Osječki matematički list 24 (2024), 99–113

Cholesky dekompozicija

Magdalena Mikić *, Suzana Miodragović †

Sažetak

U ovom članku promatramo Cholesky dekompoziciju matrice koja je simetrična i pozitivno definitna. Navodimo algoritam za njezino određivanje i ilustriramo ga primjerima. Posebno ističemo primjenu na rješavanje linearnih sustava.

Ključne riječi: *simetrične matrice, pozitivna definitnost, Cholesky dekompozicija*

Cholesky decomposition

Abstract

In this paper, we observe the Cholesky decomposition of a matrix that is symmetric and positive definite. We provide an algorithm for its determination and illustrate it with examples. We particularly emphasize its application in solving linear systems.

Keywords: *symmetric matrix, positive definiteness, Cholesky decomposition*

* Fakultet primijenjene matematike i informatike, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, email:mmikic1@mathos.hr

† Fakultet primijenjene matematike i informatike, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, email:ssusic@mathos.hr

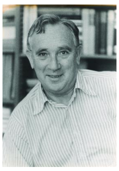
1 Uvod

Matrična dekompozicija predstavlja postupak rastavljanja matrice na produkt dvije ili više matrica jednostavnije strukture. Potreba za efikasnim rješavanjem sustava linearnih jednadžbi, analizom matrica i numeričkih metoda dovela je do razvoja matričnih dekompozicija koje su potom postale ključne tehnike u suvremenoj linearnoj matematici, numeričkoj matematici, teorijskoj fizici itd. Neke od najpoznatijih matričnih dekompozicija su LU dekompozicija, Cholesky dekompozicija, QR dekompozicija, SVD dekompozicija, a više o njima može se pronaći u [2, 3, 4, 8]. U ovom radu ćemo se posebno baviti Cholesky dekompozicijom.

Andre-Luis Cholesky (1875.–1918.) francuski vojni inženjer i matematičar.

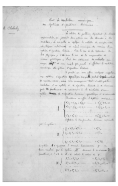
Cholesky dekompozicija ili Cholesky faktorizacija je rastav hermitske (simetrične) pozitivno-definitne matrice na produkt donjetrokutaste matrice i njezine konjugirano transponirane matrice. Ova dekompozicija je dobila naziv po francuskom vojnom inženjeru i matematičaru André-Louis Choleskyju. Godine 1907. njemački matematičar Otto Toeplitz je pokazao da se hermitska matrica može zapisati kao umnožak donjetrokutaste matrice i njezine konjugirano transponirane matrice, ali nije dao pravilo kako odrediti tu matricu. Godine 1910. je to napravio Cholesky za realan slučaj, a njegova ideja je prvi put predstavljena 1924. godine, ali samo u krugu francuskih vojnih topografa. Metodu je ponovno oživio britansko- američki matematičar John Todd, koji ju je podučavao na svom tečaju numeričke analize na King's Collegeu u Londonu 1946. godine, čime ju je učinio široko poznatom. Više pojedinosti o životu i radu André-Louis Choleskyja može se naći i u knjizi [1], gdje je predstavljen i njegov neobjavljeni rad o Cholesky metodi.

Otto Teoplitz (1881.–1940.) njemački matematičar.



John Todd (1911.—2007.) britansko-američki matematičar

Danas je primjena Cholesky dekompozicije vrlo široka. Osim što se koristi pri rješavanju sustava linearnih jednadžbi, gdje se pokazala dvostruko učinkovitija (kada je izvediva) od LU dekompozicije, primjenjuje se i kod problema svojstvenih i singularnih vrijednosti, linearnog problema najmanjih kvadrata, nelinearnoj optimizaciji i slično. U ovom radu ćemo nešto više reći o primjeni u rješavanju linearnih sustava.



prva stranica rukopisa Choleskog koji se nalazi u arhivu École Polytechnique (gdje je Cholesky studirao)

Najprije ćemo navesti osnovne pojmove i tvrdnje vezane uz simetrične matrice i svojstvo definitnosti. Primjenom Gaussovih eliminacija izvest ćemo Cholesky dekompoziciju za simetričnu pozitivno definitnu matricu, dokazati njenu jedinstvenost i zatim pokazati da je postojanje dekompozicije ekvivalentno s posjedovanjem svojstva pozitivne definitnosti. Navest ćemo algoritam za određivanje Cholesky dekompozicije, ukratko opisati njegova svojstva i na primjeru pokazati kako primijeniti navedeni algoritam. Opisat ćemo Cholesky metodu za rješavanje sustava linearnih jednadžbi i primjerom pokazati kako na taj način rješavamo sustav.

