

Cholesky-Zerlegung

Referent: Franz Brauße
Veranstaltung: Proseminar Numerik
Dozent: Dipl. Math. Christina Jäger
Universität Trier, FB IV

16.01.2012

Gliederung

- ▶ LDM^T -Zerlegung für quadratische Matrizen
- ▶ LDL^T -Zerlegung für symmetrische Matrizen
- ▶ Stabilität von $LDM^T = A$ pos. def. und nicht symmetrisch
- ▶ Cholesky-Zerlegung für A symmetrisch und pos. def.
 - ▶ Zwei Algorithmen zur Cholesky-Zerlegung
 - ▶ Erweiterung für A sym. pos. semidefinit
- ▶ Symmetrische Pivotierung

Rückblick

Zuletzt: Zerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in untere und obere Dreiecksmatrizen L und U mit $A = LU$ zur Lösung des GLS $Ax = b$, $b \in \mathbb{R}^m$.

Dann: $Ax = LUx = b$, also löse $Ly = b$ durch Rücksubstitutionen, gefolgt von $Ux = y$ ebenfalls durch Rücksubstitutionen.

- ▶ Rechenaufwand: $\frac{2}{3}n^3$ flops.
- ▶ Matrizen L , U können an den Stellen der alten Werte aus A während der Zerlegung abgespeichert werden.

Ziel: Cholesky-Zerlegung für A sym. pos. def.

Deshalb zunächst Betrachtung von $LDM^T = A$, gefolgt von $LDL^T = A$.

LDM^T -Zerlegung

Sei im Folgenden $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Ist A nichtsingulär, so gibt es untere Dreiecksmatrizen $L, M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$, sodass $A = LDM^T$. Diese Zerlegung ist eindeutig.

Ist die LU -Zerlegung von A bekannt, so kann daraus die LDM^T -Zerlegung gewonnen werden. Setze

$$d_i = u_{ii}, \quad i = 1, \dots, n$$

Wegen $\text{rg}(U) = \text{rg}(A) = n$ folgt, dass $D = \text{diag}(d_i)_i$ dann ebenfalls regulär ist.

Also existiert $D^{-1} = \text{diag} \left(\frac{1}{d_i} \right)_i$, womit sich schließlich M^\top ergibt zu

$$M^\top = D^{-1}U$$

L wird unverändert aus der LU -Zerlegung übernommen.

Zusammengesetzt ergibt sich

$$LDM^\top = LD(D^{-1}U) = LU = A.$$

Die Eindeutigkeit der LDM^\top -Zerlegung folgt direkt aus der der LU -Zerlegung: Seien $L'D'M'^\top = A = LDM^\top$ zwei Zerlegungen von A und $\bar{L}\bar{U} = A$ ihre LU -Zerlegung. Dann

$$\begin{aligned}d'_i = \bar{u}_{ii} = d_i &\implies D' = D \\ &\implies D'^{-1} = D^{-1} \\ &\implies M' = D'^{-1}\bar{U} = D^{-1}\bar{U} = M\end{aligned}$$

und nach Def. $L' = \bar{L} = L.$

Anderer Ansatz um LDM^T zu gewinnen

Induktiv: Berechne in jedem Schritt eine Spalte von L , eine Zeile von M^T und einen Diagonalwert von D .

Sind die Teilmatrizen $L^{(j)} = (l_{*k})_{k < j}$ und $M^{(j)} = (m_{i*})_{i < j}$, sowie die Diagonalwerte d_1, \dots, d_{j-1} von D im Schritt j bekannt, dann lässt sich daraus $L^{(j+1)}$, $M^{(j+1)}$ sowie d_j gewinnen:

Betrachte den Vektor v der j -ten Spalte der Gleichung $A = LDM^T$:

$$(1) \quad a_{*j} = Lv \quad \text{und} \quad v = DM^T e_j \quad (2)$$

Die „obere“ Hälfte von (1) weist je v_i ($i = 1, \dots, j$) als Lösung des LGS mit der bekannten unteren Dreiecksmatrix $L^{(j)}$ aus, d.h.

