1 LDMT, LDLT a Choleského dekompozice

1.1 LDMT (LDU) dekompozice

Uvažujme rozklad obecné čtvercové matice $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$$\mathsf{A} = \mathsf{LDM}^T,$$

kde $\mathsf{L} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ a $\mathsf{M} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ jsou dolní trojúhelníkové matice s jedničkami na diagonálách a $\mathsf{D} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je diagonální matice. Matici tedy rozkládáme do následujícího tvaru ($\times$ značí nenulové prvky matice):

$$\mathsf{A} = \mathsf{LDM}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \times & \times & 1 & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & 1 & 0 \\ \times & \times & \times & \times & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \times & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 1 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 1 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Při odvozování vhodného algoritmu budeme vycházet z předpokladu, že již známe $j-1$ sloupců matice L, řádků matice M (tedy sloupců matice M^T) a diagonálních prvků $d_1, d_2, \ldots, d_{j-1}$ matice D, $1 \le j \le n$. Chceme odvodit vzorce pro j-tý sloupec matice L (tedy prvky $\mathsf{L}(j+1:n,j)$), j-tý řádek matice M (tedy prvky $\mathsf{M}(j,j+1:n)$ neboli $\mathsf{M}^T(j+1:n,j)$) a diagonální prvek d_j.

Sloupec j matice A můžeme vyjádřit pomocí našeho rozkladu jako

$$\mathsf{A}(1:n,j) = (\mathsf{LDM}^T)(1:n,j) = \mathsf{LDM}^T\boldsymbol{e}_j = \mathsf{L}(\mathsf{DM}^T\boldsymbol{e}_j) = \mathsf{L}\boldsymbol{v},$$

kde $\boldsymbol{e}_j$ je j-tý vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^n$ (tedy vektor, který má 1 na j-té pozici a jinde nuly). Součin $\mathsf{DM}^T\boldsymbol{e}_j$ jsme si označili $\boldsymbol{v}$ a z tvarů matic D, M^T není těžké ověřit, že tento vektor má nenulové prvky pouze na prvních j pozicích. Uvědomme si, že $\boldsymbol{v}$ reprezentuje j-tý sloupec součinu matic DM^T a vynásobíme-li jím matici L, získáme j-tý sloupec matice A.

Rozdělme nyní sloupec $\mathsf{A}(1:n,j)$ na dvě části - $\mathsf{A}(1:j,j)$ a $\mathsf{A}(j+1:n,j)$. Pro první část platí

$$\mathsf{A}(1:j,j) = \mathsf{L}(1:j,1:j)\boldsymbol{v}(1:j).$$

Výraz na levé straně známe, submatici $\mathsf{L}(1:j,1:j)$ známe také (z předpokladu známe $j-1$ sloupců L a víme, že $\mathsf{L}(j,j)=1$). Neznámý vektor $\boldsymbol{v}(1:j)$ tedy získáme řešením této soustavy j rovnic o j neznámých s dolní trojúhelníkovou maticí (k řešení můžeme použít efektivní dopřednou substituci).

Po nalezení vektoru $\boldsymbol{v}(1:j)$ určeme příslušné prvky matice M. Vektor $\boldsymbol{v}$ je j-tým sloupcem součinu DM^T. Z tvarů matic D, M^T tedy vyplývá, že pro prvky $\boldsymbol{v}(1:j)$ platí

$$\boldsymbol{v}(1:j) = \mathsf{D}(1:j,1:j)\mathsf{M}^T(1:j,j)$$
$$\mathsf{D}(1:j,1:j)^{-1}\boldsymbol{v}(1:j) = \mathsf{M}^T(1:j,j)$$

Protože matice D je diagonální, k jejímu invertování stačí pouze invertovat diagonální prvky. Po přenásobení inverzní diagonální matice vektorem $\boldsymbol{v}(1:j)$ dostaneme pro $i = 1, \ldots, j-1$ rovnost

$$\frac{1}{d_i}\boldsymbol{v}(i) = \mathsf{M}^T(i,j),$$

tedy $\mathsf{M}(j,i) = \frac{1}{d_i}\boldsymbol{v}(i)$. Zbývá určit neznámý prvek d_j. Protože $\mathsf{M}(j,j) = 1$, musí platit

$$1 = \frac{1}{d_j}\boldsymbol{v}(j),$$

tedy $d_j = \boldsymbol{v}(j)$.

