First published in:

PAMM · Proc. Appl. Math. Mech. **2**, 495–496 (2003) / **DOI** 10.1002/pamm.200310230

Schäfer, U.

Über Blockversionen des Intervall-Cholesky-Verfahrens

1. Einleitung

Wir betrachten ein lineares Gleichungssystem

$$\tilde{A}x = \tilde{b}, \quad \tilde{A} \in \mathbb{R}^{n\times n},\, \tilde{b} \in \mathbb{R}^n, \tag{1}$$

wobei wir $\tilde{A}$ und $\tilde{b}$ explizit nicht kennen, sondern für jede Komponente von $\tilde{A}$ und $\tilde{b}$ lediglich untere und obere Schranken zur Verfügung haben. Dieses Problem entsteht z. B. dann, wenn Rundungsfehler, Messfehler und/oder Diskretisierungfehler mit in die Rechnung einbezogen werden sollen. Falls wir für (1) die Zusatzinformation besitzen, dass $\tilde{A}$ symmetrisch ist, so haben wir folgende Situation: Gegeben sind eine Intervallmatrix $[A] \in \mathbf{IR}^{n\times n}$ und ein Intervallvektor $[b] \in \mathbf{IR}^n$, und wir betrachten eine Menge von linearen Gleichungssystemen

$$Ax = b, \quad A = A^{\mathrm{T}},\, A \in [A],\, b \in [b].$$

Da es zu aufwändig ist (siehe [1]), die Menge

$$\Sigma_{sym}([A],[b]) := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\, A = A^{\mathrm{T}},\, A \in [A],\, b \in [b]\}$$

zu bestimmen, begnügen wir uns, einen Intervallvektor $[x] \in \mathbf{IR}^n$ zu berechnen, der $\Sigma_{sym}([A],[b])$ einschließt, falls $\Sigma_{sym}([A],[b])$ beschränkt ist. Denn dann können wir schließen:

Ist $\tilde{x}$ eine Lösung von (1), so gilt $\tilde{x} \in \Sigma_{sym}([A],[b]) \subseteq [x]$.

Zur Warnung sei bemerkt, dass ein Intervallvektor $[x]$, der der Gleichung $[A][x] = [b]$ genügt, $\Sigma_{sym}([A],[b])$ i. a. nicht einschließt. Dies zeigt das einfache

Beispiel *Gegeben sei die lineare Gleichung*

$$\frac{4}{3}x = \frac{9}{7}. \tag{2}$$

Mit $\frac{4}{3} \in [1, \frac{16}{10}] =: [A] \in \mathbf{IR}^{1\times 1}$ *und* $\frac{9}{7} \in [1,2] =: [b] \in \mathbf{IR}^1$ *erfüllt dann zwar* $[x] = [1, \frac{5}{4}]$ *die Gleichung* $[A][x] = [b]$, *aber die Lösung* $\tilde{x} = \frac{27}{28}$ *von (2) liegt nicht in* $[x]$.
Eine Möglichkeit, ein $[x] \in \mathbf{IR}^n$ zu finden, welches $\Sigma_{sym}([A],[b])$ einschließt, ist das Intervall-Cholesky-Verfahren.

2. Das Intervall-Cholesky-Verfahren ([2])

Das Intervall-Cholesky-Verfahren ist die direkte Übertragung des aus der Numerischen Mathematik bekannten Cholesky-Verfahrens auf Matrizen mit Intervallen als Koeffizienten. Angewandt auf $[A] \in \mathbf{IR}^{n\times n}$ und $[b] \in \mathbf{IR}^n$ liefert es - falls das Verfahren durchführbar ist - einen Intervallvektor, der $\Sigma_{sym}([A],[b])$ einschließt. In diesem Fall muss $\Sigma_{sym}([A],[b])$ beschränkt sein. Das Verfahren selbst besteht aus drei Hauptschritten: die LL^{T} Zerlegung, die Vorwärtssubstitution und die Rückwärtssubstitution. Es ist genau dann durchführbar, wenn in jedem Einzelschritt der LL^{T} Zerlegung das Intervall in der 1,1 Komponente der betrachteten Intervalluntermatrix nur positive Werte enthält. Andernfalls bricht es ab. Für $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist das Cholesky-Verfahren bekanntlich genau dann durchführbar, wenn $\tilde{A}$ symmetrisch und positiv definit ist. Für eine Intervallmatrix $[A] \in \mathbf{IR}^{n\times n}$ gibt es bis heute leider kein derartig abschließendes Ergebnis. So kann das Intervall-Cholesky-Verfahren abbrechen, obwohl jede symmetrische Matrix $A \in [A]$ positiv definit ist, wie man an speziellen 3×3 Beispielen zeigen kann. Es ist daher wichtig, wenigstens Klassen von Intervallmatrizen angeben zu können, für die man die Durchführbarkeit des Intervall-Cholesky-Verfahrens zeigen kann. Wir verweisen diesbezüglich auf [2].