$$\sum_{k=1}^n l_{ik} v_k = \sum_{k=1}^j l_{ik} v_k = a_{ij}, \quad i = 1, \dots, j.$$

v_i ($i = 1, \dots, j$) ist also berechnet, dies in $v = DM^T e_j$ eingesetzt ergibt für $i = 1, \dots, j$

$$\begin{aligned}v_i &= \left(\sum_{k=1}^n d_{ik} m_{kl}^T \right)_{l=j} \cdot e_j \\&= \sum_{k=1}^n d_{ik} m_{kj}^T \\&= d_i m_{ij}^T\end{aligned}$$

Damit lässt sich d_j und $M^{(j+1)}$ bestimmen durch

$$\begin{aligned}d_j &= v_j, \\m_{ji} &= v_i/d_i, \quad i = 1, \dots, j-1.\end{aligned}$$

Nach Definition $M = D^{-1}U$ gilt $m_{jj} = 1 \forall j$.

Die j -te Spalte von L lässt sich nun mit der unteren Hälfte von (1),

$$a_{ij} = L_{i*}^{(j)} v_j,$$

errechnen: Für $i = j + 1, \dots, n$ gilt

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \sum_{k=1}^j l_{ik} v_k \\ \Leftrightarrow l_{ij} v_j &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k. \end{aligned}$$

Beispiel

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

| | | | |
|----------|---|--|---------------------|
| v_i | = | Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| d_j | = | v_j | |
| m_{ji} | = | $\frac{v_i}{d_j}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| l_{ij} | = | $\frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, | $i = j+1, \dots, n$ |

$$j = 1: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \sum_{k=1}^1 l_{1k} v_k = l_{11} v_1 = v_1 \implies v_1 = 1 = d_1$$

$$l_{21} = \frac{a_{21} - \sum_{k=1}^0 l_{ik} v_k}{v_1} = \frac{a_{21}}{1} = 4$$

$$j = 2: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{12} = \sum_{k=1}^2 l_{1k} v_k = v_1 + 0 \implies v_1 = 3$$

$$a_{22} = \sum_{k=1}^2 l_{2k} v_k = 4 \cdot v_1 + v_2 \implies v_2 = -10 = d_2$$

$$m_{21} = \frac{v_1}{d_1} = \frac{3}{1} = 3$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10 \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Beispiel

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

| | | | |
|----------|---|--|---------------------|
| v_i | = | Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| d_j | = | v_j | |
| m_{ji} | = | $\frac{v_i}{d_j}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| l_{ij} | = | $\frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, | $i = j+1, \dots, n$ |

$$j = 1: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \sum_{k=1}^1 l_{1k} v_k = l_{11} v_1 = v_1 \implies v_1 = 1 = d_1$$
$$l_{21} = \frac{a_{21} - \sum_{k=1}^0 l_{ik} v_k}{v_1} = \frac{a_{21}}{1} = 4$$

$$j = 2: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{12} = \sum_{k=1}^2 l_{1k} v_k = v_1 + 0 \implies v_1 = 3$$
$$a_{22} = \sum_{k=1}^2 l_{2k} v_k = 4 \cdot v_1 + v_2 \implies v_2 = -10 = d_2$$
$$m_{21} = \frac{v_1}{d_1} = \frac{3}{1} = 3$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10 \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Beispiel

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

| | | | |
|----------|---|--|---------------------|
| v_i | = | Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| d_j | = | v_j | |
| m_{ji} | = | $\frac{v_i}{d_j}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| l_{ij} | = | $\frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, | $i = j+1, \dots, n$ |

$$j = 1: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \sum_{k=1}^1 l_{1k} v_k = l_{11} v_1 = v_1 \implies v_1 = 1 = d_1$$

$$l_{21} = \frac{a_{21} - \sum_{k=1}^0 l_{ik} v_k}{v_1} = \frac{a_{21}}{1} = 4$$

$$j = 2: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{12} = \sum_{k=1}^2 l_{1k} v_k = v_1 + 0 \implies v_1 = 3$$

$$a_{22} = \sum_{k=1}^2 l_{2k} v_k = 4 \cdot v_1 + v_2 \implies v_2 = -10 = d_2$$

$$m_{21} = \frac{v_1}{d_1} = \frac{3}{1} = 3$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10 \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Beispiel