Určili jsme tedy j-tý řádek matice M a prvek d_j, zbývá určit j-tý sloupec matice L. K tomu využijeme druhou část sloupce $\mathsf{A}(1:n,j)$. Tu si můžeme vyjádřit jako

$$\mathsf{A}(j+1:n,j) = \mathsf{L}(j+1:n,1:j)\boldsymbol{v}(1:j)$$

Výraz na levé straně opět známe, známe již také vektor $\boldsymbol{v}(1:j)$ a všechny sloupce submatice $\mathsf{L}(j+1:n,1:j)$ kromě posledního, tedy kromě $\mathsf{L}(j+1:n,j)$. Součin na pravé straně si můžeme rozepsat na

$$\mathsf{A}(j+1:n,j) = \mathsf{L}(j+1:n,1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1) + \mathsf{L}(j+1:n,j)\boldsymbol{v}(j).$$

Osamostatněním neznámého sloupce získáme

$$\mathsf{L}(j+1:n,j) = \frac{\mathsf{A}(j+1:n,j) - \mathsf{L}(j+1:n,1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1)}{\boldsymbol{v}(j)}.$$

Výsledný algoritmus tedy můžeme zapsat takto:

function LDMT(A)
- $n = \text{size}(\mathsf{A})$
- $\mathsf{L} = \text{eye}(n,n)$, $\mathsf{M} = \text{eye}(n,n)$, $\mathsf{D} = \text{zeros}(n,n)$
- $\boldsymbol{v}(1) = \mathsf{A}(1,1)$
- $\mathsf{D}(1,1) = \boldsymbol{v}(1)$
- $\mathsf{L}(2:n,1) = A(2:n,1)/\boldsymbol{v}(1)$
- **for** $j = 2, \ldots, n$ **do**
  - Solve $\mathsf{L}(1:j,1:j)\boldsymbol{v}(1:j) = A(1:j,j)$ for $\boldsymbol{v}(1:j)$
  - **for** $i = 1, \ldots, j-1$ **do**
    - $\mathsf{M}(j,i) = \boldsymbol{v}(i)/\mathsf{D}(i,i)$
  - **end for**
  - $\mathsf{D}(j,j) = \boldsymbol{v}(j)$
  - $\mathsf{L}(j+1:n,j) = \frac{\mathsf{A}(j+1:n,j) - \mathsf{L}(j+1:n,1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1)}{\boldsymbol{v}(j)}$
- **end for**

end function

1.2 LDLT dekompozice

Dá se ukázat, že je-li matice A na vstupu algoritmu pro LDMT dekompozici symetrická, platí $\mathsf{L} = \mathsf{M}$. Matici jsme tedy schopni rozložit na součin $\mathsf{A} = \mathsf{LDL}^T$. Vhodnou úpravou předchozího algoritmu jsme schopni snížit jeho náročnost pro symetrické matice na polovinu.

Pro odvození tedy opět vyjděme z předpokladu, že známe $j-1$ sloupců matice L, řádků M a diagonálních prvků matice D. Navíc, protože $\mathsf{M} = \mathsf{L}$, známe i prvky v příslušných *sloupcích* matice M, včetně prvků $\mathsf{M}(j, 1 : j-1)$, tedy $\mathsf{M}^T(1 : j-1, j)$. Vzpomeňme si, co platilo pro vektor $\boldsymbol{v}(1 : j)$:

$$\boldsymbol{v}(1:j) = \mathsf{D}(1:j, 1:j)\mathsf{M}^T(1:j, j) = \mathsf{D}(1:j, 1:j)\mathsf{L}^T(1:j, j)$$