2 Simetrične matrice i definitnost

U ovom poglavlju ćemo se ukratko podsjetiti definicija simetrične matrice kao i pozitivne definitnosti matrice te ćemo navesti neka svojstva simetričnih pozitivno definitnih matrica koja su nam važna za Cholesky dekompoziciju. Pregled ovih osnovnih svojstava se može naći u [2, 6, 8, 7].

Definicija 2.1. *Za matricu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ kažemo da je simetrična ako vrijedi $A^T = A$, to jest ako je $a_{ij} = a_{ji}$, za svaki $i, j = 1, 2, \ldots, n$.*

Važno svojstvo matrica jeste njihova definitnost. Budući da smo već naglasili da se Cholesky dekompozicija može primijeniti kada je matrica simetrična i pozitivno definitna, navodimo sljedeću definiciju.

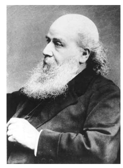
Definicija 2.2. *Simetrična matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je*

a) pozitivno definitna ako je $x^T Ax > 0$ za svaki nenul vektor $x \in \mathbb{R}^n$.

b) pozitivno semidefinitna ako je $x^T Ax \geq 0$ za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^n$.

c) indefinitna ako postoje vektori $y, z \in \mathbb{R}^n$ takvi da je $y^T Ay < 0 < z^T Az$.

Simetričnost i pozitivna definitnost jedna su od najljepših svojstava koje matrica može posjedovati. Dok simetrija matrice pojednostavljuje razne izračune s matricama, pozitivna definitnost, primjerice, osigurava numeričku stabilnost pri rješavanju linearnih sustava. Određivanje definitnosti pomaže u predviđanju ponašanja sustava i algoritama te osigurava ispravnost i efikasnost njihovih rješenja.



James Joseph Sylvester (1814.–1897.) engleski matematičar

Važan kriterij koji daje nužan i dovoljan uvjet za definitnost matrice je tzv. *Sylvesterov kriterij*. Prema ovom kriteriju je simetrična matrica A pozitivno definitna ako i samo ako su svi njeni glavni minori [1] pozitivni. Više o Sylvesterovom kriteriju, kao i sam dokaz tvrdnje, može se pronaći u [6]. Ekvivalentan uvjet za pozitivnu definitnost matrice je i da su sve njene svojstvene vrijednosti realne i pozitivne. Prisjetimo se definicije svojstvene vrijednosti matrice.

Definicija 2.3. *Neka je A zadana kvadratna matrica n-tog reda. Za skalar λ kažemo da je svojstvena ili karakteristična vrijednost matrice A ako postoji nenul vektor $x \neq 0$ takav da je $Ax = \lambda x$. Nadalje, za takav vektor x kažemo da je svojstveni ili karakteristični vektor matrice A pridružen svojstvenoj vrijednosti λ.*

[1] Glavni minori matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ su determinante njenih glavnih podmatrica tj.

$$\Delta_1 = a_{11}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}, \ldots, \quad \Delta_n = \det A.$$

Navedimo i dokažimo još neke korisne tvrdnje, koje će nam poslužiti prilikom konstrukcije Cholesky dekompozicije matrice. Dokazi ovih tvrdnji su jednostavni i zanimljivi stoga ih navodimo za svaku tvrdnju.