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

| | | | |
|----------|---|--|---------------------|
| v_i | = | Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| d_j | = | v_j | |
| m_{ji} | = | $\frac{v_i}{d_j}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| l_{ij} | = | $\frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, | $i = j+1, \dots, n$ |

$$j = 1: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \sum_{k=1}^1 l_{1k} v_k = l_{11} v_1 = v_1 \implies v_1 = 1 = d_1$$

$$l_{21} = \frac{a_{21} - \sum_{k=1}^0 l_{ik} v_k}{v_1} = \frac{a_{21}}{1} = 4$$

$$j = 2: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{12} = \sum_{k=1}^2 l_{1k} v_k = v_1 + 0 \implies v_1 = 3$$

$$a_{22} = \sum_{k=1}^2 l_{2k} v_k = 4 \cdot v_1 + v_2 \implies v_2 = -10 = d_2$$

$$m_{21} = \frac{v_1}{d_1} = \frac{3}{1} = 3$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10 \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Beispiel

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

| | | | |
|----------|---|--|---------------------|
| v_i | = | Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| d_j | = | v_j | |
| m_{ji} | = | $\frac{v_i}{d_j}$, | $i = 1, \dots, j$ |
| l_{ij} | = | $\frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, | $i = j+1, \dots, n$ |

$$j = 1: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \sum_{k=1}^1 l_{1k} v_k = l_{11} v_1 = v_1 \implies v_1 = 1 = d_1$$

$$l_{21} = \frac{a_{21} - \sum_{k=1}^0 l_{ik} v_k}{v_1} = \frac{a_{21}}{1} = 4$$

$$j = 2: L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdot \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_{12} = \sum_{k=1}^2 l_{1k} v_k = v_1 + 0 \implies v_1 = 3$$

$$a_{22} = \sum_{k=1}^2 l_{2k} v_k = 4 \cdot v_1 + v_2 \implies v_2 = -10 = d_2$$

$$m_{21} = \frac{v_1}{d_1} = \frac{3}{1} = 3$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10 \end{bmatrix}, M^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- ▶ Da die Spalte j von A nach Schritt j nicht mehr benötigt wird, können – analog zur LU -Zerlegung – dort die berechneten l_{*j} , d_j sowie m_{*j}^\top abgespeichert werden:

$$\begin{bmatrix} d_1 & m_{12}^\top & \cdots & m_{1j}^\top & a_{1,j+1} & \cdots & a_{1n} \\ l_{21} & d_2 & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & m_{j-1,j}^\top & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & d_j & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & l_{j+1,j} & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & \cdots & \cdots & l_{nj} & a_{n,j+1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Algorithmischer Aufwand

1. $v_i =$ Lösung von $L_{i*}^{(j)} v = a_{ij}$, $i = 1, \dots, j$
2. $d_j = v_j$
3. $m_{ji} = \frac{v_i}{d_j}$, $i = 1, \dots, j$
4. $l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} v_k}{v_j}$, $i = j + 1, \dots, n$

1. Je j -fache Rücksubstitution $\implies \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^j 2k \in \mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$
2. Je eine Zuweisung $\implies \sum_{j=1}^n 1 = n$ flops
3. Je j -fache Division $\implies \sum_{j=1}^n j \in \mathcal{O}(\frac{n^2}{2})$ flops
4. Je $(n-j)$ -faches, j -maliges Aufsummieren und eine Division
 $\implies \sum_{j=1}^n (n-j) \cdot 2j = n^2(n+1) - \frac{n(n+1)(2n+1)}{3} = \frac{n^3-n}{3}$

Zusammen also $\mathcal{O}(n^3)$. In der Literatur findet sich ein Wert von $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3)$ für den gesamten Algorithmus.

LDL^T -Zerlegung für symmetrisches A

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und regulär. Dann gilt für ihre LDM^T -Zerlegung $L = M$.