Díky tomu, že D je diagonální matice, můžeme si součin na pravé straně snadno rozepsat na

$$\boldsymbol{v}(1:j) = \begin{bmatrix} \mathsf{D}(1,1)\mathsf{L}^T(1,j) \\ \mathsf{D}(2,2)\mathsf{L}^T(2,j) \\ \vdots \\ \mathsf{D}(j-1,j-1)\mathsf{L}^T(j-1,j) \\ \mathsf{D}(j,j) \end{bmatrix}$$

Díky předpokladům známe všechny prvky vektoru napravo kromě posledního. Získali jsme tedy předpis, který nám říká, jak snadno získat $\boldsymbol{v}(1 : j-1)$. Na posledním řádku jsme navíc využili toho, že $\mathsf{L}(j, j) = 1$. Zbývá nalézt $\boldsymbol{v}(j)$. K tomu si vyjádřeme, čemu se rovná $\mathsf{A}(j, j)$:

$$\mathsf{A}(j,j) = \mathsf{L}(j, 1:j)\boldsymbol{v}(1:j)$$

Rozepišme součin napravo opět na známou a neznámou část

$$\mathsf{A}(j,j) = \mathsf{L}(j, 1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1) + \mathsf{L}(j,j)\boldsymbol{v}(j) = \mathsf{L}(j, 1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1) + 1\boldsymbol{v}(j)$$

a vyjádřeme neznámý prvek $\boldsymbol{v}(j)$

$$\boldsymbol{v}(j) = \mathsf{A}(j,j) - \mathsf{L}(j, 1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1).$$

Tímto jsme získali $\boldsymbol{v}(1 : j)$ aniž bychom museli řešit soustavu rovnic, čímž jsme původní algoritmus výrazně urychlili. Zbývající část odvození je identická. Výsledný algoritmus pro LDLT rozklad symetrické matice tedy můžeme zapsat takto:

function LDLT(A)
  $n = \text{size}(\mathsf{A})$
  $\mathsf{L} = \text{eye}(n, n)$, $\mathsf{D} = \text{zeros}(n, n)$
  $\boldsymbol{v}(1) = \mathsf{A}(1, 1)$
  $\mathsf{D}(1, 1) = \boldsymbol{v}(1)$
  $\mathsf{L}(2 : n, 1) = A(2 : n, 1)/\boldsymbol{v}(1)$
  for $j = 2, \ldots, n$ **do**
    for $i = 1, \ldots, j-1$ **do**

$\boldsymbol{v}(i) = \mathsf{L}(j,i)\mathsf{D}(i,i)$
end for
$\boldsymbol{v}(j) = \mathsf{A}(j,j) - \mathsf{L}(j,1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1)$
$\mathsf{D}(j,j) = \boldsymbol{v}(j)$
$\mathsf{L}(j+1:n,j) = \frac{\mathsf{A}(j+1:n,j)-\mathsf{L}(j+1:n,1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1)}{\boldsymbol{v}(j)}$
end for
end function

1.3 Choleského rozklad

Matici A, pro kterou platí $a_{ij} = a_{ji}$ a

$$\forall \boldsymbol{x} \neq 0 : \boldsymbol{x}^T \mathsf{A} \boldsymbol{x} > 0$$

nazýváme symetrickou pozitivně definitní. Tyto matice často vznikají diskretizací fyzikálních systémů. Zopakujme si některé jejich vlastnosti:

1. Každá pozitivně definitní matice má kladné prvky na diagonále ($a_{ii} = \boldsymbol{e}_i^T \mathsf{A} \boldsymbol{e}_i > 0$, nerovnost vyplývá z definice pozitivní definitnosti)

2. Matice je pozitivně definitní, je-li symetrická a má-li všechna vlastní čísla kladná.

3. Každá pozitivně definitní matice může být rozložena na

$$\mathsf{A} = \mathsf{R}^T \mathsf{R},$$

kde R je horní trojúhelníková matice s kladnými prvky na diagonále.