3. Das Intervall-Cholesky-Verfahren angewandt auf Blockmatrizen

Oft - z. B. bei der Gebietszerlegungsmethode (siehe [4]) - kommt es vor, dass $\tilde{A}$ aus (1) eine Blockmatrix ist. Um den aus der Gebietszerlegungsmethode gewonnenen Vorteil der Parallelisierbarkeit auch für eine Intervallversion des Cholesky-Verfahrens auszunutzen, wollen wir das Intervall-Cholesky-Verfahren auf Blockmatrizen ausdehnen. Dabei stellen wir fest, dass *das* Block-Intervall-Cholesky-Verfahren nicht eindeutig definiert ist. Um dies zu verdeutlichen, betrachten wir zunächst den Fall, dass keine echten Intervalle als Einträge vorkommen. Außerdem setzen wir der Übersicht wegen voraus, dass A lediglich aus vier Blöcken besteht; d.h. es ist

$$[A] = A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^{\mathrm{T}} & A_{22} \end{pmatrix} \in \mathrm{I\!R}^{n\times n}, \quad [b] = b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \in \mathrm{I\!R}^n \text{ mit } A_{ij} \in \mathrm{I\!R}^{n_i\times n_j},\, b_i \in \mathrm{I\!R}^{n_i},\, i,j = 1,2,$$

wobei $n_1 + n_2 = n$ gilt und A symmetrisch und positiv definit sein soll.

Ein Block-Cholesky-Verfahren muss aus drei Hauptschritten bestehen: die Block-LL^{T} Zerlegung, die Block-Vorwärtssubstitution und die Block-Rückwärtssubstitution. Der erste Schritt einer Block-LL^{T} Zerlegung besteht darin, eine Matrix L_{11} zu bestimmen mit $L_{11}L_{11}^{\mathrm{T}} = A_{11}$. Dann werden $L_{12} := O$ und $L_{21} := A_{12}^{\mathrm{T}}(L_{11}^{\mathrm{T}})^{-1}$ gesetzt. Der zweite (und in diesem Beispiel letzte) Schritt besteht dann aus der Bestimmung einer Matrix L_{22} mit $L_{22}L_{22}^{\mathrm{T}} = A_{22} - A_{12}^{\mathrm{T}}A_{11}^{-1}A_{12}$. Es wird dabei nicht gefordert, dass L_{11} eine untere Dreiecksmatrix ist, sondern lediglich, dass sich L_{11} auf $\sqrt{a_{11}}$ reduziert, falls $a_{11} = A_{11} \in \mathrm{I\!R}^{1\times 1}$ ist. Analoges gilt für L_{22}. Da mit A auch A_{11} symmetrisch und positiv definit ist, können wir zwei Ideen verfolgen.

1. Idee: Wir wählen als L_{11} die untere Dreiecksmatrix, die man aus der Cholesky-Zerlegung für A_{11} gewinnt. (Analog wird mit L_{22} verfahren.)

2. Idee: Wir wählen als L_{11} die eindeutig definierte symmetrische und positiv definite Wurzel $\sqrt{A_{11}}$ von A_{11}.(Analog wird mit L_{22} verfahren.)
Durch Mischen dieser Ideen bekommen wir tatsächlich $2^2 = 4$ Block-Verfahren. Dies wollen wir allerdings nicht betrachten.

Da die Berechnung der Wurzel einer symmetrischen und positiv definiten Matrix i.a. einen zu großen Aufwand hat, bezeichnen wir das Verfahren, das auf der 1. Idee basiert, das praktische Block-Cholesky-Verfahren und das Verfahren, das auf der 2. Idee basiert, das theoretische Block-Cholesky-Verfahren. Beide Verfahren liefern für das Problem $Ax = b$ die eindeutige Lösung $x = A^{-1}b$.

4. Ergebnisse ([3])

Wir haben beide Ideen auf die Intervallrechnung übertragen; d.h. wir haben basierend auf der 1. Idee ein praktisches Block-Intervall-Cholesky-Verfahren entworfen und basierend auf der 2. Idee ein theoretisches Block-Intervall-Cholesky-Verfahren. Beide Verfahren werden auf eine Intervallmatrix $[A]$ und einen Intervallvektor $[b]$ angewandt, und sie enden beide - falls sie durchführbar sind - mit einem Block-Intervallvektor, der $\Sigma_{sym}([A],[b])$ einschließt. Bezüglich der Durchführbarkeit gelten sinngemäß dieselben Aussagen wie in Abschnitt 2. Auch haben wir Klassen von Intervallmatrizen gefunden, für die wir jeweils die Durchführbarkeit der jeweiligen Verfahren zeigen können. Das interessanteste Ergebnis ist allerdings vielleicht die Tatsache, dass sich bei Durchführbarkeit beider Verfahren die resultierenden Intervallvektoren voneinander unterscheiden können und dass man grundsätzlich bezüglich der Güte der Einschließung von $\Sigma_{sym}([A],[b])$ kein Verfahren dem anderen vorziehen kann. Für die Details verweisen wir auf [3].

5. Literatur

1 Alefeld, G., Kreinovich, V., Mayer, G.: On the shape of the symmetric, persymmetric and skew-symmetric solution set. SIAM J. Matrix Anal. Appl. **18** (1997), 693–705.
2 Alefeld, G., Mayer, G.: The Cholesky method for interval data. Linear Algebra Appl. **194** (1993), 161–182.
3 Schäfer, U.: Two ways to extend the Cholesky decomposition to block matrices with interval entries. Reliable Computing. **8** (2002), 1–20.
4 Schäfer, U.: Aspects for a block version of the interval Cholesky algorithm. J. Comp. Appl. Math., to appear.

Dr. Uwe Schäfer, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Karlsruhe, D-76128 Karlsruhe, Germany