Vorlesung: Numerik 1 für Ingenieure

Version 21.10.14

Michael Karow

3. Vorlesung

Themen: Cholesky-Zerlegung und positive Definitheit

Satz von der Cholesky-Zerlegung

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine **symmetrische** und **positiv definite** Matrix.
Dann gibt es genau eine untere Dreiecksmatrix $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit positiven Diagonalelementen, so dass

$$A = L\,L^T.$$

Beispiel:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 25 & -5 & 15 \\ -5 & 10 & -15 \\ 15 & -15 & 29 \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 3 & -4 & 2 \end{bmatrix}}_{L} \underbrace{\begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}}_{L^T}.$$

Beachte: Anders als bei der LR-Zerlegung sind die Diagonalelemente des Cholesky-Faktors L (meistens) von 1 verschieden.

Andre-Louis Cholesky (1875-1918)
Cholesky-Zerlegung 1924 veröffentlicht.

Zur Herstellung der Cholesky-Zerlegung gibt es (mindestens) 2 wesentlich verschiedene Algorithmen.

1. Cholesky-Algorithmus:

Eingabe: symmetrische positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Für $j = 1, \ldots, n$

Berechne $\ell_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{jk}^2}$

Für $i = j+1, \ldots, n$

Berechne $\ell_{ij} := \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{ik}\ell_{jk}\right)/\ell_{jj}$

Kommentar: Dieser Algorithmus berechnet die Elemente von $L = [\ell_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times n}$, die in der unteren Hälfte (einschließlich der Diagonale) stehen.

Er arbeitet mit **Koeffizientenvergleich**.

Beispiel zum Koeffizientenvergleich:

Der Ansatz

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ell_{11} & 0 & 0 \\ \ell_{21} & \ell_{22} & 0 \\ \ell_{31} & \ell_{32} & \ell_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_{11} & \ell_{21} & \ell_{31} \\ 0 & \ell_{22} & \ell_{32} \\ 0 & 0 & \ell_{33} \end{bmatrix}$$

führt auf die Gleichungen:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \ell_{11}^2 \\ a_{21} &= \ell_{11}\,\ell_{21} \\ a_{31} &= \ell_{11}\,\ell_{31} \\ a_{22} &= \ell_{21}^2 + \ell_{22}^2 \\ a_{32} &= \ell_{31}\ell_{21} + \ell_{32}\ell_{22} \\ a_{33} &= \ell_{33}^2 + \ell_{31}^2 + \ell_{32}^2 \end{aligned}$$

Umstellen ergibt:

$$\begin{aligned} \ell_{11} &= \sqrt{a_{11}} \\ \ell_{21} &= a_{21}/\ell_{11} \\ \ell_{31} &= a_{31}/\ell_{11} \\ \ell_{22} &= \sqrt{a_{22} - \ell_{21}^2} \\ \ell_{32} &= (a_{32} - \ell_{31}\ell_{21})/\ell_{22} \\ \ell_{33} &= \sqrt{a_{33} - \ell_{31}^2 - \ell_{32}^2} \end{aligned}$$

2. Cholesky-Algorithmus:

Eingabe: symmetrische positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Für $j = 1, \ldots, n$

Berechne $a_{jj} := \sqrt{a_{jj}}$

Für $i = j+1, \ldots, n$

Berechne $a_{ij} := a_{ij}/a_{jj}$

Für $k = j+1, \ldots, i$

Berechne $a_{ik} := a_{ik} - a_{ij}a_{kj}$

Kommentar: Dieser Algorithmus überschreibt die untere Hälfte von A (einschließlich die Diagonale) mit den Einträgen von L.
Mit anderen Worten: nach der Durchrechnung gilt

$$a_{ij} = \ell_{ij} \qquad \text{für } i \geq j.$$

Der obige Algorithmus arbeitet mit **quadratischer Ergänzung**.

Mehr dazu am Ende des Vortrags.

