# Metoda Choleskiego rozkładu $LL^T$

Niech

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

będzie macierzą symetryczną ($a_{ij} = a_{ji}$) i dodatnio okresloną (dla każdego $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$). Istnieje wówczas macierz dolnotrójkątna $L$ taka, że $LL^T = A$.

**Algorytm 1** Sekwencyjna (skalarna) metoda Choleskiego

**Wejście:** $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,
**Wyjście:** $a_{ij} = l_{ij}$, $1 \leqslant j \leqslant i \leqslant n$

1: **for** $j = 1$ to $n$ **do**
2:   **for** $k = 1$ to $j - 1$ **do**
3:     **for** $i = j$ to $n$ **do**
4:       $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{jk} a_{ik}$
5:     **end for**
6:   **end for**
7:   $a_{jj} \leftarrow \sqrt{a_{jj}}$
8:   **for** $i = j + 1$ to $n$ **do**
9:     $a_{ij} \leftarrow a_{ij} / a_{jj}$
10:   **end for**
11: **end for**

## Wykorzystanie BLAS-u poziomu pierwszego

Pętle z linii 3–5 oraz 8–10 algorytmu 1 mogą być zapisane w postaci wektorowej otrzymamy wówczas następujący algorytm wektorowy.

Instrukcja 3 może być zrealizowana w postaci operacji `AXPY`, zaś instrukcja 6 jako operacja `SCAL` z pierwszego poziomu BLAS-u.

## Wykorzystanie BLAS-u poziomu drugiego

Pętla z linii 2–4 algorytmu 2 może być zapisana w postaci w postaci operacji `GEMV` (mnożenie macierz-wektor) z drugiego poziomu BLAS-u.

## Wykorzystanie BLAS-u poziomu trzeciego

Aby wyrazić rozkład Choleskiego w postaci wywołań operacji z trzeciego poziomu BLAS-u, zapiszmy rozkład w następującej postaci blokowej:

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & L_{22} & \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11}^T & L_{21}^T & L_{31}^T \\ & L_{22}^T & L_{32}^T \\ & & L_{33}^T \end{bmatrix}.$$

**Algorytm 2** Wektorowa metoda Choleskiego

**Wejście:** $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

**Wyjście:** $a_{ij} = l_{ij}$, $1 \leqslant j \leqslant i \leqslant n$

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

  **for** $k = 1$ to $j-1$ **do**

$$\begin{bmatrix} a_{jj} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} a_{jj} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} - a_{jk} \begin{bmatrix} a_{jk} \\ \vdots \\ a_{nk} \end{bmatrix}$$

  **end for**

  $a_{jj} \leftarrow \sqrt{a_{jj}}$

$$\begin{bmatrix} a_{j+1,j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} \leftarrow \frac{1}{a_{jj}} \begin{bmatrix} a_{j+1,j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix}$$

**end for**

**Algorytm 3** Wektorowo-macierzowa metoda Choleskiego

**Wejście:** $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

**Wyjście:** $a_{ij} = l_{ij}$, $1 \leqslant j \leqslant i \leqslant n$

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

$$\begin{bmatrix} a_{jj} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} a_{jj} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a_{j1} & \dots & a_{j,j-1} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{n,j-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} a_{j1} \\ \vdots \\ a_{j,j-1} \end{bmatrix}$$

  $a_{jj} \leftarrow \sqrt{a_{jj}}$

$$\begin{bmatrix} a_{j+1,j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix} \leftarrow \frac{1}{a_{jj}} \begin{bmatrix} a_{j+1,j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{bmatrix}$$

**end for**

Stąd

$$A = \begin{bmatrix} L_{11}L_{11}^T & L_{11}L_{21}^T & L_{11}L_{31}^T \\ L_{21}L_{11}^T & L_{21}L_{21}^T + L_{22}L_{22}^T & L_{21}L_{31}^T + L_{22}L_{32}^T \\ L_{31}L_{11}^T & L_{31}L_{21}^T + L_{32}L_{22}^T & L_{31}L_{31}^T + L_{32}L_{32}^T + L_{33}L_{33}^T \end{bmatrix}.$$