Lema 2.1. *Simetrična pozitivno definitna matrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ima pozitivne dijagonalne elemente.*

Dokaz. Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A = [a_{ij}]$, simetrična pozitivno definitna matrica. Prema definiciji 2.2. matrica je pozitivno definitna ako je $x^T A x > 0$ za svaki $x \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x \neq 0$. Odaberimo $x = e_i$, gdje je e_i i-ti vektor kanonske baze. Tada je $a_{ii} = e_i^T A e_i > 0$, to jest dijagonalni elementi matrice A su pozitivni. □

Lema 2.2. *Neka je $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regularna. $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je simetrična pozitivno definitna matrica ako i samo ako je matrica $S^T AS$ simetrična pozitivno definitna.*

Dokaz. Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica i $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regularna. Simetričnost matrice $S^T AS$ slijedi iz

$$(S^T AS)^T = S^T A^T S = S^T AS.$$

Budući da je S regularna, onda je $y = Sx \neq 0$, za svaki $x \neq 0$. Stoga vrijedi

$$x^T (S^T AS) x = (Sx)^T A (Sx) = y^T S y > 0.$$

Za dokaz obrata koristila bi se matrica S^{-1}. □

Lema 2.3. *Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica i B bilo koja glavna podmatrica od A, onda je B simetrična pozitivno definitna matrica.*

Dokaz. Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična i pozitivno definitna i neka je B glavna podmatrica od A reda m. Tada za svaki $y \in \mathbb{R}^m$, $y \neq 0$ i za $x \in \mathbb{R}^n$, $x = (y^T, 0)^T$ vrijedi $y^T B y = x^T A x$. Kako je A pozitivno definitna, vrijedi $x^T A x > 0$, pa zaključujemo $y^T B y > 0$, odnosno B je pozitivno definitna. Simetričnost podmatrice B je očita. □

Može se, također, pokazati da je svaka pozitivno definitna simetrična matrica punog ranga, to jest da je regularna matrica. Taj rezultat osigurava postojanje rješenja kad god imamo sustav s pozitivno definitnom matricom. Iz tog razloga u nastavku ne moramo posebno zahtijevati regularnost.

Lema 2.4. *Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica, onda je A regularna.*

Dokaz. Pretpostavimo da je A singularna. Tada je $Ax = 0$ za neki $x \neq 0$, što povlači $x^T A x = 0$ za neki $x \neq 0$. To je u kontradikciji s pozitivnom definitnosti matrice A. □

3 Cholesky dekompozicija

Kako smo već ranije istaknuli, Cholesky dekompozicija predstavlja rastav simetrične pozitivno definitne matrice na produkt donjetrokutaste matrice i njezine transponirane gornje trokutaste matrice. Prvo ćemo pokazati kako koristeći poznate Gaussove eliminacije možemo izvesti ovu dekompoziciju, a zatim ćemo navesti elegantan i konstruktivan dokaz koji potvrđuje postojanje i jedinstvenost takve dekompozicije.
Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ dana s

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Pretpostavimo da je A simetrična pozitivno definitna matrica. Cilj je matricu A rastaviti na sljedeći način:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{12} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{1n} & l_{2n} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & \cdots & l_{1n} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}.$$

Neka su $u_1, v_1 \in \mathbb{R}^n$ vektori zadani s

$$u_1 = (0, m_{21}, m_{31}, \ldots, m_{n1})^T, \quad v_1 = (1, 0, 0, \ldots, 0)^T$$

te $M_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ elementarna matrica koju određujemo na sljedeći način:

$$M_1 = I - u_1 v_1^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

pri čemu je $m_{i1} := \dfrac{a_{i1}}{a_{11}}$, $i = 2, \ldots, n$. Množeći matricu A slijeva s M_1 i zdesna s M_1^T dobivamo

$$A^{(2)} = M_1 A M_1^T = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix},$$

gdje su $a_{ij}^{(2)} = a_{ij} - m_{i1}a_{1j}$, $i, j = 2, \ldots, n$. Sada definiramo matricu $M_2 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ kao $M_2 = I - u_2 v_2^T$, gdje su

$$u_2 = (0, 0, m_{32}, \ldots, m_{n2})^T, v_2 = (0, 1, 0, \ldots, 0)^T,$$

uz oznaku $m_{i2} := \dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$, $i = 3, \ldots, n$. Tada je

$$A^{(3)} = M_2 A^{(2)} M_2^T == M_2 M_1 A M_1^T M_2^T = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix},$$

gdje su $a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2}a_{2j}^{(2)}$, $i, j = 3, \ldots, n$. Postupak nastavljamo analogno i nakon $n-1$ koraka dobivamo

$$M_{n-1} \cdots M_2 M_1 A M_1^T M_2^T \cdots M_{n-1}^T = \text{diag}\,(a_{11}, a_{22}^{(2)}, \ldots, a_{nn}^{(n)}) := D. \quad (1)$$