Betrachte $L = \triangle$ und die Produkte $C = LAL^T$, $B = LA$.

Behauptung: C ist ebenfalls symmetrisch.

$$\begin{aligned}c_{ij} &= \sum_f b_{if} l_{fj}^T = \sum_f \left(\sum_k l_{ik} a_{kf} \right) l_{jf} \\&= \sum_f \sum_k l_{ik} a_{kf} l_{jf} \stackrel{a_{kf} = a_{fk}}{=} \sum_k \sum_f l_{jf} a_{fk} l_{ik} \\&= \sum_k \left(\sum_f l_{jf} a_{fk} \right) l_{ki}^T = \sum_k b_{jk} l_{ki}^T \\&= c_{ji}\end{aligned}$$

Also $C = LAL^T$ ist symmetrisch.

Damit

$$\begin{aligned} A &= LDM^T \text{ symmetrisch} \\ \Rightarrow M^{-1}AM^{-T} &= \underbrace{M^{-1}}_{\triangle} \cdot \underbrace{LD}_{\triangle} = \triangle \text{ ebenfalls symmetrisch} \\ \Rightarrow M^{-1}LD &\text{ ist Diagonalmatrix.} \end{aligned}$$

Da D regulär, muss auch $M^{-1}L$ eine Diagonalmatrix sein. Wegen $m_{ii} = l_{ii} = 1$ folgt $M^{-1}L = I$, also $M^{-1} = L^{-1} \Rightarrow M = L$.

Also existieren $L, D \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $L = \triangle$, $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ mit $A = LDL^T$.

Ist im Voraus bekannt, dass A symmetrisch ist, können beim Algorithmus sowohl Speicherplatz als auch flops eingespart werden.

Da im j -ten Schritt bereits l_{jk} für $k < j$ bekannt ist, entfällt das Lösen des $(j \times j)$ -Gleichungssystems $Lv = A$, da v auch durch $v = DM^T e_j = DL^T e_j$, d.h. ein Skalieren der bereits bekannten Werte l_{jk} durch d_k , berechnet werden kann:

$$v = \begin{pmatrix} d_1 \cdot l_{j1} \\ \vdots \\ d_{j-1} \cdot l_{j,j-1} \\ d(j) \end{pmatrix}$$

Es ergibt sich folgender Algorithmus.

```
1 for  $j = 1 : n$ 
2     for  $i = 1 : j - 1$ 
3          $v(i) = L(j, i)d(i)$ 
4     end
5      $v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)$ 
6      $d(j) = v(j)$ 
7      $L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) - L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)$ 
8 end
```

- ▶ Die Laufzeit der Zeilen 2-4 und 5 ergeben wieder eine Arithmetische Reihe, d.h. $\mathcal{O}(n^2)$
- ▶ Zeile 6 hat lineare Laufzeit in n
- ▶ An Zeile 7 hat sich im Vergleich zu vorher nichts verändert, sie bleibt in $\mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$

Damit hat der Algorithmus eine geringere Laufzeit von nur noch $\mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$, was auf die Symmetrie von A zurückzuführen ist.

A positiv definit

Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt positiv definit, falls für alle $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$x^T A x > 0$$

Anwendungen positiv definiten Matrizen umfassen bspw.

- ▶ Quadriken $x^T A x + b^T x = 1$: A bei Ellipsoiden hat nur positive Eigenwerte, ist deshalb auch pos. def.
- ▶ $X^T X$ ist pos. def. falls X vollen Rang hat.
- ▶ Optimierungsprobleme, strikt konvexe Funktion mit einem globalen Minimum

Positive Definitheit wird eher selten ohne gleichzeitige Symmetrie betrachtet, obwohl es solche Matrizen gibt, bspw. $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$.

