Matlab - Einführungskurs

zur Vorlesung *Einführung in die Numerische Mathematik*

Übungsaufgaben Datum: 14.11.2006, 15.11.2006

Aufgabe 12 (Kontrollstrukturen, M-files)
Schreiben Sie ein Programm `cholesky` zur Lösung eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$ mit der symmetrischen, reellen, positiv definiten (n, n) Matrix A in den drei Schritten

$$A = LL^t\ , \qquad Ly = b\ , \qquad L^t x = y\ .$$

Das Programm soll folgende Punkte erfüllen:

- Es soll die Dimension n eingegeben werden können.
- Es soll eine Matrix A eingegeben werden können.
- Weiterhin soll ein Lösungvektor b eingegeben werden.
- Die Lösung x des Gleichungssystems soll ausgegeben werden.
- Setzen Sie voraus, dass das Programm nur auf Matrizen angewandt wird, die einen vollen Rang haben. D.h. Sie müssen nicht überprüfen, ob das Gleichungssystem lösbar ist. Weiterhin sei die Matrix A als positiv definit vorausgesetzt. Wenn das Programm prinzipiell läuft, können Sie Kontrollen für Symmetrie und positive Definitheit einbauen.
- Testen Sie ihr Programm anhand des Beispiels

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 1 & 3 & 0 \\ -2 & 3 & 11 & 3 \\ -2 & 0 & 3 & 14 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -10 \\ 11 \\ 49 \\ 63 \end{pmatrix}$$

Es gilt nach der Vorlesung:

Satz 1 *Sei A positiv definite (n, n) Matrix. Dann existiert genau eine linke untere Dreiecksmatrix L mit positiven Diagonalelementen, so dass*

$$A = LL^t \tag{1}$$

gilt. (1) heißt Cholesky-Zerlegung und ist in $\frac{1}{6}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ Operationen berechenbar. Lineare Gleichungssysteme $Ax = LL^t x = b$ werden dann durch Lösung der Systeme $Ly = b$ (Vorwärtseinsetzen) und $L^t x = y$ (Rückwärtseinsetzen) berechnet.

Allgemeine Vorgehensweise bei der Cholesky-Zerlegung:

Sei A symmetrisch positiv definit. Dann ist

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & l_{nn} \end{pmatrix} = LL^t$$

Vergleichen wir A mit LL^t so ergibt sich spaltenweise:

$$
\begin{array}{ll}
a_{11} = l_{11}^2 & \Rightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}} \\
a_{21} = l_{21} l_{11} & \Rightarrow l_{21} = a_{21}/l_{11} \\
a_{31} = l_{31} l_{11} & \Rightarrow l_{31} = a_{31}/l_{11} \\
\quad\vdots & \quad\vdots \\
a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2 & \Rightarrow l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} \\
a_{32} = l_{31} l_{21} + l_{32} l_{22} & \Rightarrow l_{32} = (a_{32} - l_{31} l_{21})/l_{22} \\
\quad\vdots & \quad\vdots \\
a_{33} = l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 & \Rightarrow l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{31}^2} \\
\quad\vdots & \quad\vdots
\end{array}
$$

und allgemein für das Element

$$
\begin{aligned}
a_{jj} &= l_{j1}^2 + \cdots + l_{jj}^2, \quad j = 1, \ldots, n \\
a_{ij} &= l_{ij} l_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}, \quad i = j+1, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

Daraus folgt:

$$
l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - l_{j1}^2 - \cdots - l_{j,j-1}^2} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2} \tag{2}
$$

$$
l_{ij} = (a_{ij} - l_{i1} l_{j1} - \cdots - l_{i,j-1} l_{j,j-1})/l_{jj} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) \tag{3}
$$

In der Programmierung geht man auch spaltenweise vor. Wir haben insgesamt Schritte $j = 1, \ldots, n$. Zunächst können wir das Hauptdiagonalelement l_{jj} mit (2) in Spalte j berechnen, anschließend die Elemente unterhalb der Hauptdiagonalen, also für $i = j+1, \ldots, n$ die Elemente l_{ij} mit (3).

Das Gleichungssystem wird dann in zwei Schritten gelöst. Zu erst wird die eine Lösung y von $Ly = b$ durch Vorwärtseinsetzen mit Hilfe der Formel

$$
y_j = \frac{1}{l_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} y_k \right), \quad j = 1, \ldots, n \tag{4}
$$

berechnet. Anschließend wird das Gleichungssystem $L^t x = y$ durch die (vom Gaussverfahren bekannte) Formel des Rückwärtseinsetzens gelöst:

$$
x_j = \frac{1}{l_{jj}} \left(y_j - \sum_{k=j+1}^{n} l_{jk} x_k \right), \quad j = n, n-1, \ldots, 1 \tag{5}
$$

Beispiel:

Es sei das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 10 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

gegeben. Beginnen wir mit dem ersten Element der Matrix L, also mit Formel (2). Für $j = 1$ gilt

$$l_{11} \quad = \quad \left(a_{11} - \sum_{k=1}^{0} l_{1,k}^2 \right)^{1/2} = \sqrt{a_{11}}.$$

l_{22} können wir noch nicht berechnen, dazu benötigt man den Wert l_{21}, den wir noch nicht kennen. Also können wir mit Formel (2) nicht mehr weiterrechnen. Daher nutzen wir nun Formel (3). Diese gilt für den Fall $i \neq j$, also beginnen wir mit $j = 1$ und $i = 2$:

$$l_{21} \quad = \quad \frac{1}{l_{11}} \left(a_{21} - \sum_{k=1}^{0} l_{2,k} l_{1,k} \right) = \frac{a_{21}}{l_{11}}.$$

Die Summe $\sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k} l_{j,k}$ ist wieder gleich Null. Diesen Wert wird sie für alle $i = 2, \ldots, n$ annehmen, wenn $j = 1$ ist. Also können wir die Matrixeinträge l_{i1} für alle $i = 2, \ldots, n$ mit Formel (3) berechnen:

$$l_{i1} \quad = \quad \frac{1}{l_{11}} \left(a_{i1} - \sum_{k=1}^{0} l_{i,k} l_{1,k} \right) = \frac{a_{i1}}{l_{11}}.$$

Für $j = 2$ kommen wir mit Formel (3) nicht weiter, da l_{22} noch unbekannt ist. Also gehen wir wieder zu Formel (2) über und untersuchen den Fall $j = 2$:

$$l_{jj} \quad = \quad \left(a_{22} - \sum_{k=1}^{2-1} l_{2,k}^2 \right)^{1/2} = \left(a_{22} - l_{2,1}^2 \right)^{1/2}$$

Mehr können wir mit dieser Formel nun wieder nicht berechnen, für den Fall $j = 3$ fehlt uns $l_{3,1}$. Also gehen wir wieder zu Formel (3) über und setzen dort $j = 2$:

$$l_{i2} \quad = \quad \frac{1}{l_{22}} \left(a_{i2} - \sum_{k=1}^{1} l_{i,k} l_{2,k} \right) = \frac{1}{l_{22}} \left(a_{i2} - l_{i,1} l_{2,1} \right)$$

Die $l_{i,1}$ sind für alle $i = 1, \ldots, n$ bekannt, daher können wir l_{i2} wieder für alle i berechnen. In unseren ersten Berechnungen haben wir l_{12} und l_{22} jedoch schon berechnet, so dass wir nun erst bei $i = j + 1 = 3$ starten müssen, um die restlichen $l_{i,1}$ zu erhalten:

$$l_{i2} \quad = \quad \frac{1}{l_{22}} \left(a_{i2} - l_{i,1} l_{2,1} \right), \qquad i = 3, \ldots, n.$$

Nun berechnen wir wieder mit Formel (2) das Hauptdiagonalelement l_{33} und anschließend mit Formel (3) die Elemente $l_{i,3}$. Da wiederum die Elemente $l_{1,3}$, $l_{2,3}$ und $l_{3,3}$ bekannt sind, starten wir in Formel (3) mit $i = j + 1 = 4$

$$l_{i3} \quad = \quad \frac{1}{l_{33}} \left(a_{i3} - \sum_{k=1}^{2} l_{i,k} l_{3,k} \right) = \frac{1}{l_{33}} \left(a_{i3} - l_{i,1} l_{3,1} - l_{i,2} l_{3,2} \right).$$

Die Einträge $l_{i,1}$ und $l_{i,2}$ sind nach den ersten Berechnungen bekannt, also kann die Summe ausgewertet werden.

Es folgt daher die Cholesky-Zerlegung von A durch

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Das Gleichungssystem wird nun gelöst durch Vorwärtseinsetzen

$$\begin{aligned} Ly &= b \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow y &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und anschließendes Rückwärtseinsetzen

$$\begin{aligned} L^t x &= y \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow x &= \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Nach diesem Schema läuft die Berechnung auch für größere Gleichungssysteme ab. Wir fassen zusammen und formulieren einen ersten Pseudocode:

```
berechne zuerst L(j,j) mit Formel 2
berechne dann fuer i = j+1,...,n L(i,j) mit Formel 3
```

Diese beiden Schritte führen wir für alle $j = 1, \ldots, n$ durch. Somit ergibt sich der Pseudocode

```
fuer j=1,...,n
   berechne zuerst L(j,j) mit Formel 2
   berechne dann fuer i = j+1,...,n L(i,j) mit Formel 3
ende

Berechne die Loesung y von Ly=b durch Vorwerseinsetzen mit Formel 4
Berechne die Loesung z von L^tx=y durch Vorwerseinsetzen mit Formel 5
```