Práctica 5: Método de factorización de Cholesky. Matriz en perfil y matriz tridiagonal

Análisis Numérico Matricial. Curso 2022-23

Grado en Matemáticas
Doble Grado en Ingeniería Informática y en Matemáticas

USC

1. Factorización de Cholesky

La **factorización de Cholesky** de una matriz A, **hermitiana (simétrica)**[1] **y definida positiva,** es la expresión de A como producto:

$$A = BB^* \quad (A = BB^T),$$

siendo B una matriz (real) triangular inferior y no singular.

Obsérvese que si A es hermitiana:

$$\det(A) = (|b_{11}||b_{22}| \dots |b_{nn}|)^2,$$

mientras que si A es simétrica:

$$\det(A) = (b_{11} b_{22} \dots b_{nn})^2.$$

[1] Una matriz A es **simétrica** si es real y $A = A^T$. Una matriz A es **hermitiana** si $A = A^*$.

1.1. Método de factorización de Cholesky

El **método de factorización de Cholesky,** para resolver un sistema lineal $Ax = c$ con **matriz simétrica y definida positiva** A, consiste en:

- El **cálculo de la factorización de Cholesky:**

$$A = BB^T, \ B \text{ real, triangular inferior y no singular.}$$

- La **resolución consecutiva de dos sistemas triangulares:** Puesto que B es no singular:

$$Ax = c \Longleftrightarrow BB^T x = c \Longleftrightarrow \begin{cases} By = c, \\ B^T x = y. \end{cases}$$

1.1.1. Ejemplo

Resolvemos el sistema lineal $Ax = c$, con matriz A simétrica y definida positiva, mediante el **método de factorización de Cholesky:**

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.5 & -2 \\ 0.5 & 1.25 & 0.5 \\ -2 & 0.5 & 15.25 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} -1.25 \\ 1.125 \\ 9.625 \end{pmatrix}.$$

Obtenemos también $\det(A)$.

Observación. Ya que la matriz A es **simétrica,** pues es real y además $A = A^T$, la propiedad de **definida positiva** es equivalente a la existencia de la factorización.

Factorización

Para obtener la matriz B de la factorización:

$$A = BB^T,\ B \text{ matriz real, triangular inferior y no singular,}$$

se escribe la igualdad y, despejando los elementos diagonales de la matriz B positivos, se deduce:

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ -2 & 1.5 & 3 \end{pmatrix}.$$

Como consecuencia:

$$\det(A) = 9.$$

Solución de los sistemas lineales

La solución del sistema con matriz **triangular inferior** $By = c$, por descenso es:

$$y = \begin{pmatrix} -1.25 \\ 1.75 \\ 1.5 \end{pmatrix}.$$

La solución del sistema con matriz **triangular superior** $B^T x = y$, por remonte es:

$$x = \begin{pmatrix} -0.75 \\ 1. \\ 0.5 \end{pmatrix}.$$

1.2. Programa principal correspondiente al método de factorización de Cholesky para un sistema lineal $Ax = c$

```
program cholesky_ppal
use mod_clreal

implicit none
real(kind=clreal),allocatable::a(:,:),aa(:,:),c(:),x(:),y(:),r(:)
...
read*,n
...
allocate(a(n,n),aa(n,n),c(n),x(n),y(n),r(n))
...
call datsissim(n,a,c)
...
call cholesky(n,a,deter)
...
call sistl(n,a,c,y)
...
call sistusim(n,a,y,x)
...
call residuosim(n,aa,c,x,r)
...
deallocate(a,aa,c,x,y,r)

end program cholesky_ppal
```

1.3. Cálculo de B

Sea A una **matriz simétrica** de orden n. La igualdad matricial:

$$A = BB^T, \; B \text{ real, triangular inferior y no singular,}$$

consiste en $n(n+1)/2$ ecuaciones distintas con $n(n+1)/2$ incógnitas, que son los elementos desconocidos de B.

Se prueba que **es posible calcular dichas incógnitas, únicamente, en el caso de que A sea definida positiva**.

1.3.1. Cálculo de la factorización por columnas

Para obtener la matriz B por columnas, se ordenan las ecuaciones correspondientes a las partes triangulares inferiores de la igualdad matricial:

$$A = BB^T,$$

por columnas y se calculan sucesivamente los elementos de B, tomando los correspondientes elementos diagonales positivos.

