1.5 Cholesky-Verfahren für symmetrische, positiv definite Matrizen

Definition 5. *Eine quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt*
(i) symmetrisch, falls gilt:

$$A = A^T \qquad (a_{ij} = a_{ji} \quad \forall i, j = 1, \ldots, n).$$

(ii) positiv definit, falls für alle Vektoren $x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$ gilt:

$$x^T Ax > 0. \tag{1.19}$$

Lemma 1. *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch und positiv definit. Dann ist A invertierbar und die Elemente auf der Hauptdiagonalen von A sind positiv, d.h. $a_{ii} > 0$ für $i = 1, \ldots, n$. Des Weiteren gilt*

$$\max_{i,j=1,\ldots,n} |a_{ij}| = \max_{i=1,\ldots,n} a_{ii}, \tag{1.20}$$

d.h. der Wert des betragsmäßig größten Elements der Matrix A ist ein Element der Hauptdiagonalen.

Beweis: Wäre A nicht invertierbar, so gäbe es ein $x \neq 0$ im Kern von A, d.h. $Ax = 0$. Insbesondere wäre dann auch

$$x^T Ax = 0,$$

was im Widerspruch zu (1.19) stünde.

Die Diagonalelemente sind positiv, da nach (1.19) gilt:

$$a_{ii} = e_i^T A e_i > 0$$

für $i = 1, \ldots, n$.

Gleichung (1.20) folgt aus

$$|a_{ij}| \leq \sqrt{a_{ii}a_{jj}} \leq \frac{1}{2}(a_{ii} + a_{jj}) \text{ für } i, j = 1, \ldots, n,$$

was wiederum aus der positiven Definitheit der Matrizen $\begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ji} & a_{jj} \end{pmatrix}$ folgt. Zusätzlich haben wir investiert, dass die Determinante (Produkt der Eigenwerte) einer positiv definiten Matrix positiv ist. Für die Eigenwerte einer positiven definiten Matrix gilt nämlich (mit Eigenvektor $x \neq 0$):

$$Ax = \lambda x \Rightarrow \underbrace{x^T Ax}_{>0} = \lambda \underbrace{x^T x}_{>0}$$
$$\Rightarrow \lambda \text{ positiv.}$$

□

Satz 9. *Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch und positiv definit. Dann kann die Gauß-Elimination ohne Zeilenvertauschung durchgeführt werden und die dadurch erhaltene Restmatrix ist wiederum symmetrisch und positiv definit. Für die Zerlegung $A = LR$ gilt $R = DL^T$, wobei D eine positiv definite Diagonalmatrix ist.*

Beweis: Wir schreiben

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & z^T \\ z & C \end{pmatrix}$$

und wählen $a_{11} > 0$ (siehe Lemma 1) als Pivotelement. Für

$$L_1 A = A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11} & z^T \\ 0 & C^{(1)} \end{pmatrix}$$

gilt:

a) $C^{(1)}$ ist symmetrisch: $c_{ij}^{(1)} = a_{i+1,j+1} - \frac{a_{i+1,1}}{a_{11}} a_{1,j+1} = a_{j+1,i+1} - \frac{a_{j+1,1}}{a_{11}} a_{1,i+1} = c_{ji}^{(1)}$.

b) $C^{(1)}$ ist positiv definit: Sei $y \in \mathbb{R}^{n-1} \backslash \{0\}$. Wir werden x_1 so definieren, dass

$$y^T C^{(1)} y = \begin{pmatrix} x_1 \\ y \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} x_1 \\ y \end{pmatrix} \ > \ 0, \tag{1.21}$$

gilt, wobei die Ungleichung aus der positiven Definitheit der Matrix A folgt. Aber wie ist x_1 zu definieren? Für beliebiges x_1 gilt

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} x_1 \\ y \end{pmatrix} = a_{11} x_1^2 + 2 x_1 z^T y + y^T C y.$$

Für die Matrix $C^{(1)}$ finden wir gemäß der Gauß-Elimination

$$C^{(1)} = C - \frac{1}{a_{11}} z \cdot z^T \qquad\qquad (z \cdot z^T = (a_{i1} a_{j1})_{i,j=2,\ldots,n}).$$

Wir können somit die Gleichheit in (1.21) garantieren, wenn

$$-\frac{1}{a_{11}} (y^T z)^2 = a_{11} x_1^2 + 2 x_1 z^T y$$

gilt. Dies ist erfüllt für $x_1 = -\frac{y^T z}{a_{11}}$.

c) Weiter gilt:

$$L_1 A L_1^T = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & C^{(1)} & \\ 0 & & & \end{array} \right).$$

Rekursiv folgt:

$$L_{n-1} \cdot \ldots \cdot L_1 A L_1^T \cdot \ldots \cdot L_{n-1}^T = D,$$

wobei D eine positiv definite Diagonalmatrix ist. Mit $L := (L_{n-1} \cdot \ldots \cdot L_1)^{-1}$ gilt

$$A = LDL^T$$

(beachte allgemein $(M^T)^{-1} = (M^{-1})^T$).

