Παραγοντοποίηση Cholesky

ΔΠΜΣ Πληροφορικής και Υπολογιστικής Βιοϊατρικής

Δρ. Αρετάκη Αικατερίνη

Απρίλιος 2024

1. Παραγοντοποίηση Cholesky

Βασικοί Ορισμοί

- Αν $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι συμμετρικός, τότε δε χρειάζεται να αποθηκεύσουμε όλα τα n^2 στοιχεία του. Αρκούν τα στοιχεία του κάτω (ή άνω) τριγωνικού μέρους του, πλήθους $n(n+1)/2$.

- Μπορούμε να εκμεταλλευτούμε τη συμμετρία του A ώστε να τον παραγοντοποιήσουμε σε ένα γινόμενο ενός κάτω κι ενός άνω τριγωνικού πίνακα όπου ο ένας θα αποτελεί τον ανάστροφο του άλλου και άρα θα αρκεί η αποθήκευση ενός από τους δύο παράγοντες?

- Η απάντηση είναι καταφατική αν A είναι:
  - Συμμετρικός: $A = A^T$
  - Θετικά ορισμένος: $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0, \ \forall \ \mathbf{x} \neq 0$.

<u>Π.χ.</u>: $A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$ είναι θετικά ορισμένος, γιατί για $0 \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ έχουμε

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = 3x_1^2 + (x_1 + x_2)^2 + 2x_2^2 + (x_2 + x_3)^2 + 3x_3^2 > 0,$$

όπου η ισότητα ισχύει μόνο αν $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = 0$.

Παραγοντοποίηση Cholesky

Η μέθοδος Cholesky αναφέρεται στην ειδική διάσπαση που χαρακτηρίζει τους συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες. Ειδικότερα, ισχύει:

Θεώρημα

Ένας συμμετρικός πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *μπορεί να τεθεί στη μορφή*

$$A = LL^T,$$

όπου L *είναι (μοναδικός) κάτω τριγωνικός πίνακας με* $l_{ii} > 0$, $i = 1, \ldots, n$ *αν και μόνο αν είναι θετικά ορισμένος.*

- L καλείται παράγοντας Cholesky.
- Ο υπολογισμός των ℓ_{ij}, $i = 1, \ldots, n$, $j = 1, \ldots, i$ γίνεται όπως στη μέθοδο LU.
- Υπολογιστικό κόστος παραγοντοποίησης: $n^3/3$ πράξεις

Ανάλυση Cholesky για 2×2 πίνακες

Έστω ο 2×2 συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας A, τότε η ανάλυση Cholesky $A = LL^T$ γίνεται

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 \\ l_{21} & l_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} \\ 0 & l_{22} \end{bmatrix}.$$

Εξισώνοντας τα στοιχεία των πινάκων προκύπτουν οι ισότητες

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad l_{21} = a_{21}/l_{11}, \quad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}$$

- Η built-in εκδοχή της Cholesky στο Matlab `[R]=chol(A)`, επιστρέφει άνω τριγωνικό πίνακα R ώστε $A = R^T R$.
- Η `[L]=chol(A,'lower')` επιστρέφει κάτω τριγωνικό L ώστε $A = LL^T$.
- Το Matlab διαβάζει μόνο το άνω τριγωνικό μέρος του A και θεωρεί ότι είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, διαφορετικά επιστρέφει μήνυμα σφάλματος.

Αλγόριθμος Παραγοντοποίησης Cholesky

Ο αλγόριθμος της παραγοντοποίησης Cholesky περιγράφεται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$
\begin{aligned}
l_{jj} &= \sqrt{a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2} \\
l_{kj} &= \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{kj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{km} l_{jm} \right), \quad j < k \leq n.
\end{aligned}
$$

Εφαρμογή διάσπασης Cholesky στην επίλυση γραμμικών συστημάτων

Έστω το $n \times n$ γραμμικό σύστημα

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

όπου A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας. Τότε η μέθοδος Cholesky υπολογίζει τον πίνακα διάσπασης L και στη συνέχεια επιλύει το σύστημα σε 2 στάδια:

1. $L\mathbf{y} = \mathbf{b} \Rightarrow$ με εμπρός αντικατάσταση
2. $L^T\mathbf{x} = \mathbf{y} \Rightarrow$ με πίσω αντικατάσταση.