2. Cholesky-Algorithmus, Variante:

Eingabe: symmetrische positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Für $j = 1, \ldots, n$

  Berechne $\ell_{jj} := \sqrt{a_{jj}}$

  Für $i = j+1, \ldots, n$

    Berechne $\ell_{ij} := a_{ij}/\ell_{jj}$

    Für $k = j+1, \ldots, i$

      Berechne $a_{ik} := a_{ik} - \ell_{ij}\ell_{kj}$

Kommentar: Dieser Algorithmus unterscheidet sich von dem vorangehenden nur dadurch, dass die Ergebnisse in der Matrix $L = [\ell_{ij}]$ abgespeichert werden und nicht in A.

Auf den folgenden Seiten werden folgende Fragen besprochen:

- Warum gibt es eine Cholesky-Zerlegung nur für positiv definite Matrizen?
- Was heißt überhaupt positiv definit?
- Wie kann man Definitheit erkennen?
- Warum ist positive Definitheit ein wichtiger Begriff?
- Wo kommen positiv definite Matrizen in den Anwendungen vor?

Quadratische Formen
und
Definitheit

Das Skalarprodukt als Matrixprodukt und der Term $x^T Ax$.

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \ y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$ ist bekanntlich

$$x \cdot y = x_1 \, y_1 + \ldots + x_n \, y_n = \sum_{j=1}^{n} x_j \, y_j .$$

Man kann das Skalarprodukt auch als Matrixprodukt schreiben, indem man zunächst den Vektor x transponiert und ihn dann nach den Regeln der Matrixmultiplikation mit y multipliziert:

$$x^T y = [\, x_1 \ \ldots \ x_n \,] \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{n} x_j \, y_j = x \cdot y .$$

Setzt man nun $y = Ax$ mit einer Matrix $A = [a_{jk}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dann bekommt man

$$x^T A x \quad = \quad x^T y = \sum_{j=1}^{n} x_j \, y_j = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{k=1}^{n} a_{jk} \, x_k \right) = \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} a_{jk} \, x_j \, x_k .$$

Quadratische Formen

Definition:

Eine quadratische Form in den Variablen $x_1, \ldots, x_n$ ist ein Ausdruck der Gestalt

$$q_A(x) = x^T A x = \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} a_{jk}\, x_j\, x_k.$$

Dabei kann man annehmen, dass die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch ist.

Beispiel: quadratische Form in zwei Variablen

Sei $A = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 8 & 4 \end{bmatrix}$ (unsymmetrisch). Dann ist

$$\begin{aligned}
q_A(x) &= x^T A\, x \\
&= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 8 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\
&= 2\, x_1^2 - 2\, x_1 x_2 + 8\, x_2 x_1 + 4\, x_2^2 \\
&= 2\, x_1^2 + 3\, x_1 x_2 + 3\, x_2 x_1 + 4\, x_2^2 \\
&= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}}_{=:\widetilde{A}} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x^T \widetilde{A}\, x = q_{\widetilde{A}}(x).
\end{aligned}$$

Die Matrix $\widetilde{A}$ ist symmetrisch.

Beispiel: quadratische Formen in 4 Variablen

Es ist

$$x_2^2 + 7\,x_1 x_2 - x_4^2 \;=\; \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 & 3.5 & 0 & 0 \\ 3.5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 \;&=\; \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \\ &=\; x^T I\, x \qquad I = \text{Einheitsmatrix} \\ &=\; x^T x. \end{aligned}$$

Definitheit von quadratischen Formen

Eine quadratische Form (bzw. die zugehörige Matrix) heißt

positiv definit	falls	$x^T A\, x > 0$ für alle $x \neq 0$,
positiv semidefinit	falls	$x^T A\, x \geq 0$ für alle x,
negativ definit	falls	$x^T A\, x < 0$ für alle $x \neq 0$,
negativ semidefinit	falls	$x^T A\, x \leq 0$ für alle x,
indefinit	sonst.	

Beachte: Eine definite Matrix ist immer auch semidefinit.

Beispiel: Sei A eine Diagonalmatrix:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Dann ist

$$x^T A\, x = a_{11}\, x_1^2 + a_{22}\, x_2^2 + \ldots + a_{nn}\, x_n^2.$$

A ist genau dann positiv definit, wenn alle Diagonalelemente positiv sind.

