Gauß-Doolittle

Für die Dreiecks-Matrizen L und R seien die folgenden Bedingungen für alle i und j in $\{1, 2, \ldots, n\}$ erfüllt:

$$\begin{array}{rcl} r_{kj} & = & 0 \text{ für } k > j \\ l_{ik} & = & 0 \text{ für } k > i \\ l_{ii} & = & 1 \end{array} \tag{1}$$

Dann gilt für $A = L\,R$ für alle i und j:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}\, r_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik}\, r_{kj} \tag{2}$$

Ist $i \leq j$, so gilt

$$\begin{aligned} a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}\, r_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}\, r_{kj} + l_{ii}\, r_{ij} \Rightarrow \\ r_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}\, r_{kj} \quad \text{für} \quad j = i, i+1, \ldots, n \end{aligned} \tag{3}$$

Ist $i > j$, so gilt

$$\begin{aligned} a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik}\, r_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\, r_{kj} + l_{ij}\, r_{jj} \Rightarrow \\ l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\, r_{kj}}{r_{jj}} \quad \text{für} \quad i = j+1, \ldots, n \end{aligned} \tag{4}$$

Besitzt A also eine L-R-Zerlegung (ohne Pivotisierung), so lässt sich abwechselnd mit (3) eine Zeile von R und mit (4) eine Spalte von L berechnen. Die Reihenfolge ist: 1. Zeile von R, 1. Spalte von L bis n.-Zeile von R (nur r_{nn}). Trägt man L und R der Reihe nach in **eine** Matrix ein, so berechnet man *anschaulich gesehen* in dieser Matrix die Summen in (3) und (4) als Skalarprodukte, bis man auf eine Null (an der Stelle i, j) stößt. Dann zieht man den Summenwert von a_{ij} ab, teilt für $i > j$ (L-Elemente) noch durch r_{jj} und trägt den so erhaltenen Wert an der Stelle i, j in die $L\backslash R$-Matrix ein.

Beispiel: (die Aufteilung in einzelne Schritte dient nur zur Veranschaulichung der einzelnen Abschnitte.)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 6 & 6 & -4 \\ -4 & 1 & 3 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Bis zur Situation

$$L\backslash R = \begin{pmatrix} 2 & \mathbf{1} & -1 \\ 3 & 3 & -1 \\ \mathbf{-2} & & \end{pmatrix} \tag{6}$$

haben wir im Prinzip die *normale* L-R-Zerlegung. Dann bilden wir für l_{32} die Summe $(-2)\,1 = -2$, ziehen diese von a_{32} ab $1 - (-2) = 3$, teilen durch $r_{22} = 3$ und erhalten $l_{32} = 1$:

$$L\backslash R = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -\mathbf{1} \\ 3 & 3 & -\mathbf{1} \\ \mathbf{-2} & \mathbf{1} & \end{pmatrix} \tag{7}$$

Für r_{33} berechnen wir die Summe $(-2)\,(-1) + 1\,(-1) = 1$ und ziehen dies von a_{33} ab:

$$L\backslash R = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 3 & 3 & -1 \\ -2 & 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

Also:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{9}$$

Wenn man im obigen Algorithmus für symmetrische Matrizen zunächst $d_j := r_{jj}$ nennt und dann $r_{kj} = d_k\, l_{jk}$ benutzt, so erhält man die L-D-L^T-Zerlegung. d_j wird aus (3) berechnet und l_{ij} aus (4).

$$d_j = r_{jj} = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} d_k\, l_{jk}^2 \tag{10}$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} d_k\, l_{jk}\, l_{ik}}{d_j} \quad \text{für} \quad i = j+1, \ldots, n \tag{11}$$

Beispiel:
Von der symmetrischen Matrix A brauchen wir nur *die obere Hälfte*:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -4 & -2 \\ 4 & 9 & -9 & -3 \\ -4 & -9 & 11 & 3 \\ -2 & -3 & 3 & 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ & \backslash 9 & -9 & -3 \\ & & \backslash 11 & 3 \\ & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{12}$$

Die d_j schreiben wir mit auf die Diagonale. Zunächst übernehmen wir $d_1 = a_{11} = 2$ (die Summe ist *leer*). Danach teilen wir die a_{i1} durch d_1 ($l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_1} = \frac{a_{1i}}{d_1}$):

$$\begin{pmatrix} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ & \backslash 9 & -9 & -3 \\ & & \backslash 11 & 3 \\ & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & & \backslash 11 & 3 \\ -1 & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{13}$$

Dann berechnen wir das 2. Diagonalelement $d_2 = a_{22} - d_1 \cdot l_{21}^2 = 9 - 2 \cdot 2^2 = 1$.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ \mathbf{2} & \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & & \backslash 11 & 3 \\ -1 & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & & \backslash 11 & 3 \\ -1 & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Danach die l_{i2} ($l_{i2} = (a_{2i} - d_1\, l_{21}\, l_{i1})/d_2$):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ \mathbf{2} & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ \mathbf{-2} & & \backslash 11 & 3 \\ -1 & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ \mathbf{2} & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & \backslash 11 & 3 \\ \mathbf{-1} & & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & \backslash 11 & 3 \\ -1 & 1 & & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{15}$$

Jetzt das 3. Diagonalelement $d_3 = a_{33} - d_1 \cdot l_{31}^2 - d_2 \cdot l_{32}^2 = 11 - 2 \cdot (-2)2^2 - 1 \cdot (-1)^2 = 2$.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & \mathbf{1} \backslash 9 & -9 & -3 \\ \mathbf{-2} & \mathbf{-1} & \backslash 11 & 3 \\ -1 & 1 & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & 2 \backslash 11 & 3 \\ -1 & 1 & & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{16}$$

$l_{i3} = (a_{3i} - d_1\, l_{31}\, l_{i1} - d_2\, l_{32}\, l_{i2})/d_3$ (hier nur $i = 4$):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & \mathbf{1} \backslash 9 & -9 & -3 \\ \mathbf{-2} & \mathbf{-1} & 11 \backslash 11 & 3 \\ \mathbf{-1} & \mathbf{1} & & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & 2 \backslash 11 & 3 \\ -1 & 1 & 0 & \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{17}$$

Als letztes dann (für $n = 4$) $d_4 = a_{44} - d_1 \cdot l_{41}^2 - d_2 \cdot l_{42}^2 - d_3 \cdot l_{43}^2 = 4 - 2 \cdot (-1)^2 - 1 \cdot 1^2 - 1 \cdot 0^2 = 1$.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{2} \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & \mathbf{1} \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & \mathbf{2} \backslash 11 & 3 \\ \mathbf{-1} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \backslash 4 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 \backslash 2 & 4 & -4 & -2 \\ 2 & 1 \backslash 9 & -9 & -3 \\ -2 & -1 & 1 \backslash 11 & 3 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \backslash 4 \end{pmatrix} \tag{18}$$