Matrica D je dijagonalna matrica, pa je stoga i simetrična. Uočimo da sada pozitivna definitnost matrice A osigurava da i dijagonalni elementi matrice D budu pozitivni. Kako? Naime, prema lemi 2.2., uz oznaku $S = M_1^T M_2^T \cdots M_{n-1}^T$, matrica $D = S^T A S$ je pozitivno definitna, a lema 2.1. tada povlači da su njeni dijagonalni elementi pozitivni. Stoga možemo definirati

$$\sqrt{D} := \text{diag}\left(\sqrt{a_{11}}, \sqrt{a_{22}^{(2)}}, \ldots, \sqrt{a_{nn}^{(n)}}\right).$$

Tada je $D = \sqrt{D} \cdot \sqrt{D}$. Množeći jednakost (1) slijeva s $M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1}$ i zdesna s $(M_{n-1}^T)^{-1} \cdots (M_2^T)^{-1} (M_1^T)^{-1}$ dobivamo

$$A = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} \sqrt{D} \sqrt{D} (M_{n-1}^T)^{-1} \cdots (M_2^T)^{-1} (M_1^T)^{-1}.$$

Uvedemo li sljedeće oznake

$$L := M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} \sqrt{D},$$

$$L^T := \sqrt{D} (M_{n-1}^T)^{-1} \cdots (M_2^T)^{-1} (M_1^T)^{-1},$$

matricu A možemo zapisati na sljedeći način

$$A = LL^T.$$

Uočimo da je matrica L donjetrokutasta matrica kao umnožak $n-1$ donjetrokutastih matrica $M_i^{-1}, i = 1, \ldots, n-1$ i dijagonalne matrice $\sqrt{D}$.[2] Jasno je sada da je na ovaj način dobivena upravo Cholesky dekompozicija.

Cholesky dekompoziciju matrice možemo zapisati u ekvivalentnom obliku na sljedeći način

$$A = R^T R,$$

gdje je $R = L^T$ gornjetrokutasta matrica.

Lako se može pokazati da je ova dekompozicija matrice jedinstvena. Pretpostavimo da su L i $\tilde{L}$ regularne donjetrokutaste matrice takve da je

$$A = LL^T = \tilde{L}\tilde{L}^T.$$

Kako su L i $\tilde{L}$ regularne, postoje njihove inverzne matrice, pa možemo pomnožiti prethodnu jednakost slijeva s $\tilde{L}^{-1}$ i zdesna s $(L^T)^{-1}$. Dobivamo

$$\tilde{L}^{-1}L = \tilde{L}^T(L^T)^{-1}.$$

Matrica $\tilde{L}$ je donjetrokutasta pa je donjetrokutasti i njen inverz. Isto tako matrica $(L^T)^{-1}$ je gornjetrokutasta, kao inverz gornjetrokutaste matrice. Dakle, na lijevoj strani jednakosti imamo produkt dvije donjetrokutaste matrice, što je ponovno donjetrokutasta matrica, a na desnoj strani imamo gornjetrokutastu matricu, kao produkt dvije gornjetrokutaste matrice. Iz tog razloga, matrice s obje strane jednakosti moraju biti dijagonalne pa imamo

$$\tilde{L}^{-1}L = G, \;\; \tilde{L}^T(L^T)^{-1} = G.$$

Množenjem prve jednakosti slijeva s $\tilde{L}$ i transponiranjem druge jednakosti dobivamo

$$L = \tilde{L}G, \;\; L^{-1}\tilde{L} = G.$$

Pomnožimo li drugu jednakost slijeva s L, imamo $\tilde{L} = LG$. Uvrštavanjem ovog izraza u prvu jednakost slijedi da je $L = LG^2$, što je moguće jedino ako je $G = I$. Time je pokazana jedinstvenost prikaza.

Iz svega do sada smo vidjeli da se svaka simetrična pozitivno definitna matrica na jedinstven način može rastaviti na produkt LL^T, gdje je L donjetrokutasta matrica. Može se pokazati i obratno, da je svaka matrica oblika LL^T je simetrična i pozitivno definitna. U dokazu idućeg teorema pokazat ćemo upravo taj obrat, i ne samo to, na još jedan elegantniji način, primjenom matematičke indukcije, pokazat ćemo egzistenciju i jedinstvenost Cholesky dekompozicije.