A ist genau dann positiv semidefinit, wenn alle Diagonalelemente nicht negativ sind.

A ist genau dann indefinit, wenn 2 Diagonalelemente verschiedenes Vorzeichen haben.

Ein notwendiges Kriterium für positive Definitheit

Wenn eine symmetrische Matrix $A = [a_{jk}]$ positiv definit ist, dann sind alle ihre Diagonalelemente positiv.

Beweis: Sei

$$e_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \leftarrow \ k\text{-te Zeile} \\ \\ \\ \\ \end{matrix}$$

Man bestätigt leicht, dass $e_k^T A e_k = a_{kk}$, wobei a_{kk} das k-te Diagonalelement von A ist. Wenn A positiv definit ist, dann folgt

$$a_{kk} = e_k^T A e_k > 0$$

Anwendungsbeispiel: Die Matrix

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & -6 \\ 3 & 7 & 4 & 8 \\ 0 & 4 & -2 & 7 \\ -6 & 8 & 7 & 1 \end{bmatrix}$$

ist nicht positiv definit, denn $a_{33} = -2 \leq 0$.

Warnung:
Ob eine Matrix positiv definit ist, entscheidet sich nicht allein an den Diagonalelementen.

Beispiel: Die Matrix $A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix}$ hat positive Diagonalelemente. Dennoch ist A nicht positiv definit.

<u>Begründung:</u> Allgemein hat man

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 2\,x^2 + 6\,x_1\,x_2 + 2\,x_2^2.$$

Wählt man speziell $x_1 = 1$, $x_2 = -1$, dann folgt

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 2 * 1^2 + 6 * 1 * (-1) + 2 * (-1)^2 = -2 < 0.$$

Zur Motivation: Wo kommen definite quadratische Formen vor?

1. Mechanik

Linearisierte Differentialgleichung eines mechanischen Systems mit den Freiheitsgraden $u(t) \in \mathbb{R}^n$ (siehe Beispiel auf nächster Seite):

$$\boxed{M\,\ddot{u}(t) + D\,\dot{u}(t) + S\,u(t) = f(t). \qquad (*)}$$

wobei

M	=	Massenmatrix
D	=	Dämpfungsmatrix
S	=	Steifigkeitsmatrix
f	=	äußere Kräfte (Last)

Definite quadratischen Formen:

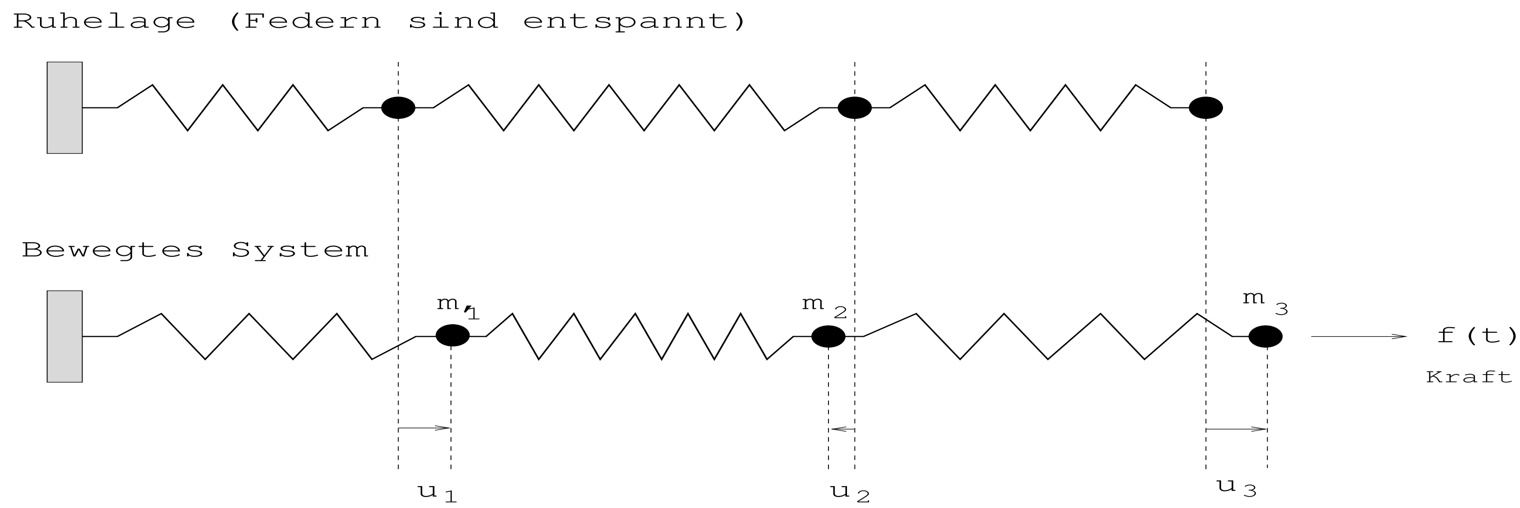
Kinetische Energie: $E_{kin} = \frac{1}{2}\,\dot{u}^T M \dot{u} > 0$

