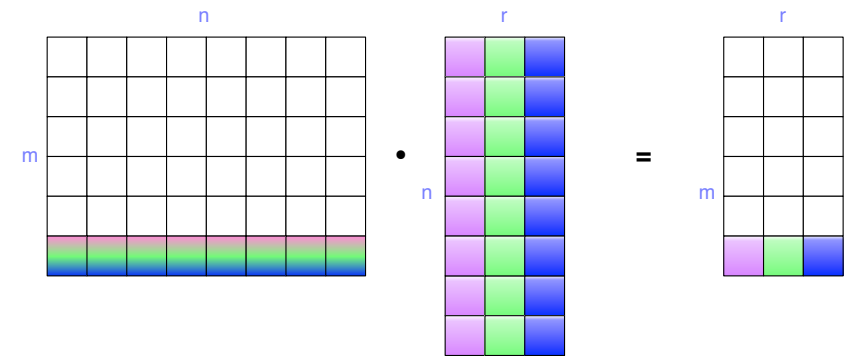
7

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).

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

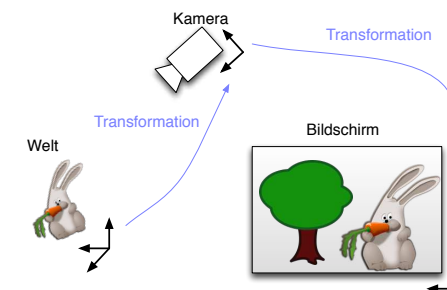
Komplexität:

- 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  $1 \times 1$  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.  $2 \times 2$ )
- $\det(A) \neq 0$
- $\ker(A) = \{0\}$
- $\text{rank}(A) = n$
- $Ax = 0$  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

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

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

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

35

## Zerlegungen von Matrizen: LUP

### LUP Zerlegung:

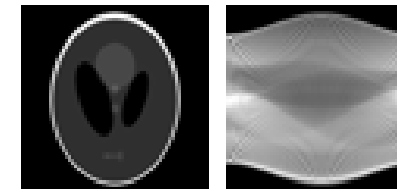
- Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  invertierbar.
- Dann gibt es eine untere Einheitsdreiecksmatrix  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , eine obere Dreiecksmatrix  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  sowie eine Permutationsmatrix  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , so daß

$$PA = LU.$$

- 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

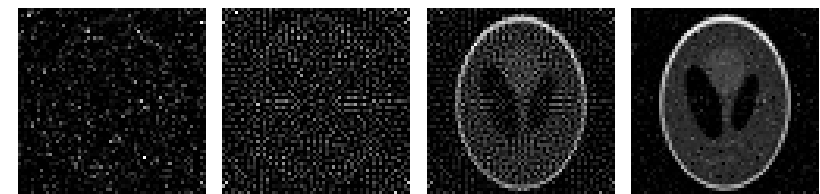
34

## 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