1.3.1.1. Se obtienen las siguientes fórmulas para el cálculo de B por columnas:

- $1^{\underline{a}}$ columna de B:

  $b_{11} = \sqrt{a_{11}}$, siempre que a_{11} sea positivo,

  $b_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{b_{11}}$, $i = 2, \ldots, n$.

- j-ésima columna de B, $j = 2, \ldots, n$:

  $$b_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{jk}^2},$$ siempre que el radicando sea positivo,

  $$b_{ij} = \frac{a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} b_{jk}}{b_{jj}}, \; i = j+1, \ldots, n.$$

1.3.2. Cálculo de la factorización por filas

Para obtener la matriz B por filas, se ordenan las ecuaciones correspondientes a las partes triangulares inferiores de la igualdad matricial:

$$A = BB^T,$$

por filas y se calculan sucesivamente los elementos de B, tomando los correspondientes elementos diagonales positivos.

1.3.2.1. Se obtienen las siguientes fórmulas para el cálculo de B por filas:

- $1^{\underline{a}}$ fila de B:

  $b_{11} = \sqrt{a_{11}}$, siempre que a_{11} sea positivo.

- i-ésima fila de B, $i = 2, \ldots, n$:

  $$b_{ij} = \frac{a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} b_{jk}}{b_{jj}}, \; j = 1, \ldots, i-1,$$

  $$b_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}^2}, \text{ siempre que el radicando sea positivo.}$$

1.4. Subrutina cholesky

```
subroutine cholesky(n,a,deter)
use mod_clreal
implicit none
integer,intent(in)::n
real(kind=clreal),intent(inout)::a(n,n)
real(kind=clreal),intent(out)::deter

deter=1.
...
end subroutine cholesky
```

1.4.1. Código FORTRAN de la subrutina cholesky(n,a,deter), cálculo de $\boldsymbol{B}$ por columnas

```
!inicializacion del determinante
deter=1.

!calculo de la matriz B
!bucle de columnas
do j=1,n

  !elemento diagonal de B
  a(j,j)=a(j,j)-sum(a(j,1:j-1)*a(j,1:j-1))
  if(a(j,j)<1.e-12)then
    print*,'Radicando ',j,' <= 0, en la matriz B'
    print*,'La matriz del sistema no es definida positiva!'
    stop
  end if
  a(j,j)=sqrt(a(j,j))
  !bucle de filas
  do i=j+1,n
    a(i,j)=a(i,j)-sum(a(i,1:j-1)*a(j,1:j-1))
    a(i,j)=a(i,j)/a(j,j)
  end do

  !actualizacion del determinante
  deter=deter*a(j,j)

end do

!fin del calculo del determinante
deter=deter**2
```

1.4.2. Código FORTRAN de la subrutina cholesky(n,a,deter), cálculo de *B* por filas

```
!inicializacion del determinante
deter=1.

!calculo de la matriz B
!bucle de filas
do i=1,n

  !bucle de columnas
  do j=1,i-1
    a(i,j)=a(i,j)-sum(a(i,1:j-1)*a(j,1:j-1))
    a(i,j)=a(i,j)/a(j,j)
  end do
  !elemento diagonal de B
  a(i,i)=a(i,i)-sum(a(i,1:i-1)*a(i,1:i-1))
  if(a(i,i)<1.e-12)then
    print*
    print formato1,' ** Radicando ',i,' <= 0, en la matriz B'
    print formato1,'    la matriz del sistema no es definida positiva! **'
    stop
  end if
  a(i,i)=sqrt(a(i,i))

  !actualizacion del determinante
  deter=deter*a(i,i)

end do

!fin del calculo del determinante
deter=deter**2
```

2. Factorización de Cholesky, matriz en perfil lleno

Se supone A una **matriz simétrica (real tal que $A = A^T$) de orden n, almacenada en forma de perfil lleno** en un vector z:

$$z = (a_{11}, a_{21}, a_{22}, a_{31}, a_{32}, a_{33}, \ldots, a_{n1}, a_{n2}, \ldots, a_{nn}).$$

Luego, se adaptarán la factorización y la resolución de los correspondientes sistemas triangulares a dicho almacenamiento.