Elastische Energie: $E_{elast} = \frac{1}{2}\,u^T S u \geq 0$

Energiedissipation: $\dot{u}^T D \dot{u} \geq 0$
(Reibungsverlust)

Aus $(*)$ folgt die Energiebilanz: $$\frac{d}{dt}(E_{kin} + E_{elast}) = \dot{u}^T f - \dot{u}^T D \dot{u}.$$

Konkretes Beispiel: Ein Feder-Masse-System (hier ohne Dämpfung)



Energien: (s_j= Federsteifigkeiten)

$$E_{elast} = \frac{s_1}{2}\, u_1^2 + \frac{s_2}{2}(u_2 - u_1)^2 + \frac{s_3}{2}(u_3 - u_2)^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} s_1 + s_2 & -s_2 & 0 \\ -s_2 & s_2 + s_3 & -s_3 \\ 0 & -s_3 & s_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}$$

$$E_{kin} = \frac{m_1}{2}\, \dot{u}_1^2 + \frac{m_2}{2}\, \dot{u}_2^2 + \frac{m_3}{2}\, \dot{u}_3^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{u}_2 \\ \dot{u}_3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} m_1 & & \\ & m_2 & \\ & & m_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{u}_2 \\ \dot{u}_3 \end{bmatrix}$$

Bewegungsgleichung:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} m_1 & & \\ & m_2 & \\ & & m_3 \end{bmatrix}}_{M} \begin{bmatrix} \ddot{u}_1(t) \\ \ddot{u}_2(t) \\ \ddot{u}_3(t) \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} s_1 + s_2 & -s_2 & 0 \\ -s_2 & s_2 + s_3 & -s_3 \\ 0 & -s_3 & s_3 \end{bmatrix}}_{S} \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ f(t) \end{bmatrix}$$

2. Diskretisierte Wärmeleitungsgleichung (Finite Elemente Methode)

Stationäre Wärmeleitungsgleichung auf Gebiet Ω:

$$\boxed{-\mathrm{div}(\lambda \nabla T) = f}$$

Ansatz für das Temperaturfeld:

$$\boxed{T(x) = u_1\,\phi_1(x) + u_2\,\phi_2(x) + \ldots + u_n\,\phi_n(x)}$$

mit

$$\begin{array}{lcl} u_k & = & \text{Knotentemperaturen,} \\ \phi_k & = & \text{Hütchenfunktionen.} \end{array}$$

Diskretisierte Wärmeleitungsgleichung:

$$\boxed{S\,u = p}$$

mit $u = [u_1 \;\; u_2 \;\; \ldots u_n]^T$ und der "Steifigkeitmatrix"

$$S = [s_{jk}] \in \mathbb{R}^{n\times n}, \qquad s_{jk} = \int_\Omega \lambda\,(\nabla\phi_j)^T \nabla\phi_k$$

Es ist

$$u^T S u = \int_\Omega \lambda \|\nabla(u_1\phi_1 + u_2\phi_2 + \ldots + u_n\phi_n)\|^2 \;\geq 0.$$

$\Rightarrow$ S ist semidefinit. (Nach Einbau der Randbedingungen sogar definit).