[2] Inverz donjetrokutaste matrice je donjetrokutasta matrica, a umnožak donjetrokutastih matrica je opet donjetrokutasta matrica.

Teorem 3.1. *$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je simetrična pozitivno definitna matrica ako i samo ako postoji jedinstvena donjetrokutasta regularna matrica $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$, s pozitivnim dijagonalnim elementima, takva da je $A = LL^T$.*

Dokaz. Pretpostavimo da je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica. Pokazat ćemo postojanje matrice L indukcijom po redu matrice n. Odaberemo li da je $l_{ii} > 0$, za svaki $i = 1, \dots, n$, dobit ćemo jedinstveni L. Za $n = 1$ imamo $A = [a_{11}]$. A je simetrična i za $a_{11} > 0$ A je pozitivno definitna. Tada je $L = [\sqrt{a_{11}}]$ dobro definirana i vrijedi

$$A = [\sqrt{a_{11}}][\sqrt{a_{11}}] = LL^T.$$

Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za matrice reda $n-1$, to jest da za sve simetrične pozitivno definitne matrice A reda $n-1$ postoji jedinstveni rastav u obliku $A = LL^T$. Pokažimo da tvrdnja vrijedi za matrice reda n. Neka je A simetrična pozitivno definitna matrica reda n. A možemo rastaviti na sljedeći način

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{12} \\ A_{12}^T & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 \\ \frac{A_{12}^T}{\sqrt{a_{11}}} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \frac{A_{12}}{\sqrt{a_{11}}} \\ 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{12} \\ A_{12}^T & \tilde{A}_{22} + \frac{A_{12}^T A_{12}}{a_{11}} \end{bmatrix},$$

pri čemu vrijedi $\tilde{A}_{22} = A_{22} - \frac{A_{12}^T A_{12}}{a_{11}}$. Prema lemi 2.2. matrica $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix}$ je simetrična i pozitivno definitna pa je prema lemi 2.3. matrica $\tilde{A}_{22}$ također simetrična i pozitivno definitna. Prema pretpostavci indukcije, za matricu $\tilde{A}_{22}$ postoji matrica $\tilde{L}$ takva da je $\tilde{A}_{22} = \tilde{L}\tilde{L}^T$. Sada je

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 \\ \frac{A_{12}^T}{\sqrt{a_{11}}} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{L}\tilde{L}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \frac{A_{12}}{\sqrt{a_{11}}} \\ 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 \\ \frac{A_{12}^T}{\sqrt{a_{11}}} & \tilde{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \frac{A_{12}}{\sqrt{a_{11}}} \\ 0 & \tilde{L}^T \end{bmatrix} = LL^T.$$

Obratno, pretpostavimo da se A može faktorizirati u obliku $A = LL^T$, pri čemu je L donjetrokutasta regularna matrica. Primijetimo da je A simetrična. Vrijedi

$$A^T = (LL^T)^T = LL^T = A.$$

Neka je $x \in \mathbb{R}^n$ proizvoljan, $x \neq 0$. Matrica L je regularna pa za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Lx \neq 0$. Tada vrijedi

$$x^T Ax = (x^T L)(L^T x) = (L^T x)^T (L^T x) = \|Lx^T\|_2^2 > 0$$

pa je A simetrična i pozitivno definitna matrica [3]. $\square$

Upravo dokazana ekvivalencija osigurava praktičan test za ispitivanje pozitivne definitnosti matrice koristeći Cholesky dekompoziciju. Dakle, ukoliko postoji Cholesky dekompozicija matrice A, sa strogo pozitivnim korijenima, onda je A pozitivno definitna. Računanje Cholesky dekompozicije je puno brži način provjere pozitivne definitnosti matrice, nego primjerice računanje svojstvenih vrijednosti matrice.

Dokaz prethodnog teorema je konstruktivan i daje nam jedan način određivanja dekompozicije. Međutim, u nastavku ćemo izvesti jednostavne formule za računanje koeficijenata matrice L koristeći samo jednakost $A = LL^T$, te navesti algoritam za njihovo računanje.

3.1 Algoritam

Pokažimo sada na primjeru kako jednostavno možemo odrediti matricu L direktno iz jednakosti $A = LL^T$.