Przyjmijmy, że został już zrealizowany pierwszy krok blokowej metody i powstał następujący rozkład:

$$A = \begin{bmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & I & \\ L_{31} & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11}^T & L_{21}^T & L_{31}^T \\ 0 & A_{22} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix},$$

co uzyskujemy dokonując najpierw rozkładu $A_{11} = L_{11}L_{11}^T$, a następnie rozwiązując układ równań postaci

$$\begin{bmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{bmatrix} L_{11}^T = \begin{bmatrix} A_{21} \\ A_{31} \end{bmatrix}.$$

W kolejnym kroku rozpoczynamy od aktualizacji pozostałych bloków przy pomocy bloków już wyznaczonych

$$\begin{bmatrix} A_{22} \\ A_{32} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} A_{22} \\ A_{32} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{bmatrix} L_{21}^T$$

oraz

$$\begin{bmatrix} A_{23} \\ A_{33} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} A_{23} \\ A_{33} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{bmatrix} L_{31}^T.$$

Łącząc powyższe operacje w jedną, otrzymujemy

$$\begin{bmatrix} A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{21}^T & L_{31}^T \end{bmatrix}.$$

Następnie dokonujemy rozkładu $A_{22} = L_{22}L_{22}^T$, po czym dokonujemy aktualizacji rozwiązując układ równań liniowych o macierz trójkątnej

$$A_{32} = L_{32}L_{22}^T.$$

Otrzymujemy wówaczas następujący rozkład

$$A = \begin{bmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & L_{22} & \\ L_{31} & L_{32} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11}^T & L_{21}^T & L_{31}^T \\ 0 & L_{22}^T & L_{32}^T \\ 0 & 0 & A_{33} \end{bmatrix}.$$

W kolejnych krokach w analogiczny sposób zajmujemy się rozkładem bloku $A_{33}$. Niech teraz macierz $A$ będzie dana w postaci blokowej

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1p} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{p1} & A_{p2} & \dots & A_{pp} \end{bmatrix},$$

gdzie $A_{ij} = A_{ji}^T$ dla $1 \leqslant i, j \leqslant p$. Następujący algorytm dokonuje rozkładu Choleskiego przy wykorzystaniu blasu poziomu trzeciego.

**Algorytm 4** Macierzowa metoda Choleskiego

**Wejście:** $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

**Wyjście:** $a_{ij} = l_{ij}$, $1 \leqslant j \leqslant i \leqslant n$

**for** $j = 1$ to $p$ **do**

  $A_{jj} \leftarrow \mathrm{chol}(A_{jj})$

  **if** $j < p$ **then**

$$\begin{bmatrix} A_{j+1,j} \\ \vdots \\ A_{pj} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} A_{j+1,j} \\ \vdots \\ A_{pj} \end{bmatrix} \times A_{jj}^{-T}$$

$$\begin{bmatrix} A_{j+1,j+1} & \dots & A_{j+1,p} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{p,j+1} & \dots & A_{pp} \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} A_{j+1,j+1} & \dots & A_{j+1,p} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{p,j+1} & \dots & A_{pp} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A_{j+1,j} \\ \vdots \\ A_{pj} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_{j+1,j}^T \dots A_{pj}^T \end{bmatrix}$$

  **end if**

**end for**

## Porównanie wydajności systemów komputerowych dla poszczególnych algorytmów

Tabela 1 pokazuje wydajność algorytmów wykorzystujących poszczególne poziomy BLASu dla różnych wartości $n$ na komputerze z procesorem Pentium 4 3.2GHz. Wydajność komputera z procesorem P4 dla algorytmu 1 utrzymuje się na poziomie 400-500 Mflops.

| $n$ | Algorytm 2 | Algorytm 3 | Algorytm 4 |
|---|---|---|---|
| 100 | 525.76 | 1383.12 | 1388.88 |
| 500 | 1831.09 | 1446.40 | 3403.86 |
| 1000 | 882.92 | 995.31 | 4533.79 |
| 1500 | 909.71 | 844.13 | 4745.53 |
| 2000 | 917.82 | 850.82 | 5411.17 |

Tabela 1: Wydajność P4 dla rozważanych algorytmów (Mflops)