2.1. Ejemplo

Resolvemos el sistema lineal $Ax = c$, con matriz A simétrica y definida positiva, mediante el **método de factorización de Cholesky:**

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.5 & -2 \\ 0.5 & 1.25 & 0.5 \\ -2 & 0.5 & 15.25 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} -1.25 \\ 1.125 \\ 9.625 \end{pmatrix},$$

con la matriz A **almacenada en perfil lleno** en un vector z:

$$z = (1, 0.5, 1.25, -2, 0.5, 15.25).$$

Factorización

La matriz B de la factorización:

$$A = BB^T,\ B \text{ matriz real, triangular inferior y no singular,}$$

debe obtenerse en un vector:

$$zb = (b_{11}, b_{21}, b_{22}, b_{31}, b_{32}, b_{33}, \ldots, b_{n1}, b_{n2}, \ldots, b_{nn}).$$

Comprueba que, en este ejemplo:

$$zb = (1, 0.5, 1, -2, 1.5, 3).$$

Observa que:

$$\det(A) = 9.$$

Solución de los sistemas lineales

Comprueba que, en este ejemplo, la solución del sistema con matriz **triangular inferior** $By = c$, por descenso es:

$$y = \begin{pmatrix} -1.25 \\ 1.75 \\ 1.5 \end{pmatrix}.$$

Comprueba que, en este ejemplo, la solución del sistema con matriz **triangular superior** $B^T x = y$, por remonte es:

$$x = \begin{pmatrix} -0.75 \\ 1. \\ 0.5 \end{pmatrix}.$$

2.2. Fórmulas de la factorización

Dado que la matriz A es **simétrica y definida positiva, almacenada en perfil lleno** en un vector z, otendremos la matriz B de la factorización:

$$A = BB^T, \ B \text{ real, triangular inferior y no singular,}$$

en un vector zb con componentes:

$$zb = (b_{11}, b_{21}, b_{22}, b_{31}, b_{32}, b_{33}, \ldots, b_{n1}, b_{n2}, \ldots, b_{nn}).$$

Utilizando el vector puntero μ de la práctica 2, se obtienen:

- ...

2.3. Fórmulas de la resolución por descenso

La resolución del sistema lineal $By = c$, con **matriz triangular inferior y no singular** ($b_{ii} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n$), **por descenso** consiste en obtener sucesivamente:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \frac{c_1}{b_{11}} \\
y_2 &= \frac{c_2 - b_{21} y_1}{b_{22}} \\
\vdots & \quad \vdots \\
y_{n-1} &= \frac{c_{n-1} - b_{n-1,1} y_1 - \cdots - b_{n-1,n-2} y_{n-2}}{b_{n-1,n-1}} \\
y_n &= \frac{c_n - b_{n1} y_1 - \cdots - b_{n,n-1} y_{n-1}}{b_{nn}}
\end{aligned}
$$

Dado que la matriz B está almacenada en perfil lleno en un vector zb, las anteriores fórmulas se traducen en:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \frac{c_1}{zb_1} \\
y_2 &= \frac{c_2 - zb_2 y_1}{zb_3} \\
\vdots & \quad \vdots \\
y_{n-1} &= \frac{c_{n-1} - zb_{\mu(n-1)+1} y_1 - \cdots - zb_{\mu(n-1)+n-2} y_{n-2}}{zb_{\mu(n)}} \\
y_n &= \frac{c_n - zb_{\mu(n)+1} y_1 - \cdots - zb_{\mu(n)+n-1} y_{n-1}}{zb_{\mu(n+1)}}
\end{aligned}
$$

2.4. Subrutina correspondiente a la resolución de un sistema lineal $By = c$ con B matriz triangular inferior almacenada en perfil lleno

```
subroutine sistlp(n,mu,z,c,u)
use mod_clreal
implicit none
integer,intent(in)::n,mu(n+1)
real(kind=clreal),intent(in)::z((n+1)*n/2),c(n)
real(kind=clreal),intent(out)::u(n)

integer::i,j
real(kind=clreal)::aux

...

end subroutine sistlp
```