Einschub: Rundungsfehler und Auslöschung

Arithmetische Operationen $+$, $-$, \cdot , $/$, aber auch $\sqrt[n]{x}$, $\operatorname{sincos} x$, $2^x - 1$, $y \cdot \log_2 x$, sowie $x^\top y$ für $x, y \in \mathbb{R}^n$, $n \leq 8$ usw. können als Maschinenbefehle ($\stackrel{?}{=} \text{flop}$) ausgeführt werden, wenn man mit einer Approximation (Maschinengenauigkeit \mathbf{u}) der Zahlen arbeitet:

- ▶ Single (float, $\mathbf{u} = \frac{2^{-23}}{2} \approx 10^{-7}$) bzw.
- ▶ Double Precision (double, $\mathbf{u} = \frac{2^{-52}}{2} \approx 10^{-16}$)

Standard IEEE-754-2008 beschreibt deren Aufbau und Rundungsverhalten.

↪ Geschwindigkeit aber auch Rundungsfehler v.a. wenn große und kleine Zahlen miteinander verrechnet werden.

Beispiel zu Auslöschung: 8-stellige Dezimalarithmetik

$$\begin{array}{r} 0,12345679 \quad \leftarrow \text{relativer Fehler} \approx 10^{-8} \\ -0,12345678 \\ \hline 0,00000001 \quad \leftarrow \text{relativer Fehler} \approx 1 \end{array}$$

A pos. def., nicht symmetrisch

Sei $\varepsilon > 0$, dann ist A positiv definit:

$$A = \begin{bmatrix} \varepsilon & m \\ -m & \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{m}{\varepsilon} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon + \frac{m^2}{\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{m}{\varepsilon} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = LDM^T$$

Falls $\frac{m}{\varepsilon} \gg 1$

- ▶ LDM^T -Zerlegung wird instabil
- ▶ stärkere Rundungsfehlern und damit verbunden Auslöschungen

Betrachtet man die Anteile der Symmetrie, $T = (A + A^T)/2$ und die der Asymmetrie, $S = (A - A^T)/2$, dann lässt sich die absolute Größe der Einträge in $LDM^T = A$ abschätzen durch

$$\| |L| \cdot \underbrace{|D|}_{(|d_{ij}|)_{ij}} \cdot |M^T| \|_F \leq n(\|T\|_2 + \|ST^{-1}S\|_2).$$

Beweis siehe Golub, Van Loan: „Unsymmetric Positive Definite Linear Systems“ (1979).

Wurde \hat{x} berechnet als Lösung zu $Ax = b$, dann beschreibt dieses Rundungsfehler-behaftete \hat{x} die Lösung des um $E \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gestörten Systems $(A + E)\hat{x} = b$.

E lässt sich nun abschätzen durch (c abhängig von $\|\hat{L}\|\hat{D}\|\hat{M}^T\|_F$)

$$\|E\|_F \in \mathcal{O}(n\|A\|_F + \mathbf{u}cn^2(\|A\|_2 + \|ST^{-1}S\|_2) + \mathbf{u}^2).$$

Golub und van Loan kommen zu dem Schluss, dass falls

$$\Omega = \frac{\|ST^{-1}S\|_2}{\|A\|_2}$$

„nicht zu groß“ ist, nicht pivotiert werden muss.

D.h. die Norm des asymmetrischen Anteils S darf im Vergleich zu dem des symmetrischen Teils T nicht zu groß werden.

Ist A symmetrisch, dann ist $S = 0$ und damit ebenfalls $\Omega = 0$.

A symmetrisch und positiv definit

Eine Eigenschaft symmetrisch positiver Matrizen ist, dass ihre Elemente auf der Hauptdiagonalen alle anderen dominieren (ohne Beweis).

Für A sym. pos. def. existiert $LDL^T = A$ und ist stabil zu berechnen.

L ist eine strikte untere Dreiecksmatrix, d.h. für ihre Einträge auf der Hauptdiagonalen gilt $l_{jj} = 1$.

Die Diagonalmatrix D enthält wegen A pos. def. nur positive Einträge auf der Diagonalen.

Deshalb lässt sich D nun in die beiden Faktoren L bzw. L^T integrieren, sodass eine neue Zerlegung von A entsteht.

