Ειδικά Θέματα Αριθμητικής Ανάλυσης και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

Αικατερίνη Αρετάκη

ΔΠΜΣ "Πληροφορική και Υπολογιστική Βιοϊατρική"
Κατεύθυνση Υπολογιστικής Ιατρικής και Βιολογίας
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Λαμία, Μάρτιος 2019

Βασικοί Ορισμοί

- Ένας $n \times n$ πίνακας A ονομάζεται *συμμετρικός* αν $A = A^T$.
- Ένας $n \times n$ συμμετρικός πίνακας A ονομάζεται *θετικά ορισμένος* αν και μόνο αν

$$x^T A x > 0, \ \text{για κάθε διάνυσμα } x \neq 0.$$

- Παράδειγμα: Ο πίνακας $A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$ είναι θετικά ορισμένος, γιατί για $0 \neq x \in \mathbb{R}^3$ έχουμε

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

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

Παραγοντοποίηση Cholesky

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

Θεώρημα

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

$$A = LL^T,$$

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

Αλγόριθμος Παραγοντοποίησης Cholesky

Algorithm 1 : Διάσπαση Cholesky για $n \times n$ θετικά ορισμένο πίνακα

Υπολόγισε $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$.
for $i = 2, \ldots, n$ **do**
  $l_{i1} = a_{i1}/l_{11}$ (υπολογισμός 1ης στήλης)
end for
if $n > 2$ **then**
  for $j = 2, \ldots, n-1$ **do**
    $l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - l_{j1}^2 - l_{j2}^2 - \cdots - l_{j,j-1}^2}$ (στήλες $j = 2, \ldots, n-1$)
    for $i = j+1, \ldots, n$ **do**
      $l_{ij} = \left(a_{ij} - l_{i1}l_{j1} - l_{i2}l_{j2} - \cdots - l_{i,j-1}l_{j,j-1}\right)/l_{jj}$
    end for
  end for
  $l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - l_{n1}^2 - \cdots - l_{n,n-1}^2}$ (τελευταίο διαγώνιο στοιχείο)
end if
Τύπωσε τον L

Εφαρμογή διάσπασης Cholesky στην επίλυση γραμμικών συστημάτων

Έστω το $n \times n$ γραμμικό σύστημα

$$Ax = b,$$

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. $Ly = b \Rightarrow$ με εμπρός αντικατάσταση
2. $L^T x = y \Rightarrow$ με πίσω αντικατάσταση.

Παράδειγμα

Να παραγοντοποιηθεί ο παρακάτω συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας με την παραγοντοποιηση Cholesky

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 3 \end{bmatrix}.$$

- $l_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{5}$
- $$\begin{aligned} l_{21} &= a_{21}/l_{11} = -1/\sqrt{5} \\ l_{31} &= a_{31}/l_{11} = 3/\sqrt{5} \end{aligned}$$
- $$\begin{aligned} l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 3/\sqrt{5} \\ l_{32} &= \left(a_{32} - l_{31}l_{21}\right)/l_{22} = -7/3\sqrt{5} \end{aligned}$$
- $l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 1/3$

Παραγοντοποίηση LDL

Θεώρημα

Κάθε συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ μπορεί να τεθεί στη μορφή

$$A = LDL^T,$$

όπου L είναι κάτω τριγωνικός πίνακας με $l_{ii} = 1$, $i = 1, \ldots, n$ και D είναι διαγώνιος με $d_{ii} > 0$, $i = 1, \ldots, n$.

- Φέρνουμε πρώτα τον πίνακα στην μορφή $A = LU$, με $l_{ii} = 1$, $i = 1, \ldots, n$.
- Από τα διαγώνια (θετικά) στοιχεία του U σχηματίζουμε τον διαγώνιο πίνακα D.
- Αν θέσουμε $\hat{L} = LD^{1/2}$, τότε έχουμε

$$A = LDL^T = \underbrace{LD^{1/2}}\,\underbrace{(D^{1/2})^T L^T} = \hat{L}\hat{L}^T.$$

Άσκηση 1

Να βρεθεί η παραγοντοποίηση σε μορφή $PA = LU$ του πίνακα $A = \left[\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{smallmatrix}\right]$ με χρήση της απαλοιφής Gauss με μερική οδήγηση.

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 4/7 & 1 & 0 \\ 1/7 & 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 0 & 6/7 & 19/2 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{bmatrix}.$$

Άσκηση 2

Να βρεθούν η LDL και στη συνέχεια η Cholesky παραγοντοποίηση του πίνακα $A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 10 & 2 \\ -2 & 2 & 5 \end{bmatrix}$.

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

$$A = L \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = L \underbrace{DL^T}_{U}.$$

$$A = \underbrace{L \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}}_{\hat{L}} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} L = \hat{L}\hat{L}^T.$$