3. Analysis: Lokale Extrema

Gegeben: Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Taylorentwicklung um $x \in \mathbb{R}^n$ bis 2. Ordnung:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_k}(x)\, h_k + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(x)\, h_j\, h_k + o(\|h\|^2) \\ &= f(x) + \nabla f(x)^T h + \frac{1}{2} h^T H_f(x)\, h + o(\|h\|^2), \end{aligned}$$

mit der Hesse-Matrix

$$H_f(x) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(x) \right]_{jk}.$$

Notwendig für lokales Minimum an der Stelle x:

$$\nabla f(x) = 0, \qquad H_f(x) \text{ positiv semidefinit.}$$

Hinreichend für lokales Minimum an der Stelle x:

$$\nabla f(x) = 0, \qquad H_f(x) \text{ positiv definit.}$$

Das Eigenwertkriterium für Definitheit

Erinnerung: $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt Eigenwert von $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, falls es $0 \neq v \in \mathbb{R}^n$ gibt, so dass

$$Av = \lambda\, v.$$

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

1. Alle Eigenwerte von A sind reell.
2. Die Eigenvektoren können so gewählt werden, dass sie eine Orthonormalbasis des $\mathbb{R}^n$ bilden.
3. Die Matrix A ist genau dann positiv (semi)definit, wenn alle Eigenwerte positiv (nichtnegativ) sind.

Begründung für das Eigenwertkriterium:

Sei $v_1, v_2, \ldots, v_n \in \mathbb{R}^n$ eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren:

$$Av_j = \lambda_j\, v_j, \qquad v_j^T v_k = \begin{cases} 1 & \text{falls } j = k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Jeder Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ lässt sich in folgender Form schreiben:

$$x = x_1\, v_1 + x_2\, v_2 + \ldots + x_n\, v_n, \qquad x_j \in \mathbb{R}.$$

Eine direkte Rechnung ergibt dann: $\qquad x^T A x = \lambda_1\, x_1^2 + \lambda_2\, x_2^2 + \ldots + \lambda_n\, x_n^2.$

Prüfung auf Definitheit mit quadratischer Ergänzung.

Eine quadratische Form in 2 Variablen kann man durch quadratische Ergänzung in eine Summe oder Differenz von Quadraten verwandeln.

(Methode: $a^2 + 2\,a\,b = a^2 + 2\,a\,b + b^2 - b^2 = (a+b)^2 - b^2$.)

Beispiel 1:

$$\begin{aligned} 9\,x_1^2 - 24\,x_1 x_2 + 41\,x_2^2 &= (3x_1)^2 + 2(3x_1)(-4x_2) + 41\,x_2^2 \\ &= (3x_1)^2 + 2(3x_1)(-4x_2) + (\mathbf{-4\,x_2})^{\mathbf{2}} - (\mathbf{-4\,x_2})^{\mathbf{2}} + 41\,x_2^2 \\ &= (3x_1 - 4x_2)^2 - (-4x_2)^2 + 41\,x_2^2 \\ &= (3x_1 - 4x_2)^2 + (5x_2)^2. \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Die Form ist positiv definit.

Beispiel 2:

$$\begin{aligned} 36\,x_1^2 + 4\,x_1\,x_2 &= (6\,x_1)^2 + 2\,(6\,x_1)\,(\frac{1}{3}\,x_2) \\ &= (6\,x_1)^2 + 2\,(6\,x_1)\,(\frac{1}{3}\,x_2) + (\frac{1}{3}\,x_2)^2 - (\frac{1}{3}\,x_2)^2 \\ &= (6\,x_1 + \frac{1}{3}\,x_2)^2 - (\frac{1}{3}\,x_2)^2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Die Form ist indefinit.

Um dies zu sehen wähle z.B. $x_2 = 1$ und x_1 so dass $6\,x_1 + \frac{1}{3}\,x_2 = 0$.