Cholesky-Zerlegung

Sei $G = L \operatorname{diag}(\sqrt{d_1}, \dots, \sqrt{d_n})$, dann $\mathbb{R}^{n \times n} \ni G = \triangle$ und es gilt:

$$A = GG^T.$$

G wird auch Cholesky-Dreieck genannt.

Offenbar

$$\begin{aligned} GG^T &= (L \operatorname{diag}(\sqrt{d_i})_i)(\operatorname{diag}(\sqrt{d_i})_i L^T) \\ &= L \operatorname{diag}(d_i)_i L^T = LDL^T. \end{aligned}$$

Das System $Ax = b$ lässt sich nun wieder durch zweifache Rücksubstitution $Gy = b$ und $G^T x = y$ lösen. Dann

$$b = Gy = G(G^T x) = (GG^T)x = Ax.$$

Ein Vorteil ist, dass nur eine Dreiecksmatrix G abgespeichert werden muss.

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
    for i = 1 : j - 1
        v(i) = L(j, i)d(i)
    end
    v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
    d(j) = v(j)
    L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
        L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- ▶ $j = 1$: $v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1$,
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- ▶ $j = 2$: $v_1 = l_{21}d_1 = -2$,
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
  for i = 1 : j - 1
    v(i) = L(j, i)d(i)
  end
  v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
  d(j) = v(j)
  L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
    L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- $j = 1: v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1,$
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- $j = 2: v_1 = l_{21}d_1 = -2,$
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
  for i = 1 : j - 1
    v(i) = L(j, i)d(i)
  end
  v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
  d(j) = v(j)
  L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
    L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- ▶ $j = 1: v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1,$
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- ▶ $j = 2: v_1 = l_{21}d_1 = -2,$
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
  for i = 1 : j - 1
    v(i) = L(j, i)d(i)
  end
  v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
  d(j) = v(j)
  L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
    L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- ▶ $j = 1$: $v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1$,
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- ▶ $j = 2$: $v_1 = l_{21}d_1 = -2$,
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
  for i = 1 : j - 1
    v(i) = L(j, i)d(i)
  end
  v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
  d(j) = v(j)
  L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
    L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- ▶ $j = 1$: $v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1$,
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- ▶ $j = 2$: $v_1 = l_{21}d_1 = -2$,
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Beispiel

$A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$ positiv
definit und symmetrisch.

```
for j = 1 : n
    for i = 1 : j - 1
        v(i) = L(j, i)d(i)
    end
    v(j) = A(j, j) - L(j, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)
    d(j) = v(j)
    L(j + 1 : n, j) = (A(j + 1 : n, j) -
        L(j + 1 : n, 1 : j - 1)v(1 : j - 1)) / v(j)
end
```

LDL^T -Zerlegung:

- ▶ $j = 1: v_1 = a_{11} - 0 = 2 = d_1,$
 $l_{21} = \frac{a_{21} - 0}{v_1} = -1$
- ▶ $j = 2: v_1 = l_{21}d_1 = -2,$
 $v_2 = a_{22} - l_{21}v_1 = 3 = d_2$

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}}_D \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_G \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{G^T}$$

Effizienter Algorithmus für Cholesky-Zerlegung

Der Algorithmus wird $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zerlegen in $\beta \in \mathbb{R}$, $v \in \mathbb{R}^{n-1}$ und eine neue Matrix $A' \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$, mit denen diese Prozedur dann wiederholt wird.

Betrachte die Partitionierung

$$A = \begin{bmatrix} \alpha & v^\top \\ v & B \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \beta & 0 \\ \frac{v}{\beta} & I_{n-1} \end{bmatrix}}_{G_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & B - \frac{1}{\alpha} v v^\top \end{bmatrix}}_{A'} \underbrace{\begin{bmatrix} \beta & \frac{v^\top}{\beta} \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix}}_{G_1^\top},$$

dann ist $\beta = \sqrt{\alpha}$. Wegen A pos. def. gilt $\alpha > 0$.

Es ergibt sich A' aus der Teilmatrix B aktualisiert durch das skalierte äußere Produkt $-\frac{1}{\alpha} v v^\top$.