Αν οι στήλες ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m > n$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες, τότε $A^TA \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Άρα για την επίλυση του γραμμικού συστήματος έχουμε

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow A^TA\mathbf{x} = A^T\mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{x} = (A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}$$

Άσκηση 1

Να βρεθεί η παραγοντοποίηση Cholesky του συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα $A = \begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 3 \end{bmatrix}$.

$$A = LL^T \Rightarrow \begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix}.$$

1. Εξισώνοντας τα στοιχεία των πινάκων, υπολογίζουμε τα στοιχεία της 1ης στήλης του πίνακα L:

   $$l_{11} = \sqrt{5}, \quad l_{21} = -1/\sqrt{5}, \quad l_{31} = 3/\sqrt{5}$$

   Άρα

   $$\begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 0 \\ -1/\sqrt{5} & l_{22} & 0 \\ 3/\sqrt{5} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{5} & -1/\sqrt{5} & 3/\sqrt{5} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix}.$$

2. Υπολογίζουμε τα στοιχεία της 2ης στήλης του πίνακα L:

$$l_{22} = \sqrt{2 - l_{21}^2} = \frac{3}{\sqrt{5}}, \quad l_{32} = \frac{-2 - l_{31} l_{21}}{l_{22}} = -\frac{7}{3\sqrt{5}}$$

Άρα

$$\begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 0 \\ -1/\sqrt{5} & 3/\sqrt{5} & 0 \\ 3/\sqrt{5} & -7/3\sqrt{5} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{5} & -1/\sqrt{5} & 3/\sqrt{5} \\ 0 & 3/\sqrt{5} & -7/3\sqrt{5} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix}.$$

3. Υπολογίζουμε το στοιχείο της 3ης στήλης του L:

$$l_{33} = \sqrt{3 - l_{31}^2 - l_{32}^2} = \frac{1}{3}$$

Άρα

$$L = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{3}{\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{3}{\sqrt{5}} & \frac{-7}{3\sqrt{5}} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.2361 & 0 & 0 \\ -0.4472 & 1.3416 & 0 \\ 1.3416 & -1.0435 & 0.3333 \end{bmatrix}$$

Άσκηση 2

Με τη βοήθεια της παραγοντοποίησης LU, να βρεθεί η διάσπαση Cholesky του πίνακα $A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 10 & 2 \\ -2 & 2 & 5 \end{bmatrix}$.

Ο πίνακας A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, καθόσον έχει θετικές ιδιοτιμές $\{1.5079, 6.5394, 10.9528\}$. Άρα μπορεί να γραφεί στη μορφή $A = LL^T$, με κάτω τριγωνικό πίνακα L.

Για την παραγοντοποίηση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο LU.

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 10 & 2 \\ -2 & 2 & 5 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_3 \to r_3 + \frac{1}{2} r_1]{r_2 \to r_2 - \frac{1}{2} r_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & \star & 0 \\ -1/2 & \star & \star \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 3 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 \to r_3 - \frac{1}{3} r_2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Άρα

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}$$

$$= \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} = \hat{L}\hat{L}^T$$

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ Ι

Μ. Αδάμ.
Παραγοντοποιήσεις πίνακα-Θεωρία Perron Frobenius.
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2020.

Β. Δουγαλής, Δ. Νούτσος, Α. Χατζηδήμος.
Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα.
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Τμήμα Μαθηματικών, 2016.

Π. Ψαρράκος.
Ανάλυση Πινάκων
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2014.

Golub G. H., van Loan C. F.,
Θεωρία και Υπολογισμοί Μητρώων, Εκδόσεις Πεδίο, 2015.
Κωδικός βιβλίου στον Εύδοξο: 50657620.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ II

L. N. Trefethen, D. Bau.
Numerical Linear Algebra.
SIAM, Philadelphia, 1997.

Matlab Toolbox.
http://www.mathworks.com

Octave-Forge-Extra packages for GNU Octave.
http://octave.sourceforge.net