Primjer 3.1. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ simetrična i pozitivno definitna. Tada je možemo rastaviti na sljedeći način $A = LL^T$, gdje je $L \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ donjetrokutasta matrica. Odredimo koeficijente matrice L.*
Imamo

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 \\ l_{21} & l_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} \\ 0 & l_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11}l_{21} \\ l_{11}l_{21} & l_{21}^2 + l_{22}^2 \end{bmatrix}.$$

Zbog simetrije matrice vrijedi $a_{21} = a_{12}$. Izjednačavanjem koeficijenata s lijeve i desne strane dobivamo sljedeće jednadžbe

$$a_{11} = l_{11}^2, \quad a_{21} = a_{12} = l_{11}l_{21}, \quad a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2,$$

iz kojih jednostavno slijede formule za koeficijente matrice L

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}}, \quad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}.$$

Analogno, kao u prethodnom primjeru, možemo izračunati koeficijente za matrice višeg reda. Zahvaljujući simetriji, dovoljno je promatrati samo donji trokut matrice, to jest elemente za koje vrijedi $i \geq j$. Na taj način dobivamo algoritam za određivanje Cholesky dekompozicije.

[3] $\|\cdot\|_2$ označava matričnu 2-normu. Detaljnije o matričnim normama može se pronaći u [5].

Cholesky algoritam:

Ulaz: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simetrična i pozitivno definitna matrica
Izlaz: $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, donjetrokutasta matrica s pozitivnim dijagonalnim elementima takva da je $A = LL^T$

for *j=1 to n* **do**

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

for *i=j+1 to n* **do**

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

end

end

Algoritam se može provoditi po retcima matrice, po stupcima matrice ili koristeći podmatrice. Postoje razne njegove varijante, o čemu se više može pronaći u [3] i [4]. Njegova prednost je u tome što je za pohranu potrebno gotovo dva puta manje prostora, za razliku od *LU* dekompozicije. Dok algoritam *LU* dekompozicije zahtjeva pohranu n^2 podataka, Cholesky algoritam, zahvaljujući simetriji matrice, zahtjeva pohranu $\frac{n(n+1)}{2}$ podataka. Također, broj potrebnih aritmetičkih operacija iznosi približno $\frac{1}{3}n^3$, što je otprilike polovina broja aritmetičkih operacija potrebnih za *LU* dekompoziciju. Razlog tomu je što kod Cholesky dekompozicije određujemo samo jednu trokutastu matricu, dok kod *LU* dekompozicije moramo odrediti dvije. Dakle, složenost algoritma je dva puta manja u odnosu na *LU* dekompoziciju pa je u slučaju simetrične pozitivno definitne matrice uvijek pogodnije koristiti ovaj algoritam. Nedostatak je taj što navedeni algoritam možemo koristiti samo u slučaju realne simetrične pozitivno definitne matrice. Ukoliko matrica A nije pozitivno definitna, moglo bi se dogoditi da se pod korijenom nađe negativan broj ili da dođe do dijeljenja s nulom. Na to također treba obratiti pozornost kada radimo u aritmetici računala, gdje i u slučaju pozitivno definitne matrice može doći do grešaka u zaokruživanju te se na taj način može dobiti krivi zaključak o definitnosti.

Napomena 3.1. *Algoritam se iznimno može upotrijebiti i kada imamo pozitivno semidefinitnu matricu, no u tom slučaju dekompozicija ne mora biti jedinstvena. Dijagonalni elementi matrice L pritom mogu biti jednaki* 0*. Primjerice, matricu*

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

možemo rastaviti na produkt donjetrokutaste i njoj transponirane gornjetrokutaste matrice na sljedeći način

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \cos\varphi & \sin\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \cos\varphi \\ 0 & \sin\varphi \end{bmatrix}.$$

Očito je da ovakva faktorizacija nije jedinstvena, jer za različite vrijednosti kuta φ dobijemo različite matrice L. Više o Cholesky dekompoziciji pozitivno semidefinitne matrice može se pronaći u [4].