Soll diese Vorschrift induktiv fortgesetzt werden, so bleibt zu zeigen, dass A' immernoch positiv definit ist.

Zeige zunächst allgemeiner:

- ▶ Für $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv definit und $X \in \mathbb{R}^{n \times k}$ mit Rang k gilt $B = X^T A X \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ist positiv definit.

Falls für $z \in \mathbb{R}^k$ gilt

$$0 \geq z^T B z = (Xz)^T A (Xz),$$

dann $Xz = 0$, da A positiv definit ist.

Da X aber vollen Spaltenrang k hat, ist sein Kern $\{0\}$, d.h.

$$Xz = 0 \iff z = 0.$$

Also $z^T B z \leq 0 \iff z = 0$, damit ist die neue Matrix B ebenfalls positiv definit.

$A' = B - \frac{1}{\alpha}vv^T$ positiv definit

Sei $X = \begin{bmatrix} \frac{1}{\beta} & -\frac{v^T}{\beta^2} \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Für X^TAX gilt mit Obigem positive Definitheit. Andererseits ist

$$X^T G_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\beta} & 0 \\ -\frac{v}{\beta^2} & I_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ \frac{v}{\beta} & I_{n-1} \end{bmatrix} = I,$$

d.h. $B - \frac{1}{\alpha}vv^T$ ist eine Teilmatrix von

$X^TAX = X^T G_1 A' G_1^T X = A'$ und damit auch positiv definit.

Also sind alle Voraussetzungen erfüllt und es lässt sich nun G_2 und ein A'' mit dem selben Verfahren aus A' erzeugen. Damit

$$A = G_1 G_2 \dots G_{n-1} G_n \cdot I_n \cdot G_n^T G_{n-1}^T \dots G_2^T G_1^T$$

Cholesky-Zerlegung mittels äußeres-Produkt-Updates

Es ergibt sich folgender Algorithmus.

```
1 for  $k = 1 : n$ 
2    $A(k, k) = \sqrt{A(k, k)}$            /*  $\beta$  */
3    $A(k + 1 : n, k) = A(k + 1 : n, k) / A(k, k)$    /*  $\frac{v}{\beta}$  */
4   for  $j = k + 1 : n$ 
5      $A(j : n, j) = A(j : n, j) - A(j : n, k)A(j, k)$  /*  $B_{*j} - vv_j^T / \beta$  */
6   end
7 end
```

Zeile 5 führt die Anpassung von B mittels des äußeren Produkts vv^T durch.

Die Matrix $G = G_1 G_2 \dots G_n$ wird an alten Positionen im unteren Dreieck von A gespeichert, wo sich je die Vektoren v im Schritt k befanden.

Laufzeit wieder in $\mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$, wegen der Neuberechnung von $B \in \mathbb{R}^{n-k \times n-k}$ in jedem Schritt $1 \leq k \leq n$ (Zeilen 4-6).

Cholesky-Zerlegung mittels GAXPY

∃ weitere Algorithmen, mit Wertlegung auf sogenannte GAXPY-Operationen (Ax plus y)

- ▶ häufig anzutreffende Operation in numerischen Verfahren
- ▶ schnell in Hardware, siehe oben:
 $x^\top y$ für $x, y \in \mathbb{R}^n$, $n \leq 8$ existiert bereits als Maschinenbefehl auf neueren CPUs – solche mit AVX-Instruktionserweiterung

```
1 for j = 1 : n
2     if j > 1
3          $A(j : n, j) = A(j : n, j) - A(j : n, 1 : j - 1)A(j, 1 : j - 1)^\top$  /* GAXPY */
4     end
5      $A(j : n, j) = A(j : n) / \sqrt{A(j, j)}$  /* scaled GAXPY operation */
6 end
```

Dieser Algorithmus benötigt nur halb so viele Vektoroperationen wie der Obige, läuft allerdings auch in $\mathcal{O}(\frac{n^3}{3})$.

A sym. pos. def. \implies Cholesky-Zerlegung existiert und Algorithmus findet je immer positive α , sodass $\sqrt{\alpha}$ existiert.

