Cholesky-Zerlegung - Vorüberlegungen

Definition Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch.

A positiv definit $\;:\Longleftrightarrow\; \forall\, x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}: \; x^t A x > 0$

Lemma Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch. Dann gilt

A positiv definit $\;\Longleftrightarrow\; \exists\, M \in \mathbb{R}^{n\times n}$, M invertierbar : $\; A = M^t M$

Beweis:

"$\Leftarrow$" $x^t A x = x^t M^t M x = (Mx)^t M x = |Mx|^2 > 0 \;\; (x \neq 0)$

"$\Rightarrow$" A symm., pos. def. $\Rightarrow\; \exists\, U \in \mathbb{R}^{n\times n}$ orthog. : $\; A = U^t D U$
mit $D := \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, worin $\lambda_i > 0$ EW von A.
Setze $D^{\frac{1}{2}} := \operatorname{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n})$. Dann
$A = U^t D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} U = (D^{\frac{1}{2}} U)^t D^{\frac{1}{2}} U$ mit $M := D^{\frac{1}{2}} U$ nicht singulär.

Cholesky-Zerlegung - Vorüberlegungen II

Bemerkung: Es gibt viele Zerlegungen $A = M^t M$, denn für jede Orthogonalmatrix $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ erzeugt auch VM eine Zerlegung von A wegen $(VM)^t VM = M^t V^t VM = M^t M = A$.

Frage: Kann M als Dreiecksmatrix gewählt werden?

Ja, weil jedes nichtsinguläre $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Zerlegung $M = QR$ besitzt mit $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ orthogonal und $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nichtsinguläre obere Dreiecksmatrix („QR-Zerlegung“)
Dann: $A = (QR)^t QR = R^t Q^t QR = R^t R = LL^t$ mit $L := R^t$ nichtsinguläre untere Dreiecksmatrix („Cholesky-Zerlegung“)

Ansatz:

$$A = LL^t = \begin{pmatrix} l_{00} & 0 & \dots & 0 \\ l_{10} & l_{11} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n-10} & \dots & \dots & l_{n-1n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{00} & l_{10} & \dots & l_{n-10} \\ 0 & l_{11} & \dots & l_{n-11} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & l_{n-1n-1} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow \frac{n(n+1)}{2}$ Gleichungen für $\frac{n(n+1)}{2}$ Unbekannte l_{ij} $_{(0 \le j \le i \le n-1)}$

Cholesky-Zerlegung - Formeln

Wegen $l_{ij} = 0$ für $j > i$ folgt

$$a_{ij} = \sum_{k=0}^{n-1} l_{ik} l^t_{kj} = \sum_{k=0}^{n-1} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=0}^{\min(i,j)} l_{ik} l_{jk} \quad {\scriptstyle (i,j=0,\ldots,n-1)}$$

Es genügt, nur die untere Hälfte zu betrachten (Symmetrie!), d.h. $i \geq j$ vorauszusetzen:

$$a_{ij} = \sum_{k=0}^{j} l_{ik} l_{jk} \quad {\scriptstyle (0 \leq j \leq i \leq n-1)}$$

Folgerung: Für $j = 0, \ldots, n-1$ gilt:

$${\scriptstyle (i=j)} \quad a_{jj} = \sum_{k=0}^{j} l_{jk}^2, \qquad \text{also} \quad l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=0}^{j-1} l_{jk}^2}$$

$${\scriptstyle (i>j)} \quad a_{ij} = \sum_{k=0}^{j} l_{ik} l_{jk}, \quad \text{also} \quad l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=0}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) \quad {\scriptstyle (i=j+1,\ldots,n-1)}$$

Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen

$$Ax = b \iff L\underbrace{L^t x}_{y} = b \iff \begin{cases} Ly = b \\ L^t x = y \end{cases}$$

d.h. $\displaystyle\sum_{j=0}^{n-1} l_{ij} y_j = b_i \quad {\scriptstyle (i=0,\ldots,n-1)}$ bzw. $\displaystyle\sum_{j=0}^{i} l_{ij} y_j = b_i \quad {\scriptstyle (i=0,\ldots,n-1)}$

bzw. $\displaystyle y_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=0}^{i-1} l_{ij} y_j \right) \quad {\scriptstyle (i=0,\ldots,n-1)}$ („Vorwärtseinsetzen“)

und $\displaystyle\sum_{j=0}^{n-1} l_{ij}^t x_j = y_i \quad {\scriptstyle (i=0,\ldots,n-1)}$ bzw. $\displaystyle\sum_{j=i}^{n-1} l_{ji} x_j = y_i \quad {\scriptstyle (i=0,\ldots,n-1)}$

bzw.

$\displaystyle x_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} l_{ji} x_j \right) \quad {\scriptstyle (i=n-1,\ldots,0)}$ („Rückwärtseinsetzen“)

Hinweise zur Programmierung

- Einlesen einer unteren Dreiecksmatrix L, Berechnen und Ausgeben von $A = LL^t$ als Vorübung sinnvoll (liefert auch Testbeispiele).
- Die Matrixelemente l_{ij} der Cholesky-Zerlegung ergeben sich nacheinander, wenn die Spalten von links nach rechts jeweils von der Diagonale abwärts nach unten abgearbeitet werden.
- Die Daten A, b und der Ergebnisvektor x sollten im Hauptprogramm vereinbart werden. Weitere benötigte Matrizen und Vektoren sollen in der Funktion angelegt werden.