$\square$

Bemerkung 8. *Eine Spalten- oder Zeilenpivotwahl sollte nicht durchgeführt werden, da sie die Struktur von A zerstört.*

Da $D = \operatorname{diag}(d_i)$ positiv definit ist, existiert $D^{\frac{1}{2}} = \operatorname{diag}(\sqrt{d_i})$ und daher die *Cholesky-Zerlegung*

$$A = \bar{L}\bar{L}^T$$

mit unterer Dreiecksmatrix $\bar{L} = LD^{\frac{1}{2}}$.

Algorithmus zur Berechnung von $\bar{L} = (l_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$:

$$\begin{pmatrix} l_{11} & & \\ \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & \cdots & l_{n1} \\ & \ddots & \vdots \\ & & l_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} i = 1: &\ \ a_{11} = l_{11}^2 && \Rightarrow \ \ l_{11} = \sqrt{a_{11}} \\ i > 1: &\ \ a_{i1} = l_{i1}l_{11} && \Rightarrow \ \ l_{i1} = \tfrac{a_{i1}}{l_{11}} \end{aligned}$$

allgemein:

$$\begin{aligned} i = k: &\ \ a_{kk} = l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + \ldots + l_{kk}^2 && \Rightarrow \ \ l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - \ldots - l_{k,k-1}^2} \\ i > k: &\ \ a_{ik} = l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + \ldots + l_{ik}l_{kk} && \Rightarrow \ \ l_{ik} = \tfrac{a_{ik} - l_{i1}l_{k1} - \ldots - l_{i,k-1}l_{k,k-1}}{l_{kk}} \end{aligned}$$

Algorithmus:

for $k = 1, \ldots, n$ do
  $l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - \ldots - l_{k,k-1}^2}$
  for $i = k+1, \ldots, n$ do
    $l_{ik} = (a_{ik} - l_{i1}l_{k1} - \ldots - l_{i,k-1}l_{k,k-1})/l_{kk}$
  end do
end do

Rechenaufwand der Cholesky-Zerlegung:
n Wurzeln (vernachlässigbar). Multiplikationen oder Divisionen (ebenso viele Additionen):

$$\sum_{k=1}^{n} (k - 1 + \underbrace{n - k + (n-k)(k-1)}_{=(n-k)k}) = \underbrace{\sum_{k=0}^{n-1} k}_{=\frac{n(n-1)}{2}} + \sum_{k=1}^{n} k(n-k)$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n} k(n-k) &= n^3 \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{k}{n}(1 - \frac{k}{n}) \\ &\approx n^3 \int_0^1 x(1-x)dx \ = \ \frac{1}{6}n^3 \qquad \text{(Hälfte der allg. Gauß-Elimination)} \end{aligned}$$

Gesamt-Algorithmus:

(i) Bestimme mit dem Cholesky-Verfahren $\bar{L}$
mit $A = \bar{L} \cdot \bar{L}^T$ (Cholesky-Zerlegung)

(ii) Löse $\bar{L}c = b$ (Vorwärtssubstitution)

(iii) Löse $\bar{L}^T x = c$ (Rückwärtssubstitution)

1.6 QR-Zerlegung

Zu einer gegebenen Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit $m \geq n$ konstruieren wir eine Zerlegung

$$A = QR$$

mit orthogonaler Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ (d.h. $QQ^T = I$) und

$$R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \;\; \tilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ obere Dreicksmatrix.}$$

Eine solche Zerlegung kann z.B. mittels Householder-Transformationen konstruiert werden.
Im Fall $m = n$ nutzen wir die Zerlegung zum Lösen des linearen Gleichungssystems $Ax = b$.

Algorithmus:

(i) Bestimme Matrizen Q und R mittels Householder-Transformationen mit $A = QR$ (QR-Zerlegung)

(ii) Löse $Qc = b$ ($Q^{-1} = Q^T$, also $c = Q^T b$)

(iii) Löse $Rx = c$ (Rückwärtssubstitution)

Dieses Vorgehen liefert einen besonders stabilen Algorithmus, benötigt aber ungefähr doppelt so viele Operationen wie die Gauß-Elimination.