In der anderen Richtung ergibt sich, dass falls ein nichtpositives α im Algorithmus gefunden wird, A nicht sym. pos. def. war.

Zur Stabilität:

Der Einträge in G sind begrenzt durch die Diagonaleinträge von A :

$$\|A\|_2 = \|GG^T\|_2 = \|G\|_2^2 \implies g_{ij}^2 \leq \sum_{k=1}^i g_{ik}^2 = a_{ii}$$

Der Rundungsfehler einer Lösung \hat{x} von $(A + E)\hat{x} = b$ wird begrenzt durch

$$\|E\|_2 \leq c_n \mathbf{u} \|A\|_2,$$

wobei c_n eine kleine, von n abhängige Konstante ist (siehe Wilkinson 1968).

A symmetrisch und positiv semidefinit

A ist positiv semidefinit, falls $\forall x \in \mathbb{R}^n : x^\top Ax \geq 0$.

Einige Eigenschaften:

1. $|a_{ij}| \leq (a_{ii} + a_{jj})/2$
2. $|a_{ij}| \leq \sqrt{a_{ii}a_{jj}}$
3. $\max_{i,j} |a_{ij}| = \max_i a_{ii}$
4. $a_{ii} = 0 \implies a_{i*} = a_{*i} = 0$

Denn:

1. $x = e_i + e_j \implies 0 \leq x^\top Ax = a_{ii} + a_{jj} + 2a_{ij}$ und
 $x = e_i - e_j \implies 0 \leq x^\top Ax = a_{ii} + a_{jj} - 2a_{ij}$.
2. O.E. $i = 1, j = 2$, dann da $A(1 : 2, 1 : 2)$ ebenfalls pos. semidef. ist, gilt $\forall x$

$$0 \leq \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix}^\top \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix} = a_{11}x^2 + 2a_{12}x + a_{22}$$

\implies Diskriminante $4a_{12}^2 - 4a_{11}a_{22}$ der quadratischen Gleichung muss negativ sein.

3. bzw. 4. folgen aus 1. bzw. 2.

Eine Cholesky-ähnliche Operation lässt sich auch auf symmetrisch pos. semidef. Matrizen anwenden.

Angenommen $a_{kk} = 0$, dann folgt mit 4., dass $a_{ik} = a_{ki} = 0$ ($k \leq i \leq n$) und es bleibt im Algorithmus für G_k nichts zu tun.

Es ergibt sich durch einfache Abfrage auf $a_{kk} > 0$

```
1 for k = 1 : n
2     if A(k, k) > 0
3         A(k, k) = sqrt(A(k, k))
4         A(k + 1 : n, k) = A(k + 1 : n, k) / A(k, k)
5         for j = k + 1 : n
6             A(j : n, j) = A(j : n, j) - A(j : n, k)A(j, k)
7         end
8     end
9 end
```

Rundungsfehler können bei der Abfrage jedoch fehlerhafte „wahr“-Instanzen liefern, die im Folgenden dann Zeile 4 deutlich falsche Ergebnisse liefern.

Symmetrisches Pivotieren

Um sich stark auswirkende Rundungsfehler zu vermeiden wurde bisher mit Pivotierung gearbeitet.

$P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ Permutationsmatrix $\implies PA$ hat dieselben Zeilen wie A , jedoch anders sortiert \implies Symmetrie bleibt nicht erhalten.

Eine die Symmetrie erhaltende Permutation wird durch PAP^T erreicht, bei der die Diagonalelemente auf der Diagonalen bleiben, jedoch anders angeordnet werden.

P von links sortiert die Zeilen um, die Inverse P^T von rechts sortiert die Spalten um.

Beispiel zum symmetrischen Pivotieren

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ = & \begin{bmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ = & \begin{bmatrix} a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{21} \\ a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{31} \\ a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{41} \\ a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{11} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Quellen

- ▶ Prof. Dr. Schulz, Skript Numerik '08/'09, Trier
- ▶ L.N. Trefethen, D. Bau, „Numerical Linear Algebra“
- ▶ G.H. Golub, C.T. van Loan, „Matrix computations“