Dekompozici z bodu 3 nazýváme Choleského rozklad. Pokusme se odvodit jeho základní tvar. Rozdělme matice A a R na čtyři bloky:

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} \mathsf{A}(1,1) & \mathsf{A}(1,2:n) \\ \mathsf{A}(2:n,1) & \mathsf{A}(2:n,2:n) \end{bmatrix}, \mathsf{R} = \begin{bmatrix} \mathsf{R}(1,1) & \mathsf{R}(1,2:n) \\ 0 & \mathsf{R}(2:n,2:n) \end{bmatrix}$$

Hledaný součin má tvar

$$\begin{bmatrix} \mathsf{A}(1,1) & \mathsf{A}(1,2:n) \\ \mathsf{A}(2:n,1) & \mathsf{A}(2:n,2:n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{R}(1,1) & 0 \\ \mathsf{R}^T(1,2:n) & \mathsf{R}^T(2:n,2:n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{R}(1,1) & \mathsf{R}(1,2:n) \\ 0 & \mathsf{R}(2:n,2:n) \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \mathsf{R}^2(1,1) & \mathsf{R}(1,1)\mathsf{R}(1,2:n) \\ \mathsf{R}(1,1)\mathsf{R}^T(1,2:n) & \mathsf{R}^T(1,2:n)\mathsf{R}(1,2:n) + \mathsf{R}^T(2:n,2:n)\mathsf{R}(2:n,2:n) \end{bmatrix}$$

Porovnáním bloků na odpovídajících pozicích na levé a pravé straně nejdříve snadno vypočítáme první řádek matice R. Musí platit $\mathsf{R}^2(1,1) = \mathsf{A}(1,1)$, takže $\mathsf{R}(1,1) = \sqrt{\mathsf{A}(1,1)}$ (uvědomme si, že díky pozitivní definitnosti A víme, že diagonální prvek je kladný). Odsud a z $\mathsf{A}(1,2:n) = \mathsf{R}(1,1)\mathsf{R}(1,2:n)$ snadno vyjádříme $\mathsf{R}(1,2:n) = \mathsf{A}(1,2:n)/\mathsf{R}(1,1)$. Zbývá určit blok $\mathsf{R}(2:n,2:n)$. Porovnáním bloků na pozicích (2,2) získáme rovnost

$$\mathsf{A}(2:n,2:n) - \mathsf{R}^T(1,2:n)\mathsf{R}(1,2:n) = \mathsf{R}^T(2:n,2:n)\mathsf{R}(2:n,2:n).$$

Dá se ukázat, že výraz na levé straně je opět symetrická pozitivně definitní matice. Výraz na pravé straně je její Choleského rozklad. K nalezení matice a $\mathsf{R}(2:n, 2:n)$ tedy rekurzivně aplikujeme tento postup na levou stranu předchozí rovnosti. V dalším kroce tedy nalezneme řádek $\mathsf{R}(2, 2:n)$ a rekurzivně budeme pokračovat, dokud nenalezneme zbývající řádky matice R. Promyslete si, že se algoritmus dá zapsat takto:

```
function CHOLESKY(A)
    m = size(A)
    R = A
    for k = 1, ..., m do
        for j = k + 1, ..., m do
            R(j, j : m) = R(j, j : m) − R(k, j : m)R(k, j)/R(k, k)
        end for
        R(k, k : m) = R(k,k:m) / √(R(k,k))
    end for
end function
```

2 Výpočetní náročnost

2.1 Gaussova eliminace (LU rozklad)

Zopakujme si algoritmus LU faktorizace:

```
function LU(A)
    m = size(A)
    U = A
    for k = 1, ..., m − 1 do
        for j = k + 1, ..., m do
            L(j, k) = U(j, k)/U(k, k)
            U(j, k : m) = U(j, k : m) − L(j, k)U(k, k : m)
        end for
    end for
end function
```