Iako smo mi u ovom radu promatrali samo slučaj kada je matrica sustava realna, Cholesky dekompoziciju je moguće načiniti i ako imamo matricu s kompleksnim koeficijentima, to jest matricu iz $\mathbb{C}^{n\times n}$. Tada matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ koja je hermitska pozitivno definitna, prema Cholesky dekompoziciji, možemo zapisati kao $A = LL^*$, gdje je $L^* = \overline{L^T}$ kompleksno konjugirana i transponirana matrica L. Budući da u slučaju matrice s kompleksnim koeficijentima imamo kompleksne brojeve koriste se slične, ali prilagođene, verzije algoritma.
Navodimo jedan jednostavan primjer Cholesky dekompozicije realne simetrične matrice primjenom prethodno navedenog algoritma.

Primjer 3.2. *Odredimo Cholesky dekompoziciju matrice*

$$A = \begin{bmatrix} 16 & 8 & 4 \\ 8 & 29 & 17 \\ 4 & 17 & 19 \end{bmatrix}.$$

Uočimo najprije da je matrica A simetrična, odnosno vrijedi $A = A^T$. Vrijedi

$$\Delta_1 = 16 > 0,\ \Delta_2 = \begin{vmatrix} 16 & 8 \\ 8 & 29 \end{vmatrix} = 400 > 0,\ \Delta_3 = \begin{vmatrix} 16 & 8 & 4 \\ 8 & 29 & 17 \\ 4 & 17 & 19 \end{vmatrix} = 3600 > 0$$

pa Sylvesterov kriterij povlači da je ona i pozitivno definitna. Dakle, moguće je odrediti njezinu Cholesky faktorizaciju. Koristeći gore navedeni algoritam dobi-

vamo

$$\begin{aligned}
l_{11} &= \sqrt{a_{11}} = 4, \\
l_{21} &= \frac{1}{l_{11}} \cdot a_{21} = 2, \\
l_{31} &= \frac{1}{l_{11}} \cdot a_{31} = 1, \\
l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 5, \\
l_{32} &= \frac{1}{l_{22}} \cdot (a_{32} - l_{31} l_{21}) = 3, \\
l_{33} &= \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 3,
\end{aligned}$$

iz čega slijedi

$$L = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 1 & 3 & 3 \end{bmatrix}.$$

Cholesky dekompozicija matrice A je stoga dana s

$$A = LL^T = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 1 & 3 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 5 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

3.2 Cholesky metoda

Kao što smo već rekli, Cholesky dekompozicija svoju važnu primjenu nalazi u rješavanju linearnih sustava. S obzirom na njezinu učinkovitost, posebno je važna za numeričko rješavanje sustava. Promotrimo sustav linearnih jednadžbi $Ax = b$, pri čemu je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica. Tada matricu sustava A možemo zapisati kao produkt LL^T, a zatim sustav riješiti primjenjujući algoritme za rješavanje supstitucijom unaprijed i supstitucijom unazad. Dakle, provodimo sljedeće korake:

1) Prikažemo A kao LL^T. Sustav je tada oblika $LL^T x = b$.

2) Supstitucijom unaprijed riješimo sustav $Lz = b$.

3) Supstitucijom unazad riješimo sustav $L^T x = z$.

Opisani postupak naziva se *Cholesky metoda* za rješavanje sustava linearnih jednadžbi. Pokažimo sada na jednostavnom primjeru kako možemo lako riješiti sustav ovom metodom.

Primjer 3.3. *Riješimo sljedeći sustav linearnih jednadžbi*

$$\begin{array}{ccccccc} x_1 & + & 3x_2 & + & 5x_3 & = & 3 \\ 3x_1 & + & 45x_2 & + & 45x_3 & = & 27 \\ 5x_1 & + & 45x_2 & + & 75x_3 & = & 35 \end{array}$$

Zapišemo li sustav u matričnom obliku $Ax = b$, gdje je

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 3 & 45 & 45 \\ 5 & 45 & 75 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 27 \\ 35 \end{bmatrix},$$

možemo uočiti da je matrica sustava simetrična. Dakle, vrijedi $A = A^T$. Koristeći Sylvesterov kriterij, provjerimo je li ona i pozitivno definitna. Imamo

$$\Delta_1 = 1 > 0, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 45 \end{vmatrix} = 36 > 0, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 3 & 45 & 45 \\ 5 & 45 & 75 \end{vmatrix} = 900 > 0.$$

