Descomposición (factorización) de Cholesky

Análisis Numérico

Joaquin Cavieres G.

Matrices definidas positivas

Una matriz $A \in R$ y de dimensión $n \times n$ se dice que es simétrica y definida semipositiva si:

$$x^T Ax \geq 0, \ \ \forall \ \ x$$

Una matriz $A \in R$ y de dimensión $n \times n$ se dice que es simétrica y definida positiva si:

$$x^T Ax > 0, \ \ \forall \ \ x \neq 0$$

Así, se puede apreciar que las matrices definidas positivas son un subconjunto de las matrices semidefinidas positivas. Ahora, si una matriz simétrica A de dimensión $n \times n$, entonces $x^T Ax$ puede ser expresada como:

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_i x_j = \sum_{i=1}^{n} A - i i x_i^2 + 2 \sum_{i>j} A_{ij} x_i x_j$$

que es llamada una expresión cuadrática.

Ejemplo

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 9 & 6 \\ 6 & a \end{pmatrix}$$

Aquí $x^T Ax = 9x_1^2 + 12x_1x_2 + ax_2^2 = (3x_1 + 2x_2)^2 + (a-4)x_2^2$. Por tanto, A es definita positiva para un $a > 4$ ya que:

$$x^T Ax > 0, \ \ \forall \ \ x \neq 0$$

A también es semidefinida positiva pero no definida positiva ya que para un $a = 4$

$$x^T Ax \geq 0, \ \ \forall \ \ x$$

$x^T Ax = 0$ para $x = (2, -3)$. Finalmente, A no es definida semipositiva para un $a < 4$ ya que:

$$x^T Ax < 0, \text{ para } x = (2, -3)$$

Propiedades básicas

- Una matriz A definida positiva es no singular si:

$$Ax = 0 \rightarrow x^T Ax = 0 \rightarrow x = 0$$

- Una matriz A definida positiva tiene elementos de la diagonal positivos:

$$A_{ii} = e_i^T Ae_i > 0$$

- Una matriz A definida semipositiva tiene elementos no negativos en la diagonal:

$$A_{ii} = e_i^T Ae_i \geq 0$$

Factorización de Cholesky

La factorización de Cholesky es un método que permite la descomposición de una matriz definida positiva. Este tipo de método es muy utilizado en la solución de sistémas lineales de ecuaciones, simulación de Monte Carlo o filtro de Kalman.

La descomposición de Cholesky tiene la siguiente expresión:

$$A = LL^T,$$

donde L es una matriz triangular inferior y conocida también como "el factor Cholesky de A". Esta matriz puede ser interpretada como la raíz cuadrada de una matriz definida positiva.

Descomposición de una matriz mediante la factorización de Cholesky

Existen distintos métodos para aplicar la factorización de Cholesky pero nosotros vamos a utilizar la aproximación que utiliza calculos por vector:

Primero definimos una matriz L, luego L_{k-1} representa la esquina superior izquierda $k-1 \times k-1$ de la matriz L. El elemento a_k y l_k denotan el primer $k-1$ entrada en la columna k de A y L respectivamente. Los elementos a_{kk} y l_{kk} estan definidos como las entradas de A y de L.

Pasos para el método de Cholesky:

1. Inicializar $L_1 = \sqrt{a_{11}}$
2. Para $k = 2, ..., n$

- Encontrar $L_{k-1}l_k = a_k$ para l_k
- $l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_k^T l_k}$ (Elementos de la diagonal)

- $L_k = \begin{bmatrix} L_{k-1} & 0 \\ l_k^T & l_{kk} \end{bmatrix}$

Ejemplo

Consiere la siguiente matriz A (ejemplo del libro “Methods of Multivariate Analysis” de Alvin Rencher):

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 3 \\ 4 & 8 & 6 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix}$$

- Comenzamos por encontrar L_1:

$$L_1 = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{3} = 1{,}732051$$

- Luego calculamos l_2:

$$l_2 = \frac{a_{21}}{L_1} = \frac{4}{\sqrt{3}} = 2{,}309401$$

- Ahora calculamos l_{22}:

$$l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_2^T l_2} = \sqrt{8 - 2{,}309401^2} = 1{,}632993$$

así ya tenemos la matriz L_2:

$$L_2 = \begin{bmatrix} L_1 & 0 \\ l_2^T & l_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1{,}732051 & 0 \\ 2{,}309401 & 1{,}632993 \end{bmatrix}$$

- Como la matriz original (A) es de dimensión 3×3, sólo requerimos una iteración más. Mediante la matriz L_2 podemos calcular l_3 como:

$$l_3 = \frac{a_3}{L_2} = a_3 L_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1{,}732051 & 0 \\ 2{,}309401 & 1{,}632993 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

$$l_3 = \begin{bmatrix} 1{,}7320508 \\ 1{,}224745 \end{bmatrix}$$

para así finalmente encontrar l_{33}:

$$l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_3^T l_3} = \sqrt{9 - \begin{bmatrix} 1{,}7320508 & 1{,}224745 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1{,}7320508 \\ 1{,}224745 \end{bmatrix}} = 2{,}12132$$

que nos permite encontrar L_3 como:

$$L_3 = \begin{bmatrix} 1{,}7320508 & 0 & 0 \\ 2{,}309401 & 1{,}632993 & 0 \\ 1{,}7320508 & 1{,}224745 & 2{,}12132 \end{bmatrix}$$

La matriz L_3 (por la tercera iteración) es nuestra solución. La transpuesta de la matriz encontrada (L) nos da la matriz triangular inferior.

Descomposición de Cholesky en R

```r
A = as.matrix(data.frame(c(3,4,3),c(4,8,6),c(3,6,9)))
colnames(A) = NULL
A
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    3    4    3
## [2,]    4    8    6
## [3,]    3    6    9
```

El factor de la matriz A se encuentra mediante la función `chol()`:

```r
chol_A = chol(A)
chol_A
```

```
##          [,1]     [,2]     [,3]
## [1,] 1.732051 2.309401 1.732051
## [2,] 0.000000 1.632993 1.224745
## [3,] 0.000000 0.000000 2.121320
```

La función `chol()` nos entrega una matriz triangular superior, por lo que la transpuesta nos entrega la matriz triangular inferior (tal como lo resolvimos previamente):

```r
t(chol_A)
```

```
##          [,1]     [,2]    [,3]
## [1,] 1.732051 0.000000 0.00000
## [2,] 2.309401 1.632993 0.00000
## [3,] 1.732051 1.224745 2.12132
```

Finalmente podemos encontrar la igualdad a $A = LL^T$:

```r
t(chol_A) %*% chol_A
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    3    4    3
## [2,]    4    8    6
## [3,]    3    6    9
```