Allgemeiner 2× 2 Fall (für $a \neq 0$):

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \underbrace{\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}}_{=A} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} &= a\,x_1^2 + 2b\,x_1 x_2 + c\,x_2^2 \\
&= a\left(x_1^2 + 2\frac{b}{a}\,x_1 x_2\right) + c\,x_2^2 \\
&= a\left(x_1^2 + 2\frac{b}{a}\,x_1 x_2 + \left(\frac{b}{a}\right)^2\, x_2^2\right) \\
&\quad -\frac{b^2}{a} x_2^2 + c\,x_2^2 \\
&= a\left(x_1 + \frac{b}{a}\,x_2\right)^2 + \left(c - \frac{b^2}{a}\right) x_2^2 \\
&= a\left(x_1 + \frac{b}{a}\,x_2\right)^2 + \frac{1}{a}\underbrace{\left(ac - b^2\right)}_{=\det(A)} x_2^2
\end{aligned}$$

Folgerung: A ist positiv definit genau dann, wenn

$$a > 0 \qquad \text{und} \qquad \det(A) > 0.$$

Das Determinantenkriterium für positive Definitheit

Das auf der letzten Folie hergeleitete Kriterium für positive Definitheit einer 2×2 Matrix lässt sich verallgemeinern.

Satz: Eine symmetrische Matrix $A = [a_{jk}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist genau dann positiv definit, wenn die Determinanten aller linken oberen Untermatrizen positiv sind, d.h.

$$\det[a_{11}] = a_{11} > 0, \quad \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} > 0, \quad \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} > 0, \quad \ldots \quad \det(A) > 0.$$

Zusammenhang: Quadratische Ergänzung und Cholesky-Zerlegung

Beispiel:

$$q_A(x) = x^T A\, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 25 & -5 & 15 \\ -5 & 10 & -15 \\ 15 & -15 & 29 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$= 25x_1^2 - 10x_1x_2 + 30x_1x_3 + 10x_2^2 - 30x_2x_3 + 29x_3^2$$

Mit quadratischer Ergänzung folgt:

$$\begin{aligned} q_A(x) &= (5x_1)^2 + 2(5x_1)(-x_2+3x_3) + \mathbf{(-x_2+3x_3)^2} - \mathbf{(-x_2+3x_3)^2} \\ &\quad +10x_2^2 - 30x_2x_3 + 29x_3^2 \\ &= (5x_1 - x_2 + 3x_3)^2 + \text{ quad. Form in } x_2, x_3 \\ &\vdots \\ &= (5x_1 - x_2 + 3x_3)^2 + (3x_2 - 4x_3)^2 + (2x_3)^2 \\ &= y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = y^T y \end{aligned}$$

mit

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5x_1 - x_2 + 3x_3 \\ 3x_2 - 4x_3 \\ 2x_3 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}}_{=:L^T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

Insgesamt: $x^T A\, x = y^T y = (L^T x)^T (L^T x) = x^T L L^T x. \qquad \Rightarrow \qquad A = LL^T.$

Zur Frage

'Warum gibt es eine Cholesky-Zerlegung nur für positiv definite Matrizen?'

Allgemein gilt: Sei $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nicht singulär (invertierbar).
Dann ist die Matrix $A = B^T B$ positiv definit.

Begründung:

Sei $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$. Setze $y = Bx$. Dann ist auch $y \neq 0$, weil B nicht singulär.
Es folgt weiter:

$$x^T A x = x^T B^T B x = (Bx)^T B x = y^T y = y_1^2 + y_2^2 + \ldots + y_n^2 > 0.$$

$\Rightarrow$ A ist positiv definit.

Folgerung: Wenn $A = LL^T = (L^T)^T \underbrace{(L^T)}_{B}$ und $\det(L) \neq 0$, dann ist A positiv definit.

Cholesky-Zerlegung mit Matlab

`R=chol(A)` ergibt eine obere Dreiecksmatrix `R` so dass `R'R=A`.

`L=chol(A,'lower')` ergibt eine untere Dreiecksmatrix `L` so dass `L*L'=A`.

Wenn `A` nicht symmetrisch und positiv definit ist, bekommt man eine Fehlermeldung.