6. A Cholesky-féle felbontás

A) Az LDU-felbontás fogalma, előállítása. Szimmetrikus mátrix felbontására vonatkozó tétel.

LDU-felbontás fogalma

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix LDU-felbontásának nevezzük az $A = L \cdot D \cdot U$ szorzatot, ha $L \in \mathcal{L}_1$ alsó háromszögmátrix, D diagonális mátrix és $U \in \mathcal{U}_1$ felső háromszögmátrix.

Előállítása

Az $A = L \cdot \widetilde{U}$ felbontásban $L \in \mathcal{L}_1$ jó, $D = \operatorname{diag}(\widetilde{u}_{11}, \ldots, \widetilde{u}_{nn})$.
A keresett $U \in \mathcal{U}_1$ mátrixot úgy kapjuk, hogy $U = D^{-1}\widetilde{U}$, azaz minden i-re $\widetilde{U}$ i. sorát $\widetilde{u}_{ii}$-vel osztjuk. Ekkor

$$A = L\widetilde{U} = LD \cdot \underbrace{(D^{-1}\widetilde{U})}_{U} = LDU.$$

Szimmetrikus mátrix felbontása

Ha A szimmetrikus mátrix, akkor az LDU-felbontásában $U = L^\top$.

Biz.: az $A = LDU$ felbontás bal oldalát szorozzuk L^{-1}-zel, jobb oldalát $(L^{-1})^\top$-tal:

$$L^{-1}A(L^{-1})^\top = L^{-1} \cdot (LDU) \cdot (L^{-1})^\top = DU(L^{-1})^\top.$$

A bal oldali mátrixról tudjuk, hogy szimmetrikus, a jobboldali felső háromszögmátrix. Ebből következik, hogy a jobboldali mátrix diagonális mátrix. $U(L^{-1})^\top \in \mathcal{U}_1$, így $U(L^{-1})^\top = I$.

$$U(L^{-1})^\top = I \quad \Leftrightarrow \quad U(L^\top)^{-1} = I \quad \Leftrightarrow \quad U = L^\top$$

□

Következmény:

- Szimmetrikus mátrix esetén az LDU-felbontás megtartja a szimmetriát. A teljes mátrix helyett elég pl. az alsó háromszög részét tárolni. Az $A = LDU$ felbontás valójában $LDL^\top$-felbontás lesz, ahol szintén elég L, D-t tárolni. Ezzel a tárolás- és műveletigény kb. a felére csökken $(\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2))$.
- Szimmetrikus mátrix esetén az $LDL^\top$-felbontás GE-val közvetlenül is elkészíthető.

C) Mutassa be az elemenkénti meghatározásra szolgáló Cholesky-algoritmust, vezesse le a képleteket és határozza meg a műveletigényt, térigényt. Vesse össze az LDLT és a Cholesky felbontások alkalmazhatóságát.

Cholesky-felbontás, avagy $LL^\top$-felbontás

Az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus mátrix Cholesky-felbontásának nevezzük az $L \cdot L^\top$ szorzatot, ha $A = LL^\top$, ahol $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ alsó háromszögmátrix és $l_{ii} > 0$ $(i = 1, \dots, n)$.

Ha A szimmetrikus és pozitív definit mátrix, akkor egyértelműen létezik Cholesky-felbontása.

Térigény

n darab négyzetgyökvonás

Tétel: A Cholesky-felbontás előállításának műveletigénye

A szorzások és osztások száma

$$\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2),$$

valamint n darab négyzetgyökvonás is szükséges.

Biz.: A képletekből:

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, \quad l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk}\right).$$

Rögzített j-re: l_{jj}-hez $2(j-1)$ szorzás és összeadás kell.

Rögzített i, j-re: l_{ij}-hez 1 osztás, $(j-1)$ szorzás és $(j-1)$ összeadás kell. Összesen $2j-1$ művelet.

$$\sum_{j=1}^{n} 2(j-1) + \sum_{i=2}^{n}\sum_{j=1}^{i-1}(2j-1) =$$

$$\sum_{s=1}^{n-1} 2s + \sum_{i=2}^{n}\left(2 \cdot \frac{(i-1)i}{2} - (i-1)\right) =$$

$$\sum_{s=1}^{n-1} 2s + \sum_{i=2}^{n}(i-1)^2 =$$

$$= 2 \cdot \frac{(n-1)n}{2} + \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2). \quad \square$$

Az $LL^\top$-felbontás közvetlen kiszámítása

Az L mátrix elemei az A alsóháromszögbeli elemeiből a következő képletekkel számolhatók:

$$i = j \text{ (átló)} \qquad l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2},$$

$$i > j \text{ (alsó)} \qquad l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk}\right).$$

Ha jó sorrendben számolunk, mindig ismert az egész jobb oldal.

3. előállítási módszer: mátrixszorzás alapján.

Tétel: az $LL^\top$-felbontás „közvetlen” kiszámítása

Az L mátrix elemei az A alsóháromszögbeli elemeiből a következő képletekkel számolhatók:

$$i = j \text{ (átló)} \qquad l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2},$$

$$i > j \text{ (alsó)} \qquad l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk} \right).$$

Ha jó sorrendben számolunk, mindig ismert az egész jobb oldal.

Biz.: Az LU-felbontáshoz hasonlóan. Írjuk fel az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix, mint mátrixszorzat i-edik sorának j-edik elemét feltéve, hogy $A = L \cdot L^\top$. Használjuk ki, hogy háromszögmátrixokról van szó, majd válasszunk le egy tagot.

Ha $i = j$, azaz egy főátlóbeli elemről van szó, akkor $k > j \Rightarrow l_{j,k} = 0$, valamint $(L^\top)_{kj} = l_{jk}$, és így

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{n} l_{jk} \cdot (L^\top)_{kj} = \sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2 = l_{jj}^2 + \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2.$$

Ebből l_{jj} kifejezhető

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

Ha $i > j$, azaz egy főátló alatti elemről van szó, akkor

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} \cdot (L^\top)_{kj} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} \cdot l_{jk} = l_{ij} \cdot l_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk}.$$

Ha $l_{jj} \neq 0$ (találkoztunk már ezzel a feltétellel), akkor l_{ij} kifejezhető

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk} \right).$$

Figyeljük meg, hogy ha valamely „jó sorrendben” (lásd az előadás diasorát) megyünk végig az (i, j) indexekkel A alsóháromszögbeli elemein, akkor az l_{ij} illetve l_{jj} értékét megadó egyenlőségek jobb oldalán minden mennyiség ismert. $\square$