Výpočtu dominuje vnitřní smyčka, konkrétně řádek

$$\mathsf{U}(j, k:m) = \mathsf{U}(j, k:m) - \mathsf{L}(j, k)\mathsf{U}(k, k:m) \tag{2.1}$$

Vektor $\mathsf{U}(k, k:m)$ má v k-tém kroce délku $l = m - k + 1$. Na řádku tento vektor přenásobíme skalárem (l násobení) a odečteme od vektoru $\mathsf{U}(j, k:m)$ (l rozdílů). Celkem tedy na tomto řádku provedeme $2l$ operací. Zajímá nás, kolikrát se (2.1) provede v průběhu celého běhu algoritmu a s jak dlouhými vektory při tom pracuje. Rozepišme si postupně počet volání (2.1) a délku l pro jednotlivé kroky k:

$$k = 1 : \text{počet: } m - 1, \quad l = m$$

$$k = 2 : \text{počet: } m - 2, \quad l = m - 1$$

$$\vdots$$

$$k = m - 1 : \text{počet: } 1, \quad l = m - (m-1) + 1 = 2.$$

Celkový počet operací q je tedy dán výrazem

$$q = 2((m-1)m + (m-2)(m-1) + \ldots + 2 \cdot 3 + 1 \cdot 2),$$

tedy

$$q = \sum_{i=1}^{m} 2(m-i)(m-i+1) = 2\sum_{j=0}^{m-1} j(j+1) = 2\sum_{j=0}^{m-1}(j^2+j) = 2(\sum_{j=0}^{m-1} j^2 + \sum_{j=0}^{m-1} j).$$

K vyčíslení těchto sum můžeme použít vzorce $\sum_{j=0}^{m} j^2 = \frac{1}{6}(2m+1)(m+1)m$ a $\sum_{j=0}^{m} j = \frac{m(m+1)}{2}$. Dostaneme tedy ($m^2$ a m odčítáme, protože naše sumy sčítají pouze po $j = m-1$):

$$q = 2(\frac{1}{6}(2m+1)(m+1)m - m^2 + \frac{m(m+1)}{2} - m) = 2(\frac{1}{3}m^3 - \frac{1}{3}m)$$

Výpočtu dominuje třetí mocnina, proto můžeme říct, že náročnost Gaussovy eliminace (LU rozkladu), je $\approx \frac{2}{3}m^3$.

2.2 LU rozklad s částečnou a úplnou pivotizací

Určeme nyní náročnost částečné pivotizace při výpočtu LU rozkladu. V každém kroce $k = 1, \ldots, k = m-1$ hledáme největší pivot ve sloupci délky $m - k + 1$. Celkový počet porovnání je tedy

$$m + (m-1) + (m-2) + \ldots + 2 = \frac{(m+2)(m+1)}{2} = \frac{1}{2}(m^2 + m - 2)$$

Výpočtu dominuje druhá mocnina, můžeme tedy říct, že celkový počet porovnání je $\approx \frac{1}{2}m^2$, tedy náročnost částečné pivotizace je $O(m^2)$. Vzhledem k tomu, že náročnost samotného LU rozkladu je kubická, nepřináší částečná pivotizace významný overhead.

Podobně bychom mohli odvodit, že náročnost úplné pivotizace je $O(m^3)$, což výrazně přispěje k původní náročnosti metody. Z tohoto důvodu se úplná pivotizace často nepoužívá.

2.3 Další algoritmy

Stejným způsobem lze odvodit, že náročnost LDMT rozkladu je $2/3m^3$, LDLT a Choleského rozklad symetrické matice vyžadují poloviční počet operací, tedy $1/3m^3$. Řešení soustavy s dolní nebo horní trojúhelníkovou maticí pomocí dopředné nebo zpětné substituce vyžaduje $1/2m^2$ operací. Pro srovnání výpočet inverzní matice vyžaduje m^3 operací a řešení systému pomocí inverzní matice (násobení inverzní maticí) vyžaduje m^2 operací.