Im Fall linearer Ausgleichsprobleme ($m > n$)

$$\|Ax - b\|_2 = \min$$

finden wir mit der Zerlegung und der Orthogonalität

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2 &= \|Q^T(Ax - b)\|_2 \\ &= \|Rx - Q^T b\|_2 \;=\; \min, \end{aligned}$$

was sich aufgrund der Eigenschaften von R und Q leicht lösen lässt (vgl. Abschnitt 1.7).

1.7 Lineare Ausgleichsprobleme

Betrachte das überbestimmte Gleichungssystem

$$Ax = b$$

mit $b \in \mathbb{R}^m$ und $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m > n$. Ein solches Gleichungssystem besitzt im Allgemeinen keine Lösung.

Beispiel 10. *Betrachte:*

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Die oberen beiden Gleichungen legen x_1 und x_2 fest:

$$x_1 = x_2 = 1.$$

Jedoch ist $3 \neq 2$.

Man sucht alternativ nach einem $x \in \mathbb{R}^n$ mit

$$\|Ax - b\|_2 = min.$$

Satz 10. *(Gauß) Seien $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ mit $m > n$. Der Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ ist genau dann eine Lösung des linearen Ausgleichsproblems $\|Ax - b\|_2 = min$, falls er die so genannte Normalengleichung*

$$A^T Ax = A^T b$$

erfüllt. Insbesondere ist das lineare Ausgleichsproblem genau dann eindeutig lösbar, wenn der Rang A maximal ist, d.h. Rang$(A) = n$ gilt.

Bemerkung 9. *Ist der Rang von A maximal, so ist $A^T A$ eine symmetrische positiv definite Matrix.*

Beweis: Wir zeigen zunächst

$$\|Ax - b\|_2 \text{ minimal} \Longleftrightarrow Ax - b \text{ orthogonal auf } V := \{Ax | x \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m.$$

Mit der Definition der euklidischen Norm folgt für beliebiges y:

$$\begin{aligned}
\|A(x+y) - b\|_2^2 &= (A(x+y) - b)^T (A(x+y) - b) \\
&= (Ax - b + Ay)^T (Ax - b + Ay) \\
&= (Ax - b)^T (Ax - b) + 2(Ay)^T (Ax - b) + (Ay)^T (Ay) \\
&= \|Ax - b\|_2^2 + 2(Ay)^T (Ax - b) + \|Ay\|_2^2.
\end{aligned}$$

Also auch

$$\|A(x + \alpha y) - b\|_2^2 = \|Ax - b\|_2^2 + 2(Ay)^T (Ax - b) \cdot \alpha + \|Ay\|_2^2 \cdot \alpha^2.$$

für jedes $y \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha \in \mathbb{R}$. Wir finden daher die Äquivalenz

$$\|Ax - b\|_2 \text{ minimal} \Longleftrightarrow 2(Ay)^T (Ax - b) = 0 \quad \forall y \in \mathbb{R}^n.$$

Beachte: $2(Ay)^T (Ax - b) \cdot \alpha + \|Ay\|_2^2 \cdot \alpha^2$ ist eine quadratische Funktion in α und $(Ay)^T (Ax - b)$ ist dominant für $0 < |\alpha| << 1$.

Weiter gilt offenbar

$$\begin{aligned}
0 = (Ay)^T (Ax - b) &= y^T (A^T Ax - A^T b) \quad \forall y \in \mathbb{R}^n \\
&\Longleftrightarrow A^T Ax = A^T b.
\end{aligned}$$

□

Das Gleichungssystem $A^T Ax = A^T b$ kann für Matrizen A mit maximalem Rang mit dem Cholesky-Verfahren gelöst werden. Man beachte dabei