Vidimo da su svi glavni minori matrice sustava pozitivni, odnosno matrica sustava je pozitivno definitna. Dakle, možemo napraviti Cholesky dekompoziciju matrice A i sustav riješiti Cholesky metodom. Odredimo koeficijente matrice L:

$$\begin{aligned} l_{11} &= \sqrt{a_{11}} = 1, \\ l_{21} &= \frac{1}{l_{11}} \cdot a_{21} = 3, \\ l_{31} &= \frac{1}{l_{11}} \cdot a_{31} = 5, \\ l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 6, \\ l_{32} &= \frac{1}{l_{22}} \cdot (a_{32} - l_{31} l_{21}) = 5, \\ l_{33} &= \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 5. \end{aligned}$$

Dobivamo

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 5 & 5 & 5 \end{bmatrix} \quad i \quad A = LL^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 5 & 5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 0 & 6 & 5 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}.$$

Uvrstimo li $A = LL^T$ u sustav $Ax = b$, dobivamo $LL^T x = b$. Označimo $z = L^T x$ i najprije riješimo sustav $Lz = b$. Dakle, imamo

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 5 & 5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 27 \\ 35 \end{bmatrix}.$$

Sustav je donjetrokutasti i jednostavno ga rješavamo supstitucijom unaprijed. Slijedi

$$\begin{aligned} z_1 &= \frac{b_1}{l_{11}} = 3, \\ z_2 &= \frac{1}{l_{22}}(b_2 - l_{21}x_1) = 3, \\ z_3 &= \frac{1}{l_{33}}(b_3 - l_{31}x_1 - l_{32}x_2) = 1. \end{aligned}$$

Sada riješimo sustav $L^T x = z$, *gdje je* $z = (3, 3, 1)^T$. *Imamo*

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 0 & 6 & 5 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Sustav je gornjetrokutasti i jednostavno ga rješavamo supstitucijom unazad. Dobivamo

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{z_3}{l_{33}} = \frac{1}{5}, \\ x_2 &= \frac{1}{l_{22}}(z_2 - l_{32}x_3) = \frac{1}{3}, \\ x_1 &= \frac{1}{l_{11}}(z_1 - l_{21}x_2 - l_{31}x_3) = 1. \end{aligned}$$

Dakle, rješenje zadanog sustava je $x = \left(1, \frac{1}{3}, \frac{1}{5}\right)^T$.

Kao što smo već spomenuli, Cholesky metoda se često koristi pri numeričkom rješavanju sustava linearnih jednadžbi. U primjenama se nerijetko javljaju veliki linearni sustavi, koji se rješavaju računalno, gdje pak često dolazi do grešaka u zaokruživanju. Ova metoda pokazuje se kao numerički stabilna metoda. Ako pretpostavimo da smo riješili sustav $Ax = b$ koristeći Cholesky metodu i za rješenje dobili $\tilde{x}$, pokazuje se da $\tilde{x}$ zadovoljava sustav $(A + \Delta A)\tilde{x} = b$, pri čemu je $\|\Delta A\|_2 \leq c_n \varepsilon \|A\|_2$, gdje je c_n mala konstanta koja ovisi o n, a ε greška zaokruživanja. Više o stabilnosti algoritma i analizi grešaka može se pronaći u [5].

Literatura

[1] C. Brezinski, D. Tournès, *André-Louis Cholesky (1875-1918), Mathematician, Topographer and Army Officer*, Birkhäuser, Basel, 2014.

[2] J. W. Demmel, *Applied Numerical Linear Algebra*, MIT, 1996.

[3] Z. Drmač, V. Hari, M. Marušić, M. Rogina, I. Slapničar, S. Singer, S. Singer, *Numerička analiza, Predavanja i vježbe*, & Zagreb, 2003. `https://web.math.pmf.unizg.hr/~rogina/2001096/num_anal.pdf`

[4] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations (Third edition)*, The J. Hopkins University Press, 1996.

[5] N. J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms (Second Edition)*, SIAM, Philadelphia, 2002.

[6] R. A. Horn, C. R. Johnson, *Matrix Analysis, (Second edition)*, Cambridge University Press, 2013.

[7] I. C. F. Ipsen, *Numerical Matrix Analysis: Linear Systems and Least Squares*, SIAM, Philadelphia, 2009.

[8] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku – Odjel za matematiku, Osijek, 2015.