2.4. Fórmulas de la resolución por remonte

La resolución del **sistema triangular superior** no singular $B^T x = y$, con la matriz B almacenada en un vector zb, consiste en:

-

2.5. Fórmulas del residuo

El cálculo del **residuo del sistema** $r = Ax - c$, A **simétrica y definida positiva, almacenada en perfil lleno** en un vector z, consiste en:

-

3. Factorización de Cholesky, caso tridiagonal

Es de destacar que la **factorización de Cholesky conserva la estructura de matriz banda** en el sentido de que si $A = (a_{ij})$ es una matriz hermitiana (simétrica) y definida positiva tal que:

$$a_{ij} = 0, \text{ para } \mid i - j \mid > p,$$

y B es la matriz de la factorización, entonces también:

$$b_{ij} = 0, \text{ para } i - j > p.$$

Luego, si la matriz A es **tridiagonal** ($p = 1$), la matriz B de la factorización satisfará:

$$b_{ij} = 0, \text{ para } i - j > 1.$$

3.1. Ejemplo

Resolvemos el sistema lineal $Ax = c$, con matriz A simétrica, definida positiva y tridiagonal, mediante el **método de factorización de Cholesky:**

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 0 \\ -0.5 & 1.25 & 1.5 \\ 0 & 1.5 & 11.25 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 1.75 \\ 11.25 \end{pmatrix}.$$

Obtenemos también $\det(A)$.

Observación. Ya que la matriz A es **simétrica,** pues es real y además $A = A^T$, la propiedad de **definida positiva** es equivalente a la existencia de la factorización.

Para obtener la matriz B de la factorización:

$$A = BB^T,\ B \text{ matriz real, triangular inferior y no singular,}$$

se escribe la igualdad y, despejando los elementos diagonales de la matriz B positivos, se deduce:

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 \\ 0 & 1.5 & 3 \end{pmatrix}.$$

Como consecuencia:

$$\det(A) = 9.$$

La solución del sistema con matriz triangular inferior $By = c$, por descenso es:

$$y = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 1.5 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

La solución del sistema con matriz triangular inferior $B^T x = y$, por remonte es:

$$x = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.2. Fórmulas de la factorización

Dado que A es una matriz simétrica, definida positiva y **tridiagonal** se puede guardar en los vectores diagonal principal ad y subdiagonal, o superdiagonal, as.
Puesto que la factorización de Cholesky conserva la estructura de matriz banda, la matriz B se puede guardar en los vectores diagonal principal bd y subdiagonal bs.
Igualando coeficientes, se obtienen:

- $bd_1 = \sqrt{ad_1}$, siempre que ad_1 sea positivo,
- Para $j = 1, \ldots, n-1$:

  $$bs_j = \frac{as_j}{bd_j},$$

  $$bd_{j+1} = \sqrt{ad_{j+1} - bs_j^2},\ \text{siempre que } ad_{j+1} - bs_j^2 > 0.$$

3.3. Fórmulas de la resolución por descenso

La resolución del sistema triangular inferior no singular $By = c$, con diagonal bd y subdiagonal bs, consiste en:

- $y_1 = \dfrac{c_1}{bd_1}$,
- Para $i = 2, \ldots, n$:

  $$y_i = \frac{c_i - bs_{i-1} y_{i-1}}{bd_i}.$$

3.4. Fórmulas de la resolución por remonte

La resolución del sistema triangular superior no singular $B^T x = y$, con diagonal *bd* y superdiagonal *bs*, consiste en:

- $x_n = \dfrac{y_n}{bd_n}$,
- Para $i = n-1, \dots, 1$:

  $$x_i = \frac{y_i - bs_i x_{i+1}}{bd_i}.$$

3.5. Fórmulas del residuo tridiagonal

El cálculo del residuo del sistema $r = Ax - c$, con matriz simétrica tridiagonal, consiste en:

- $r_1 = ad_1 x_1 + as_1 x_2 - c_1$,
- Para $i = 2, \ldots, n-1$:

  $r_i = as_{i-1} x_{i-1} + ad_i x_i + as_i x_{i+1} - c_i$,
- $r_n = as_{n-1} x_{n-1} + ad_n x_n - c_n$.