Lemma 2. *Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit maximalem Rang $n \leq m$ gilt*

$$\text{cond}_2(A^T A) = (\text{cond}_2(A))^2.$$

Beweis: Nach Gleichung (1.12) gilt für die Kondition rechteckiger Matrizen

$$\begin{aligned}(\mathrm{cond}_2(A))^2 &= \frac{\max_{\|x\|_2=1}\|Ax\|_2^2}{\min_{\|x\|_2=1}\|Ax\|_2^2}\\ &= \frac{\max_{\|x\|_2=1} x^TA^TAx}{\min_{\|x\|_2=1} x^TA^TAx}\\ &= \frac{\text{größter EW von } A^TA}{\text{kleinster EW von } A^TA}.\end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned}\mathrm{cond}_2(A^TA) &= \frac{\max_{\|x\|_2=1}\|A^TAx\|_2}{\min_{\|x\|_2=1}\|A^TAx\|_2}\\ &= \frac{\sqrt{\text{größter EW von } (A^TA)^2}}{\sqrt{\text{kleinster EW von } (A^TA)^2}}\\ &= \frac{\sqrt{(\text{größter EW von } A^TA)^2}}{\sqrt{(\text{kleinster EW von } A^TA)^2}}\end{aligned}$$

Da A^TA positiv definit ist, sind alle EWe von A^TA echt positiv also

$$\mathrm{cond}_2(A^TA) = (\mathrm{cond}_2(A))^2.$$

□

Satz 11. *(über die Kondition linearer Ausgleichsprobleme)*
Sei A eine rechteckige $m \times n$-Matrix mit maximalem Rang $n \leq m$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $x \neq 0$ die eindeutige Lösung des linearen Ausgleichsproblems

$$\|Ax - b\|_2 = \min.$$

Bezeichne ϑ den Winkel zwischen b und dem Raum V, d.h.

$$\sin(\vartheta) = \frac{\|Ax-b\|_2}{\|b\|_2}.$$

(i) Ist $\bar{x}$ Lösung des gestörten Ausgleichsproblems

$$\|Ax - \bar{b}\|_2 = \min,$$

so gilt:

$$\frac{\|x-\bar{x}\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\mathrm{cond}_2(A)}{\cos(\vartheta)}\frac{\|b-\bar{b}\|_2}{\|b\|_2}.$$

(ii) Ist $\bar{x}$ Lösung des gestörten Ausgleichsproblems

$$\|\bar{A}x - b\|_2 = \min,$$

so gilt:

$$\frac{\|x-\bar{x}\|_2}{\|x\|_2} \leq (\mathrm{cond}_2(A) + (\mathrm{cond}_2(A))^2\tan(\vartheta))\frac{\|A-\bar{A}\|_2}{\|A\|_2}.$$

Bemerkung 10. *Ist das Residuum $r = Ax - b$ im Verhältnis zu b klein, so wird die Kondition des linearen Ausgleichsproblems durch $\mathrm{cond}_2(A)$ beschrieben, während die Kondition der Normalengleichung in etwa durch*

$$cond_2(A^T A) = (\mathrm{cond}_2(A))^2$$

beschrieben wird. In diesem Fall sollte man zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems ein direkt auf A basierendes Verfahren verwenden. Dafür spricht ebenfalls die Anzahl von Operationen, die nötig sind um $A^T A$ zu berechnen. Diese Anzahl ist ungefähr $\frac{1}{2}n^2 m$ während für die Cholesky-Zerlegung von $A^T A$ nur ca. $\frac{1}{6}n^3$ Operationen nötig sind.

Satz 12. *Seien $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit $m \geq n$ eine Matrix mit vollem Rang, $b \in \mathbb{R}^m$ und Q und R die Matrizen einer QR-Zerlegung von A, d.h.*

$$Q^T A = R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit invertierbarer Matrix $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$.
Dann ist $x = \tilde{R}^{-1}c$ die Lösung des linearen Ausgleichsproblems $\|Ax - b\|_2 = \min$, wobei c definiert ist durch $Q^T b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$.

Beweis: Da Q orthogonal ist, folgt:

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &= \|Q^T(Ax - b)\|_2^2 \\ &= \|Rx - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}\|_2^2 \\ &= \|\tilde{R}x - c\|_2^2 + \|d\|_2^2 \;\geq\; \|d\|_2^2. \end{aligned}$$

Für $x := \tilde{R}^{-1}c$ ist die Minimalität von $\|Ax - b\|_2^2$ und somit auch von $\|Ax - b\|_2$ gewährleistet.

□

Bemerkung 11. *Die Norm des Residuums $r = Ax - b$ ist entsprechend den Abschätzungen des Beweises genau $\|d\|_2$, d.h.*

$$\|r\|_2 = \|d\|_2.$$

Algorithmus:

(i) Bestimme Matrizen Q und R mittels Householder-Transformationen mit $A = QR$ (QR-Zerlegung)

(ii) Berechne $Q^T b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$

(iii) Löse $\tilde{R}x = c$ (Rückwärtssubstitution)